

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-graduação em Física

Luiz Cláudio de Oliveira Gomes Júnior

SISTEMAS DE SPINS INTERAGENTES MAPEÁVEIS
EM FÉRMIONS NÃO-INTERAGENTES

Belo Horizonte
2025

Luiz Cláudio de Oliveira Gomes Júnior

SISTEMAS DE SPINS INTERAGENTES MAPEÁVEIS EM FÉRMIONS NÃO-INTERAGENTES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Raphael Campos Drumond

Belo Horizonte

2025

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

G633s Gomes Júnior, Luiz Cláudio de Oliveira.
Sistemas de spins interagentes mapeáveis em férmions não-interagentes /
Luiz Cláudio de Oliveira Gomes Júnior. – 2025.
56 f. : il.

Orientador: Raphael Campos Drumond.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.
Bibliografia: f. 52-53.

1. Mecânica quântica. 2. Férmions. 3. Modelo de Ising. 4. Entropia. 5.
Sistemas abertos. I. Título. II. Drumond, Raphael Campos. III. Universidade
Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 530.145 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente dissertação, intitulada "**Sistemas de spins interagentes mapeáveis em férmions não-interagentes**" de autoria de **LUIZ CLÁUDIO DE OLIVEIRA GOMES JR** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **MESTRE EM FÍSICA, área de concentração Física**, em 06 de março de 2025.

Belo Horizonte, 06 de março de 2025.

Prof. Raphael Campos Drumond
Orientador
Departamento de Matemática/UFMG

Prof. Sebastião José Nascimento de Pádua
Departamento de Física/UFMG

Prof. Emmanuel Araújo Pereira
Departamento de Física/UFMG



Documento assinado eletronicamente por **Sebastião Jose Nascimento de Padua, Professor(a)**, em 06/03/2025, às 16:43, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Raphael Campos Drumond, Professor do Magistério Superior**, em 06/03/2025, às 17:01, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Emmanuel Araujo Pereira, Membro de comissão**, em 06/03/2025, às 21:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **4011426** e o código CRC **3CE8F991**.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer meus pais que, desde o início, demonstraram apoio e entusiasmo com meus estudos.

Ao professor Raphael Campos Drumond, que sempre demonstrou paciência e disponibilidade, tornando minha trajetória no mestrado mais agradável.

Aos professores e demais funcionários da universidade,

E agradeço a CAPES, pelo apoio financeiro.

Resumo

Trata-se de um texto de revisão sobre sistemas integráveis dentro da mecânica quântica de muitos corpos. Com o foco em sistemas de spins interagentes cujo hamiltoniano pode ser mapeado, via transformada de Jordan-Wigner em um hamiltoniano de férmions livres, e assim diagonalizado.

Aborda os passos para realizar a transformada e trata sobre os modelos de Ising e XY. Para o primeiro modelo apresenta os resultados exatos para os estados fundamentais de energia e, para transição entre fases ferromagnética e paramagnética relacionadas a intensidade do campo magnético externo. Para o segundo modelo apresenta a equação da dependência temporal da entropia de emaranhamento numa rede de spins e, como o comportamento da entropia de emaranhamento é modificado com a aplicação de desordem no campo magnético externo, o que leva a rede para uma fase localizada.

Elabora sobre sistemas abertos, acoplando reservatórios térmicos nas extremidades da rede de spins, apresentando as definições para variação de calor e trabalho. Utiliza a equação mestra de Lindblad para descrever a evolução temporal da matriz densidade de estado, em conjunto com o método de interações repetidas que descreve a interação reservatório e sistema.

Palavras-chave: Transformação de Jordan-Wigner, relações canônicas de comutação para férmions, Modelo de Ising transverso, modelo XY, entropia de emaranhamento, sistemas fechados, sistemas abertos.

Abstract

This is a review text on integrable systems within many-body quantum mechanics. It focuses on interacting spin systems whose Hamiltonian can be mapped via the Jordan-Wigner transform into a Hamiltonian of free fermions, and thus diagonalized.

It approaches the steps to perform the transform and deals with the Ising and XY models. For the first model, it presents the exact results for the fundamental energy states and for the transition between ferromagnetic and paramagnetic phases related to the intensity of the external magnetic field. For the second model, he presents the equation for the time dependence of entanglement entropy in a spin chain and how the behaviour of entanglement entropy changes with the application of disorder in the external magnetic field, which leads the chain to a localized phase.

It elaborates on open systems, coupling thermal reservoirs at the extremities of the spin chain, presenting the definitions for heat and work variation . It uses the Lindblad master equation to describe the time evolution of the density matrix state , together with the method of repeated interactions that describes the interaction between reservoir and system.

Keywords: Jordan-Wigner transform, canonical commutation relations for fermions, Transverse Ising model, XY model, entanglement entropy, internal systems, open systems.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	10
2	CONCEITOS MATEMÁTICOS BÁSICOS	12
2.1	Sistemas de um único espaço vetorial e notação de Dirac	12
2.1.1	Sistemas de um único spin	14
2.2	Produto tensorial e sistemas compostos	15
2.2.1	Sistemas de vários spins	16
3	TRANSFORMAÇÃO DE JORDAN-WIGNER	18
3.1	Relações canônicas de anticomutação para férmions.	18
3.1.1	Operadores criação e destruição	19
3.1.2	Transformação de Jordan-Wigner	20
3.1.3	Hamiltoniano de férmions	20
4	TRANSIÇÃO DE FASE NO MODELO DE ISING COM CAMPO TRANSVERSO	23
4.1	O modelo de Ising transverso	23
4.1.1	Modelo de Ising clássico	24
4.1.2	Fase ferromagnética e quebra da degenerescência	26
4.1.3	Fase paramagnética	27
4.1.4	Transição de fase	28
4.1.5	Estrutura geral dos estados de baixa energia	30
5	DIAGONALIZAÇÃO DO HAMILTONIANO DE ISING	32
5.1	Diagonalização do hamiltoniano de Ising	32
5.1.1	Intervalo de energia entre os estados fundamentais	37
6	ENTROPIA DE EMARANHAMENTO E LOCALIZAÇÃO NO MO- DELO XY	39
6.1	Emaranhamento	39
6.2	Entropia de emaranhamento	40
6.2.1	Entropia de emaranhamento no modelo XY	40
6.2.2	Entropia de emaranhamento no modelo de Ising transverso	42
6.3	Fase localizada	43
7	SISTEMAS ABERTOS	44
7.1	Sistema e ambiente	44

7.1.1	Protocolo de interações repetidas	45
7.1.2	Matriz de covariância	46
7.2	Rede de spins acoplada a reservatórios térmicos	47
7.3	Um único spin acoplado a um reservatório térmico	48
8	CONCLUSÕES	51
	REFERÊNCIAS	52
	APÊNDICE A – PROPRIEDADES DOS OPERADORES FERMIÔ- NICOS	54

1 Introdução

Esse texto se trata de uma revisão, onde serão apresentados modelos com intenção de entender elementos da mecânica quântica de muitos corpos. Mais especificamente trata de modelos de spins que interagem entre si em uma rede, cujo o Hamiltoniano pode ser mapeado em um sistema de férmions livres, via a técnica matemática chamada transformada de Jordan-Wigner, e portanto, facilmente diagonalizável. A introdução dessa técnica foi feita por Lieb, Schulz e Mattis no artigo [1] onde apresentaram a solução exata de dois modelos de uma dimensão em uma rede de spins interagindo com o vizinho próximo via interação de troca. Mais especificamente, os modelos XY sem a interação do campo magnético transversal e o modelo de Ising.

Os modelos escolhidos são da classe de sistemas integráveis. São modelos onde é possível obter equações exatas para as principais quantidades do sistema. Por outro lado, existem os modelos não integráveis, onde ainda só é possível obter resultados aproximados através de simulações computacionais. Esses resultados numéricos são importantes para guiar a tentativa de obter soluções analíticas.

O modelo de Ising com campo magnético transversal vai ter um maior foco aqui. A principal característica desse modelo é a existência de uma transição entre as fases ferromagnética e paramagnética, que ocorre em temperatura nula e se dá pelo fato da rede ter a interação entre seus spins e esta, também, submetida a interação com o campo magnético externo. O que vai caracterizar cada fase são as propriedades de ordem de longo alcance, e quebra espontânea de simetria, propriedades que estão relacionadas ao estado fundamental do sistema.

Um outro modelo importante é o modelo XY, cujo o modelo de Ising pode ser visto como um caso específico, para esse modelo a principal característica que será estudada é a evolução temporal da entropia de emaranhamento. O estado inicial é escolhido como um autoestado de um hamiltoniano, porém a evolução temporal desse estado será feita usando um hamiltoniano com parâmetros diferentes, essa mudança é chamada de “quench”. Ainda nesse modelo pode-se aplicar desordem, caso onde os parâmetros do hamiltoniano não são mais constantes ao longo da rede, e são aleatórios para cada sítio, simulando flutuação no campo magnético e na interação entre vizinhos próximos no material. A introdução da desordem no sistema induz a mudança para fase localizada.

Uma evolução natural no estudo de redes de spins são os sistemas abertos, onde são considerados reservatórios térmicos nas extremidades da rede. O conjunto rede e reservatório é chamado de universo, enquanto a rede é chamada de sistema e o reservatório de ambiente, podendo simular máquinas térmicas e suas possíveis funcionalidades.

O ambiente troca calor e realiza trabalho no sistema de forma a forçar o sistema atingir um estado equilíbrio térmico ou de não equilíbrio estático. A evolução temporal do universo é regida pela equação mestra de Lindblad, que leva em consideração em seus termos o Hamiltoniano do sistema e o dissipador, termo que descreve a interação.

A disposição do texto é a seguinte: primeiro vai ser lembrado alguns conceitos básicos de álgebra linear que estão relacionados com a mecânica quântica em nível de graduação. Esses conceitos são escritos usando a notação de “braket”, que comumente é usada na quântica. Lembra o cálculo tensorial e aplica essa matemática nos conceitos básicos de sistemas de muitos spin, sendo a base para mecânica quântica de muitos corpos.

Depois, apresenta a técnica matemática chamada transformada de Jordan-Wigner, necessária para diagonalizar os Hamiltonianos que descrevem as redes de spins, essa técnica consiste em reescrever os operadores de Pauli em termos dos operadores de férmions livres, que também serão tratados.

Será definido dois modelos de spins, o modelo de Ising e o modelo XY, e seus principais resultados exatos que se encontram na literatura. Dentre eles, os valores de energia, a transição entre as fases ferromagnética e paramagnética, para o primeiro modelo e a dependência temporal da entropia de emaranhamento, para o segundo. Como esse dois modelos são correlacionados, sendo possível recuperar o modelo de Ising para determinados valores dos parâmetros do modelo XY, os resultados são válidos para os dois. No modelo XY será considerado desordem e tratado sobre a entropia de emaranhamento das partículas da rede.

Por último, será apresentado os sistemas abertos e explicado como fazer a evolução temporal usando a equação de Lindblad, como é a interação entre o sistema e o reservatório, através do protocolo de interações repetidas. Protocolo esse que modela o reservatório como um conjunto infinito de partículas que vão interagir com as partículas da borda da rede para interação de spins e por colisões. Será apresentado as equações de variação do calor e trabalho e concluindo com o cálculo da matriz de covariância para um sistema composto de um único spin acoplado a um reservatório, tópico que vai utilizar, de forma conectada todas as técnicas e conceitos matemáticos trabalhados ao longo dessa revisão.

2 Conceitos matemáticos básicos

O objetivo desse primeiro capítulo é revisitar de forma sucinta alguns conceitos e equações que serão úteis ao desenvolver os resultados que são apresentados nos próximos capítulos. Vamos passar brevemente pela notação de Dirac para vetores de estados quânticos e os principais conceitos de sistema de spin. Vamos lembrar também conceitos básicos para desenvolvimento de cálculos envolvendo produto tensorial. Por fim, conceitos de sistemas com mais de um spin.

2.1 Sistemas de um único espaço vetorial e notação de Dirac

Considerando um espaço de Hilbert \mathcal{H} de dimensão finita d , seus vetores estados serão representados por “Kets” $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle, \dots$ que na forma matricial são representados por um vetor coluna,

$$|\Psi\rangle \equiv \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_d \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

com os elementos $\varphi_j \in \mathbb{C}$. O transposto conjugado é representado por “Bras”, que na forma matricial é um vetor linha,

$$\langle\Psi| \equiv (|\Psi\rangle)^\dagger \equiv [\varphi_1^*, \dots, \varphi_d^*]. \quad (2.2)$$

Dado os estados $|\Psi\rangle, |\Phi\rangle, |\Gamma\rangle \in \mathcal{H}$ e as constantes $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, a combinação linear também pertence a \mathcal{H} ,

$$\alpha |\Psi\rangle + \beta |\Phi\rangle \in \mathcal{H}. \quad (2.3)$$

É definido o produto interno de $|\Psi\rangle$ e $|\Phi\rangle$ como:

$$\langle\Psi|\Phi\rangle \equiv \sum_{j=1}^d \varphi_j^* \phi_j, \quad (2.4)$$

onde φ_j são as componentes do vetor $|\Psi\rangle$ e ϕ_j as componentes de $|\Phi\rangle$. O produto interno satisfaz a propriedades:

i) $\langle\Psi|\Phi\rangle \in \mathbb{C}$,

- ii) $\langle \Psi | \Phi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle^\dagger$,
- iii) $\langle \Gamma | (\alpha |\Psi\rangle + \beta |\Phi\rangle) = \alpha \langle \Gamma | \Psi \rangle + \beta \langle \Gamma | \Phi \rangle$.
- iv) $\langle \Psi | \Psi \rangle \geq 0$, a igualdade acontece quando $|\Psi\rangle = 0$.

É definido também a norma do vetor estado:

$$\|\Psi\|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle, \quad (2.5)$$

um vetor é dito normalizando quando $\|\Psi\| = 1$.

Com a definição de norma o produto interno satisfaz os dois seguintes teoremas, a desigualdade de Schwarz:

$$|\langle \Psi | \Psi \rangle|^2 \leq \langle \Psi | \Psi \rangle \langle \Phi | \Phi \rangle, \quad (2.6)$$

e a desigualdade triangular:

$$\|\Psi + \Phi\| \leq \|\Psi\| + \|\Phi\|. \quad (2.7)$$

Uma *Base ortonormal* é um conjunto de estados normalizados $\{|\psi_j\rangle\}_{j=1}^d$, que satisfazem $\langle \psi_j | \psi_k \rangle = \delta_{jk}$ para todo j e k . Qualquer vetor $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ pode ser expandido em termos dos elementos da base,

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^d \alpha_j |\psi_j\rangle, \quad (2.8)$$

onde os coeficientes são dados por $\alpha_j = \langle \psi_j | \Psi \rangle$.

Operadores são mapas lineares $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Na notação matricial são matrizes quadradas de tamanho d . Dado os operadores A, B atuando em \mathcal{H} e as constantes $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, o complexo conjugado de um operador é A^\dagger ,

$$(A|\Psi\rangle)^\dagger = \langle \Psi | A^\dagger, \quad (2.9)$$

que satisfaz as propriedades:

- i) $(A^\dagger)^\dagger = A$,
- ii) $(\alpha A + \beta B)^\dagger = \alpha^* A^\dagger + \beta^* B^\dagger$,
- iii) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.

Um operador é chamado de auto adjunto ou hermitiano se satisfaz $A = A^\dagger$ e é dito unitário se satisfaz $A^\dagger A = AA^\dagger = 1$. Tomando uma base ortonormal $\{|\psi_j\rangle\}$, para todo operador hermitiano existem seus autovalores $a_j \in \mathbb{R}$, que satisfazem a equação de autovalor:

$$A |\psi_j\rangle = a_j |\psi_j\rangle, \quad (2.10)$$

e pode ser escrito na decomposição espectral

$$A = \sum_{j=1}^d a_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \quad (2.11)$$

O traço do operador é dado por:

$$\text{Tr}[A] = \sum_{j=1}^d \langle \psi_j | A | \psi_j \rangle \quad (2.12)$$

e da definição de norma (2.5), temos

$$\|A |\Psi\rangle\|^2 = \langle \Psi | A^\dagger A | \Psi \rangle. \quad (2.13)$$

2.1.1 Sistemas de um único spin

Para o spin de uma partícula é associado um espaço de Hilbert \mathcal{H} de dimensão $d = 2S + 1$. S é o número de spin, que é um tipo de grau de liberdade da partícula e pode assumir os valores inteiros e semi-inteiros.

Os *operadores de Spin* são denotados por S^x, S^y, S^z . São auto adjuntos atuando nas direções x, y, z e satisfazem as relações de comutação:

$$[S^\alpha, S^\beta] = i \sum_{\gamma=x,y,z} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma, \quad (2.14)$$

onde comutador é definido por $[A, B] = AB - BA$. A base ortonormal mais comum para esse espaço de Hilbert é $\{|\psi^\sigma\rangle\}$ com $\sigma = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$. A atuação dos operadores de spin é definida como:

$$S^z |\psi^\sigma\rangle = \sigma |\psi^\sigma\rangle, \quad (2.15)$$

$$S^\pm |\psi^\sigma\rangle = \sqrt{S(S+1) - \sigma(\sigma \pm 1)} |\psi^{\sigma \pm 1}\rangle, \quad (2.16)$$

onde $S^\pm \equiv S^x \pm iS^y$ e se aplica a condição de normalização $\langle \psi^\sigma | \psi^\sigma \rangle = 1$.

Exemplo $S = 1/2$: Um exemplo de um sistema mais simples onde o spin pode estar para cima, $|\psi^{1/2}\rangle \equiv |\uparrow\rangle$, ou para baixo, $|\psi^{-1/2}\rangle \equiv |\downarrow\rangle$, a atuação dos operadores fica

$$\begin{aligned} S^z |\uparrow\rangle &= \frac{1}{2} |\uparrow\rangle, & S^z |\downarrow\rangle &= -\frac{1}{2} |\downarrow\rangle, \\ S^+ |\uparrow\rangle &= 0, & S^+ |\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle, & S^- |\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle, & S^- |\downarrow\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Na notação matricial, são escritos $S^\alpha = 1/2\sigma^\alpha$, onde σ^α são as matrizes de Pauli:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Operadores de rotação de spin: Seja $\theta \in \mathbb{R}$, o operador que rotaciona o spin de um ângulo θ em torno do eixo α é:

$$R_\theta^\alpha \equiv \exp[-i\theta S^\alpha], \quad (2.19)$$

que pode ser calculado com a seguinte definição:

$$\exp(A) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n. \quad (2.20)$$

O operador rotação se relaciona com os operadores de spin pela seguinte igualdade:

$$(R_\theta^\alpha)^\dagger S^\beta R_\theta^\alpha = \cos(\theta) S^\beta - \sin(\theta) \sum_{\gamma=x,y,z} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S^\gamma, \quad (2.21)$$

é necessário que $\alpha \neq \beta$. Fixando $\theta = \pm\pi$ tem-se um igualdade útil,

$$(R_{\pm\pi}^\alpha)^\dagger S^\beta R_{\pm\pi}^\alpha = -S^\beta. \quad (2.22)$$

Para o exemplo com $S = 1/2$, o operador pode ser escrito como:

$$R_\theta^\alpha = \cos(\theta/2) - 2i \sin(\theta/2) S^\alpha. \quad (2.23)$$

2.2 Produto tensorial e sistemas compostos

Considerando dois espaços de Hilbert \mathcal{H}_1 de dimensão d_1 e \mathcal{H}_2 de dimensão d_2 , podemos definir o produto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, de dimensão $d_1 d_2$. Os elementos de $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ são combinações lineares do produto tensorial $|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle$, onde $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$ e $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_2$, e o produto

interno entre dois vetores $|\Psi\rangle = \sum_j \alpha_j |\psi_j\rangle \otimes |\phi_j\rangle$ e $|\Phi\rangle = \sum_k \beta_k |\psi'_k\rangle \otimes |\phi'_k\rangle$, com $|\psi\rangle, |\psi'\rangle$ atuando em \mathcal{H}_1 e $|\phi\rangle, |\phi'\rangle$ atuando em \mathcal{H}_2 , é definido como:

$$\langle \Psi | \Phi \rangle = \sum_{jk} \alpha_j^* \beta_k \langle \psi_j | \psi'_k \rangle \langle \phi_j | \phi'_k \rangle. \quad (2.24)$$

Se $\{|a_j\rangle\}$ é uma base ortonormal em \mathcal{H}_1 e $\{|b_j\rangle\}$ é base ortonormal em \mathcal{H}_2 então $\{|a_j\rangle \otimes |b_m\rangle\}_{j=1, m=1}^{d_1, d_2}$ é uma base em $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, com o produto interno:

$$(\langle a_j | \otimes \langle b_m |)(|a_k\rangle \otimes |b_n\rangle) = \delta_{jk} \delta_{mn}. \quad (2.25)$$

Para os vetores $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_1$, $|\phi\rangle \in \mathcal{H}_2$ e a constante $c \in \mathbb{C}$, o produto tensorial obedece as seguintes propriedades:

- i) $c(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = (c|\psi\rangle) \otimes |\phi\rangle = |\psi\rangle \otimes c|\phi\rangle$,
- ii) $(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) \otimes |\phi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\phi\rangle + |\psi_2\rangle \otimes |\phi\rangle$,
- iii) $|\psi\rangle \otimes (|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle) = |\psi\rangle \otimes |\phi_1\rangle + |\psi\rangle \otimes |\phi_2\rangle$.

Tomando os operadores A atuando em \mathcal{H}_1 e B atuando em \mathcal{H}_2 . O produto tensorial $A \otimes B$ é um operador que atua em $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Definido por:

$$(A \otimes B) |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = A |\psi\rangle \otimes B |\phi\rangle. \quad (2.26)$$

2.2.1 Sistemas de vários spins

Considere um sistema de várias partículas, representadas pelos elementos do conjunto $\Delta_N = (1, \dots, N)$. Para cada partícula é associado um espaço de Hilbert \mathcal{H}_j , e o espaço vetorial associado a todo o sistema vai ser o produto tensorial $\mathcal{H} = \bigotimes_{j=1}^N \mathcal{H}_j$, com dimensão $d = (2S + 1)^N$. Uma possível representação da base é:

$$|\psi^\sigma\rangle \equiv \bigotimes_{j \in \Delta_N} |\psi_j^{\sigma_j}\rangle, \quad (2.27)$$

onde índice múltiplo $\sigma = (\sigma_j)_{j \in \Delta_N}$, com $\sigma_j = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S$, caracteriza a configuração dos spins. O operador de spin S_j^α , com $\alpha = x, y, z$, é definido como operador do espaço \mathcal{H} , atuando não trivialmente em \mathcal{H}_j e trivialmente nos demais.

$$S_j^\alpha = 1 \otimes \dots \otimes 1 \otimes S^\alpha \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1. \quad (2.28)$$

com a atuação na base,

$$S_k^\alpha \left(\bigotimes_{j \in \Delta_N} |\psi_j^\sigma\rangle \right) = (S_k^\alpha |\psi_k^\sigma\rangle) \otimes \left(\bigotimes_{j \in \Delta_N / \{k\}} |\psi_j^\sigma\rangle \right). \quad (2.29)$$

Os operadores de spin de diferentes partículas comutam entre si:

$$[S_j^\alpha, S_k^\beta] = i\delta_{jk} \sum_{\gamma=1,2,3} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_j^\gamma, \quad (2.30)$$

para todo $j, k \in \Delta_N$ e $\alpha, \beta, \gamma = x, y, z$.

Exemplo $S = 1/2$: Similar ao exemplo de um spin, considerando apenas duas partículas $\Delta_2 = (1, 2)$. As possíveis configurações de spin $(\uparrow, \uparrow), (\uparrow, \downarrow), (\downarrow, \downarrow), (\downarrow, \uparrow)$, são o produto tensorial dos spin para cima ou para baixo de cada uma das partículas,

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, & \quad |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2, \\ |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2, & \quad |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2, \end{aligned} \quad (2.31)$$

Tomando como exemplo o operador S_2^- que atua no espaço vetorial do segundo spin, e o estado (\uparrow, \uparrow) , a atuação fica

$$\begin{aligned} S_2^- &= |\uparrow\rangle_1 \otimes S^- |\uparrow\rangle_2 \\ &= |\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2. \end{aligned} \quad (2.32)$$

O operador de spin total é definido como:

$$\mathbf{S}_T^\alpha \equiv \sum_{j \in \Delta_N} \mathbf{S}_j, \quad (2.33)$$

e $\mathbf{S}_T = (\mathbf{S}_T^x, \mathbf{S}_T^y, \mathbf{S}_T^z)$. É definido também,

$$S_T^\pm \equiv S_T^x \pm S_T^y = \sum_{j \in \Delta_N} S_j^\pm. \quad (2.34)$$

O operador rotação (2.19), para sistemas de múltiplos spins fica

$$R_\theta^\alpha \equiv \exp[-i\theta S_T^\alpha] = \prod_{j \in \Delta_N} \exp[-i\theta S_j^\alpha], \quad (2.35)$$

com $\alpha = x, y, z$ e $\theta \in \mathbb{R}$.

3 Transformação de Jordan-Wigner

O intuito desse capítulo é apresentar algumas ferramentas necessárias para diagonalizar certos Hamiltonianos de redes de spin unidimensionais, através da chamada transformação de Jordan-Wigner. O desenvolvimento é bastante inspirado pela forma que foi feito por Michael A. Nielsen no artigo “*The fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform*“ de 2005 [2]. Primeiro, apresentamos os operadores a_j e suas principais propriedades, mostramos como se faz a transformação que reescreve o Hamiltoniano. Embora o Hamiltoniano original do sistema, escrito em termos dos operadores de Pauli tenha a interação entre as partículas, quando rescrito em termos dos operadores fermiônicos, se torna não-interagente. O intuito é reescreve-lo sempre na forma de férmions livres para possibilitar a diagonalização.

3.1 Relações canônicas de anticomutação para férmions.

Suponha um conjunto de operadores a_j que atuam em um espaço de Hilbert finito V . Para que descrevam férmions, precisam satisfazer as *relações canônicas de anticomutação (CCRs)*:

$$\{a_j, a_k^\dagger\} = \delta_{jk}, \quad (3.1)$$

$$\{a_j, a_k\} = 0, \quad (3.2)$$

$$\{a_j^\dagger, a_k^\dagger\} = 0. \quad (3.3)$$

Onde $\{A, B\} \equiv AB + BA$ é o anticomutador. A terceira relação é obtida tomando o complexo conjugado na segunda. Esses índices podem ser interpretados como um vale de potencial onde pode ou não ter um férmion ocupando. Fazendo alusão a um átomo, são chamados de orbitais. Os operadores $a^\dagger a$ são hermitianos e formam um conjunto de operadores que comutam. Dessa forma, existe um estado normalizado $|\psi\rangle$ que vai ser autoestado simultaneamente de todos os operadores. Para todo j , temos a relação:

$$a_j^\dagger a_j |\psi\rangle = \alpha_j |\psi\rangle, \quad (3.4)$$

onde os autovalores $\alpha_j = 0, 1$, que, de forma simples, significa que o orbital está ocupado ou não. É possível definir um estado $|vac\rangle$ com todos os orbitais j vazios, para representar o vácuo,

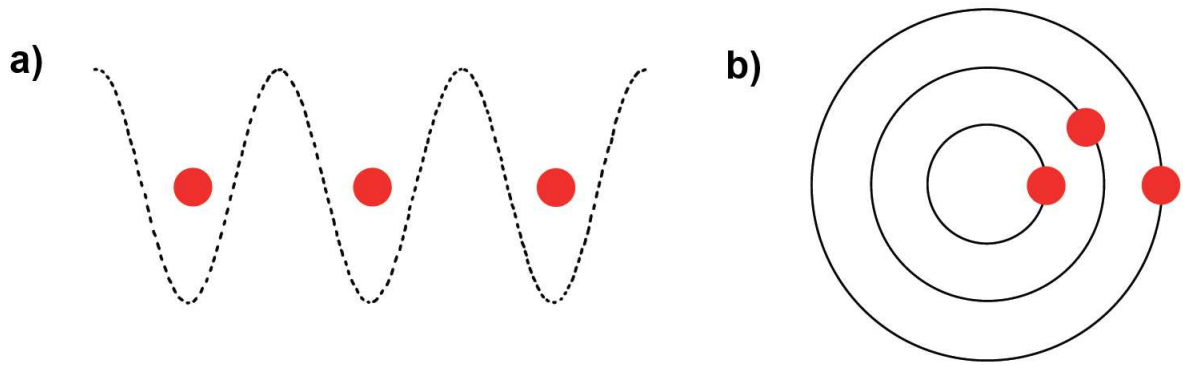


Figura 1 – a) Desenho esquemático representando os vales de potenciais que podem ser ocupados pelos férmions, em b) a interpretação dos vales como orbitais de um átomo.

$$|\psi\rangle = \prod_{j=1}^N (a_j^\dagger)^{\alpha_j} |vac\rangle. \quad (3.5)$$

O conjunto de todos os estados $|\psi\rangle$ é uma base ortonormal de um subespaço de V que vamos chamar de V' . Conhecido como *Espaço de Fock*, consiste no conjunto $\{|\psi_N\rangle : (N = 1, 2, 3, \dots)\}$ de todos os estados de uma partícula, duas partículas, três partículas, etc.

3.1.1 Operadores criação e destruição

Impor as relações de anticomutação nos operadores fermiônicos implica em uma estrutura para a atuação deles no subespaço V' , que conseqüentemente inspira o nome que é dado. Chamamos a_j^\dagger de operador *criação*, pois sua atuação em V' é de forma que adiciona um férmion em um orbital desocupado ou, quando atua em um orbital já ocupado, retorna 0. Dessa forma satisfaz o princípio de exclusão de Pauli.

Para ser mais preciso, seja $|\psi'\rangle$ o vetor equivalente a $|\psi\rangle$, em que a entrada α_j tem valor distinto, e a constante $\beta = \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_k$.

- . Se $\alpha_j = 1$. Então $a_j^\dagger |\psi\rangle = 0$.
- . Se $\alpha_j = 0$. Então $a_j^\dagger |\psi\rangle = -(-1)^\beta |\psi'\rangle$.

Chamamos a_j de operador *destruição*. Sua atuação em V' é similar, mas oposta, removendo um férmion de um orbital ocupado ou quando atua em um orbital vazio, anulando o vetor.

Seja $|\psi'\rangle$ o vetor equivalente a $|\psi\rangle$, em que a entrada α_j tem valor distinto, e a constante $\beta = \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_k$.

- . Se $\alpha_j = 0$. Então $a_j |\psi\rangle = 0$.

. Se $\alpha_j = 1$. Então $a_j |\psi\rangle = -(-1)^\beta |\psi'\rangle$.

Vale observar que uma abordagem alternativa é possível, definindo a atuação dos operadores criação e destruição desse jeito, e concluindo que eles satisfazem as CCRs, que é como foi desenvolvido em [3]. Todas as propriedades dos operadores está demonstradas na referência [2].

3.1.2 Transformação de Jordan-Wigner

Considere um sistema com N orbitais e os operadores $\sigma_j^x, \sigma_j^y, \sigma_j^z$, atuando no orbital j . Para descrever esses operadores em termo de operadores a_j de forma que ainda satisfaçam as *CCRs*, escreve-se:

$$a_j \equiv - \bigotimes_{k=1}^{j-1} \sigma_k^z \sigma_j^-, \quad (3.6)$$

onde $\sigma^- \equiv |\uparrow\rangle\langle\downarrow|$. Essa definição é chamada de *Transformação de Jordan-Wigner*. A inversão é dada por:

$$\sigma_j^- = - \left(\bigotimes_{k=1}^{j-1} \sigma_k^z \right) a_j, \quad (3.7)$$

e σ^+ é o complexo conjugado de σ^- . Substituindo nos operadores de Pauli, obtemos uma expressão para cada operador,

$$\sigma_j^z = a_j a_j^\dagger - a_j^\dagger a_j, \quad (3.8)$$

$$\sigma_j^x = (a_j^\dagger + a_j) \bigotimes_{k<j} \sigma_k^z, \quad (3.9)$$

$$\sigma_j^y = i(a_j^\dagger - a_j) \bigotimes_{k<j} \sigma_k^z. \quad (3.10)$$

Dessa forma, a transformada de Jordan-Wigner cria um mapeamento de um sistema de spins em um sistema de férmions, e vice-versa. A forma que foi definida aqui estabelece que o mapeamento leva um spin para cima em um espaço ocupado sistema de férmions, e um spin para baixo em um espaço desocupado. A importância dessa técnica é que ela permite rescrever hamiltonianos de spin na forma de hamiltonianos de férmions, e muitas é necessário para que conseguimos diagonalizar esses hamiltonianos.

3.1.3 Hamiltoniano de férmions

Tendo o Hamiltoniano de férmions, existe na literatura, técnicas para diagonalizar-lo. O modelo mais simples inicialmente é o que descreve férmions livres, ou seja, não existe

interação entre as partículas. Nesse caso, podemos interpretar os índices como cada orbital do sistema.

$$H_{free} = \sum_{j=1}^N \gamma_j a_j^\dagger a_j, \quad (3.11)$$

onde γ_j é uma constante com a energia de cada orbital. Dado um estado geral do sistema $|\psi\rangle$, os valores de energia são encontrados aplicando a eq. (3.4), que vai corresponder a soma das energias de cada férmion. Seguindo esse raciocínio, a energia do estado fundamental é dada por:

$$E_{gs} = \sum_{j=1}^N \min(0, \gamma_j). \quad (3.12)$$

Esse estado fundamental é chamado *mar de férmions*. Podemos construir aplicando o operador criação a_j^\dagger nos orbitais em que $\gamma_j < 0$.

$$|gs\rangle = \sum_{j=1}^N a_j^\dagger |vac\rangle, \quad \gamma_j < 0 \quad \forall j. \quad (3.13)$$

O objetivo agora é reescrever hamiltonianos mais elaborados na forma de (3.11) e então poder diagonaliza-lo com as ferramentas já descritas. O próximo Hamiltoniano, os índices de cada operador são diferentes, podendo ser interpretado que atua em diferentes orbitais, estabelecendo um hopping entre esses orbitais.

$$H = \sum_{jk} \gamma_{jk} a_j^\dagger a_k. \quad (3.14)$$

Reescreve-se o operador a_j em termos de novos operadores b_j , da forma

$$a_j = \sum_k u_{jk}^\dagger b_k, \quad (3.15)$$

a matriz u_{jk} deve ser unitária para garantir que os operadores b_j satisfaçam as relações de anticomutação. Substituindo no Hamiltoniano:

$$H = \sum_{ij} (u\gamma u^\dagger)_{ij} b_i^\dagger b_j. \quad (3.16)$$

Observa-se na equação (3.14) que para H ser hermitiano, a matriz γ precisa também ser hermitiana. Isso permite escolher u de forma que $u\gamma u^\dagger$ seja diagonal, com as entradas sendo os autovalores ν_j de γ ,

$$H = \sum_j \nu_j b_j^\dagger b_j, \quad (3.17)$$

que é a mesma forma da equação (3.11), portanto, diagonalizável. Aqui, é importante ressaltar que os índices j não correspondem mais aos orbitais. O estado fundamental de H será o mesmo que o de H_{free} , e os demais estados são construídos da mesma forma.

De forma mais geral, temos o Hamiltoniano quadrático fermiônico, que é escrito como uma soma de termos $a_j a_j^\dagger, a_j^\dagger a_j, a_j a_j, a_j^\dagger a_j^\dagger$. É conveniente escrevê-lo da seguinte forma:

$$H = \sum_{jk} \gamma_{jk} a_j^\dagger a_k - \gamma_{jk}^* a_j a_k^\dagger + \beta_{jk} a_j a_k - \beta_{jk}^* a_j^\dagger a_k^\dagger. \quad (3.18)$$

pois, qualquer outro hamiltoniano quadrático pode ser escrito assim com a adição, se necessário, de uma constante proporcional à identidade. Reescreve-se H usando matrizes, em que as entradas vão ser os operadores b_j ,

$$H = [b^\dagger b] T M T^\dagger \begin{bmatrix} b \\ b^\dagger \end{bmatrix}, \quad (3.19)$$

onde b é uma abreviação para o vetor (b_1, \dots, b_N) e M é a matriz com os coeficientes do hamiltoniano,

$$M = \begin{bmatrix} \gamma & -\beta^* \\ \beta & -\gamma^* \end{bmatrix}, \quad (3.20)$$

onde α e β são matrizes com os coeficientes α_{jk} e β_{jk} . É sempre possível encontrar a matriz unitária T , de forma que os operadores b_j satisfaçam as *CCRs* e $T M T^\dagger$ seja diagonal. E portanto, escrever H como um hamiltoniano de férmions livres.

4 Transição de fase no modelo de Ising com campo transverso

O objetivo deste capítulo é apresentar o modelo de Ising transverso, que é exemplo de um hamiltoniano que pode ser diagonalizado usando as técnicas descritas no capítulo (3) e Consiste em uma rede de spins submetida a um campo magnético externo aplicado na direção transversa aos spins com interação entre primeiros vizinhos. Nesse capítulo vamos chamar os orbitais de sítios, fazendo alusão a posição dos spins em um material magnético.

Vamos apresentar as propriedades do estado fundamental e dos primeiros estados excitados para diferentes valores do campo externo. Dessas propriedades é possível caracterizar uma transição de fase, que vai existir pelo fato da rede estar submetida a mais de uma interação. Mais precisamente, nesse modelo temos a interação de cada spin com seu vizinho e a interação do spin com o campo magnético, competindo para organizar os spins da rede em direções diferentes.

Existe um ponto crítico para o campo magnético onde ocorre a transição de fases. Na fase ferromagnética cada spin vai estar interagindo com seu vizinho e o campo externo em intensidades parecidas, o estado fundamental não vai ser estável fisicamente e vamos construir um estado excitado com baixa energia. Na fase paramagnética, a interação entre os spins e o campo externo vai prevalecer e o estado fundamental vai ser um estado produto e estável fisicamente.

O desenvolvimento desse capítulo é baseado, em grande parte, no livro "*Physics and mathematics of Quantum Many-Body Systems*" do autor Hal Tasaki [4].

4.1 O modelo de Ising transverso

Dado um conjunto de sítios $\Delta_N = \{1, 2, 3, \dots, N\}$, onde cada sítio é ocupado por uma partícula com spin $S = 1/2$, o Hamiltoniano do modelo de Ising transverso é dado por:

$$H = - \sum_{j=1}^N \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \lambda \sum_{j=1}^N \sigma_j^z, \quad (4.1)$$

onde σ são os operadores de Pauli e adotamos condições de contorno periódicas, $\sigma_{N+1}^x = \sigma_1^x$. O termo com coeficiente $\lambda \geq 0$ descreve um campo magnético externo e transverso interagindo com a rede. Quando esse campo é escrito na direção x o modelo perde o carácter quântico e se resume ao modelo de Ising clássico. O operador $\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x$ descreve a interação entre dois spins adjacentes. A existência dessas duas interações simultaneamente,

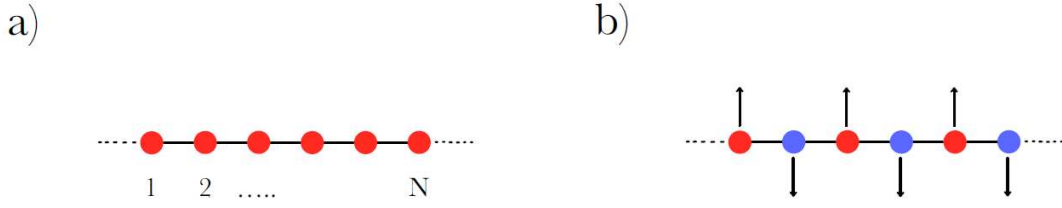


Figura 2 – Em a) desenho esquemático de uma rede de férmions de dimensão 1, onde o pontilhado significa condição periódica de contorno, em b) representam a ordem de longo alcance para uma rede de uma dimensão 1 partida, onde os férmions em vermelho estão na rede A e em azul na rede B

interação entre spins e spin com campo, é responsável pelas propriedades do modelo, sendo a principal dela a transição de fase, que vai ser tratada no final do capítulo.

A única invariância de simetria que esse modelo apresenta é de rotações de π sobre o eixo z , ou “*spin flip*”, descrita pela matriz unitária:

$$R^z \equiv \bigotimes_{j=1}^N \sigma_j^z, \quad (4.2)$$

da seguinte forma, pois

$$R^z \sigma_j^x (R^z)^\dagger = -\sigma_j^x, \quad R^z \sigma_j^z (R^z)^\dagger = \sigma_j^z, \quad \forall j \in \Delta_N \implies R^z H (R^z)^\dagger = H. \quad (4.3)$$

4.1.1 Modelo de Ising clássico

O caso em que temos $\lambda = 0$, é chamado modelo de Ising clássico, apresentando dois estados fundamentais degenerados:

$$|\psi^\uparrow\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |\uparrow_j\rangle_x, \quad |\psi^\downarrow\rangle = \bigotimes_{j=1}^N |\downarrow_j\rangle_x, \quad (4.4)$$

que é um estado com todos os spin para cima, ou para baixo, na direção x . Os autovalores de energia são dados por:

$$E = - \sum_{j=1}^N \alpha_j \alpha_{j+1}, \quad \alpha = \pm 1. \quad (4.5)$$

Como esse modelo apresenta forte interação entre os spins, como consequência surge na fase ferromagnética, uma propriedade chamada *ordem de longo alcance*, no sentido que dois spins, em uma mesma rede, tendem a apontar para uma mesma direção não importa

a distância entre eles. Quando a rede esta na fase paramagnética, não vai apresentar essa propriedade, por isso, vale ressaltar que a ordem de longo alcance diz respeito a interação de spins apenas, quando os spins se alinham com um campo magnético não é usado esse nome, mesmo eles estando apontando para mesmo direção.

Se o hamiltoniano apresenta alguma invariância por rotação, que é o caso do modelo de Ising transversal, e um estado apresenta ordem de longo alcance então esse estado não respeita a simetria do hamiltoniano. Como a direção em que os spins apontam é escolhida arbitrariamente pelo sistema, esse fenômeno é chamado de *quebra espontânea de simetria*.

Para identificar a ordem de longo alcance e quebra de simetria no modelo matemático, é usado o operador ordem:

$$O = \sum_{j=1}^N \sigma_j^x, \quad (4.6)$$

cujas atuação nos vetores (4.4) é:

$$O |\psi^\uparrow\rangle = \sum_{j=1}^N \sigma_j^x (\bigotimes_{j=1}^N |\uparrow\rangle_x) \quad (4.7)$$

$$= N |\psi^\uparrow\rangle, \quad (4.8)$$

$$O |\psi^\downarrow\rangle = -N |\psi^\downarrow\rangle. \quad (4.9)$$

O operador ordem O mede a magnetização total do sistema, e dividimos pelo número total de spins na rede N para termos a magnitude da densidade de magnetização. O motivo desse operador detectar essas propriedades está demonstrado, em detalhes, na referência [4]. De forma qualitativa, podemos dizer que o valor esperado de O^2 contabiliza o produto dos operadores $\sigma_j^x \sigma_k^x$ para todos os sítios da rede e suas permutações. Se é igual a zero, os spins distantes não exibem correlação, portanto o sistema não apresenta ordem de longo alcance. Para quebra de simetria, é possível demonstrar que dado um vetor $|\psi\rangle$ que respeita a simetria do hamiltoniano, a única forma de manter essa propriedade é o valor esperado de O ser igual a zero. Dado um número q e, temos as seguintes definições:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \psi | \left(\frac{O}{N} \right)^2 | \psi \rangle \begin{cases} = 0, & \text{não exibe ordem de longo alcance,} \\ \geq q, & \text{exibe ordem de longo alcance.} \end{cases} \quad (4.10)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \psi | \frac{O}{N} | \psi \rangle \begin{cases} = 0, & \text{não exibe quebra espontânea de simetria,} \\ \neq 0, & \text{exibe quebra espontânea de simetria.} \end{cases} \quad (4.11)$$

Os estados fundamentais apresentam as duas propriedades:

$$\begin{aligned} \langle \psi^\uparrow | \left(\frac{O}{N} \right)^2 | \psi^\uparrow \rangle &= 1, & \langle \psi^\downarrow | \left(\frac{O}{N} \right)^2 | \psi^\downarrow \rangle &= 1, \\ \langle \psi^\uparrow | \frac{O}{N} | \psi^\uparrow \rangle &= 1, & \langle \psi^\downarrow | \frac{O}{N} | \psi^\downarrow \rangle &= -1. \end{aligned}$$

O primeiro estado excitado é o que tem uma única parede de domínio, que ocorre em um determinado sítio T os spins mudam de direção. Possui $2(N-1)$ estados degenerados.

$$|\psi_T^{\uparrow\downarrow}\rangle \equiv \bigotimes_{j=1}^T |\uparrow_j\rangle \bigotimes_{k=T+1}^N |\downarrow_k\rangle, \quad |\psi_T^{\downarrow\uparrow}\rangle \equiv \bigotimes_{j=1}^T |\downarrow_j\rangle \bigotimes_{k=T+1}^N |\uparrow_k\rangle, \quad (4.12)$$

também na direção x .

4.1.2 Fase ferromagnética e quebra da degenerescência

Aplicando um campo positivo e infinitesimal, $0 < \lambda \ll 1$, quebramos a degenerescência do estado fundamental. Passamos a ter duas contribuições para a energia do sistema, a interação entre sítios e a interação com o campo externo. É esperado que as propriedades para baixa energia sejam similares ao caso $\lambda = 0$. Através de uma análise perturbativa é possível ver que o estado fundamental é único e do tipo gato de Schrödinger podendo ser aproximado pela sobreposição dos estados fundamentais com todos os spins para cima ou para baixo:

$$|gs\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi^\uparrow\rangle + |\psi^\downarrow\rangle], \quad (4.13)$$

apresenta ordem de longo alcance, mas não apresenta quebra espontânea de simetria,

$$\langle gs | \left(\frac{O}{N} \right)^2 | gs \rangle = 1, \quad (4.14)$$

$$\langle gs | \frac{O}{N} | gs \rangle = 0. \quad (4.15)$$

O primeiro estado excitado, por outro lado, é dado por:

$$|\psi^1\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi^\uparrow\rangle - |\psi^\downarrow\rangle], \quad (4.16)$$

Esse vetor é chamado de *estado de baixa energia*, pois sua energia converge para energia do estado fundamental (4.13) conforme o número N de sítios da rede aumenta, dessa forma, os estados $|\psi^1\rangle$ e $|gs\rangle$ são assintoticamente degenerados. Mais precisamente, vale que:

$$E_1 - E_{gs} \propto \lambda^N \quad (4.17)$$

Em resumo, o primeiro estado de energia do modelo apresenta degenerescência para $\lambda = 0$ e essa degenerescência desaparece aplicando um campo magnético ligeiramente maior. Embora o vetor (4.13) seja o estado fundamental do modelo para $0 < \lambda \ll 1$, por não apresentar quebra de simetria (4.15) significa que ele apresenta flutuações na direção dos spins da rede,

$$\sqrt{\langle gs | \left(\frac{O}{N}\right)^2 | gs \rangle - \left(\langle gs | \frac{O}{N} | gs \rangle\right)^2} = 1. \quad (4.18)$$

Isso significa que ele não é um estado fisicamente estável, sendo que os estados que de fato são encontrados experimentalmente são os vetores (4.4) com todos os spins para cima, ou para baixo. Esses estados são chamados de *estados físicos* e não são autoestados do hamiltoniano para nenhum valor de N finito.

Somando e subtraindo as equações (4.13) e (4.16), obtemos

$$|\psi^\uparrow\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}(|gs\rangle + |\psi^1\rangle) \quad (4.19)$$

$$|\psi^\downarrow\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}(|gs\rangle - |\psi^1\rangle), \quad (4.20)$$

usando (4.8) e (4.9), observamos que

$$|\psi^1\rangle \simeq \frac{O}{N} |gs\rangle, \quad (4.21)$$

substituindo em $|\psi^\uparrow\rangle$ e $|\psi^\downarrow\rangle$, chegamos em

$$|\psi^\uparrow\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}(|gs\rangle + \frac{O}{N} |gs\rangle), \quad |\psi^\downarrow\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}(|gs\rangle - \frac{O}{N} |gs\rangle). \quad (4.22)$$

isso nos mostra que é possível construir os estados fundamentais físicos em termos do estado fundamental do modelo matemático.

4.1.3 Fase paramagnética

Se o campo magnético externo é suficientemente grande, $\lambda \gg 1$, para que a interação entre spins vizinhos não contribua muito com energia do sistema, podemos então aproximar o hamiltoniano (4.1) pelo segundo termo:

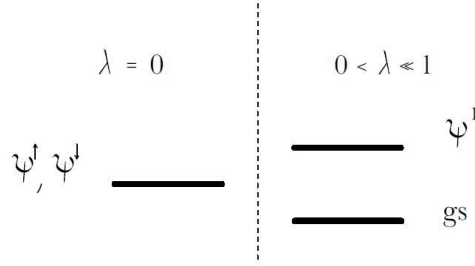


Figura 3 – Figura esquemática, que exemplifica o primeiro estado excitado degenerado. Com a aplicação de um campo infinitesimal a degenerescência se desfaz, dando origem a um estado fundamental único e um primeiro estado excitado.

$$H = -\lambda \sum_{j=1}^N \sigma_j^z. \quad (4.23)$$

O estado fundamental é único e dado por:

$$|gs\rangle = \bigotimes_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} \{|\uparrow_j\rangle + |\downarrow_j\rangle\}. \quad (4.24)$$

Os demais autoestados são dados por:

$$|\psi\rangle = \bigotimes_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} \{|\uparrow_j\rangle \pm |\downarrow_j\rangle\}, \quad (4.25)$$

o que leva a um gap de energia $\Delta E = \lambda$ em todo o espectro. Vale comparar essa diferença de energia com a diferença de energia para a fase ferromagnética 4.17, pois é o primeiro aspecto que diferencia as duas fases, na fase paramagnética a diferença de energia do primeiro estado excitado continua constante, enquanto na fase ferromagnética essa diferença de energia diminui com o tamanho da rede.

4.1.4 Transição de fase

Comparando os estados fundamentais e primeiro excitado para os diferentes valores do campo magnético descritos nas seções (4.1.1) e (4.1.2), é possível ver que apresentam propriedades significativamente diferentes, o que caracteriza a existência de duas fases da rede.

A transição de fase ocorre em temperatura de zero absoluto quando existem interações distintas tentando ordenar a rede em direções distintas. No caso do modelo de Ising, tem-se a interação entre os spins vizinhos e a interação de cada spin com o campo magnético externo, o ponto crítico $\lambda_c = 1$ [5] é onde ocorre a transição. A principal característica que diferencia as duas fases é a presença ou não da ordem de longo alcance,

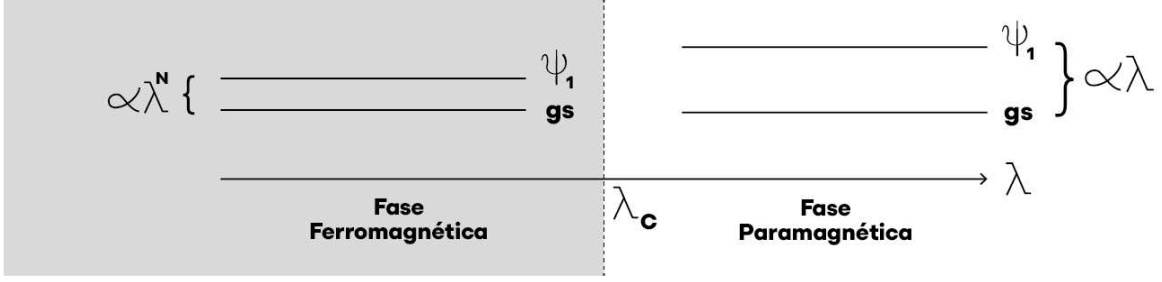


Figura 4 – Figura esquemática que representa os estados de energia para a fase ordenada e desordenada. Representação do intervalo de energia que diminui com o crescimento da rede.

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle gs | \left(\frac{O}{N} \right)^2 | gs \rangle \begin{cases} > 0, & \text{se } 0 < \lambda < \lambda_c \\ = 0, & \text{se } \lambda_c < \lambda \end{cases} \quad (4.26)$$

A fase $0 < \lambda < \lambda_c$ é chamada de *ordenada ou ferromagnética*, onde o estado fundamental e o primeiro estado excitado apresentam propriedades similares ao caso em que $0 < \lambda \ll 1$. O estado fundamental (4.13) é único e pode ser usado para construir um estado de baixa energia (4.22), que apresente ordem de longo alcance e quebre a simetria do hamiltoniano, portanto é um estado físico.

A fase $\lambda > \lambda_c$ é chamada de *desordenada ou paramagnética*, sendo as propriedades qualitativamente iguais ao regime $\lambda \gg 1$. O estado fundamental (4.24) é único e não apresenta ordem de longo alcance nem quebra a simetria do hamiltoniano. O primeiro estado excitado (4.25) não é um estado de baixa energia, ou seja, sua energia não converge para energia do estado fundamental com o crescimento do número de sítios. Porém é um estado físico, pois os spins estão alinhados com o campo externo, que é prevaemente sobre a interação entre eles, e não apresenta flutuações macroscópicas na direção.

Expandindo o produto tensorial do vetor (4.24), encontramos um estado escrito em termos de produtos tensoriais de vários spins na mesma direção e direções opostas, é um estado, de certo modo, desorganizado quando comparado com o estado fundamental (4.13), que quando expandido apresenta produtos tensoriais de spins apontando numa mesma direção, é essa característica que motiva o nome dessa fase.

De forma resumida, a transição de fase acontece repentinamente, separando o modelo em duas fases que apresentam ou não ordem de longo alcance e quebra espontânea de simetria.

Como dito anteriormente, a transição de fase é consequência da simetria do hamiltoniano, é possível ver que o ponto crítico desaparece quando o hamiltoniano perde a simetria (4.2). Tomando o hamiltoniano com um campo magnético $\tilde{\lambda}$ adicional na direção x :

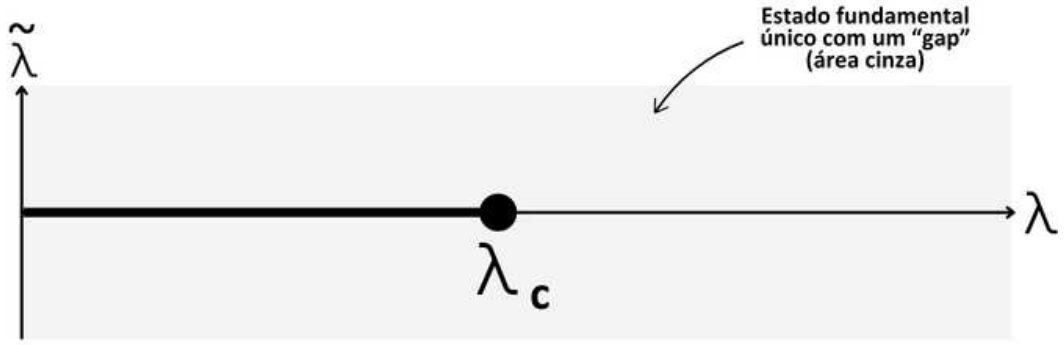


Figura 5 – Diagrama de fase do modelo de Ising quântico, com adição de um campo magnético que quebra a simetria de rotação de π sobre o eixo x . Possui um único estado fundamental sem ordem de longo alcance, quebra de simetria ou estado excitado de baixa energia. Não existem fases distintas nesse caso, exceto para $\tilde{\lambda} = 0$ e $0 \leq \lambda \leq \lambda_c$. Figura retirada da referência [4], página 62.

$$H = - \sum_{j=1}^N \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \lambda \sum_{j=1}^N \sigma_j^z - \tilde{\lambda} \sum_{j=1}^N \sigma_j^x, \quad (4.27)$$

a rede deixa de ser invariante sobre o operador R^z , e apresenta propriedades similares a $\lambda \gg \lambda_c$. O modelo possui um único estado fundamental com um intervalo de energia para o primeiro estado excitado que não desaparece, ou seja, não é um estado de baixa energia e não existem fases distintas, exceto para o regime $\tilde{\lambda} = 0$ e $0 \leq \lambda \leq \lambda_c$.

4.1.5 Estrutura geral dos estados de baixa energia

Motivado pela discussão das sessões anteriores, Tasaki [4] desenvolveu uma teoria geral para construir um estado normalizado de baixa energia, escrito em termos do estado fundamental exato. Assumindo uma rede de spins Δ , com um sistema caracterizado pelo Hamiltoniano:

$$H = \sum_{\{i,j\}} h_{i,j}, \quad (4.28)$$

onde i, j é o conjunto de sítios com algum vínculo em si, onde $h_{i,j}$ é auto adjunto e atua não trivialmente somente nos sítios i e j , e $\|h_{i,j}\|$ é constante. Assumindo também que exista um operador que consiga detectar quebras de simetria relevante do Hamiltoniano, escrito como:

$$O = \sum_{i \in \Delta} o_i, \quad (4.29)$$

onde o_i precisa, também ser auto adjunto e $\|o_i\|$ constante. Suponha que o estado fundamental é único e denotado por $|gs\rangle$. Assumindo que esse estado apresente Ordem de longo alcance mas não apresente quebra espontânea de simetria, podemos construir o estado:

$$|\phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|gs\rangle \pm |\Gamma\rangle], \quad (4.30)$$

onde $|\Gamma\rangle$ é chamado de vetor normalizado de Horsch e Von der Linden, definido como:

$$|\Gamma\rangle = \frac{O|gs\rangle}{\|O|gs\rangle\|}. \quad (4.31)$$

Tem-se então a seguinte relação:

$$0 \leq \langle\phi^+|H|\phi^+\rangle - E^{gs} \leq \frac{C'}{N}, \quad (4.32)$$

Dessa forma, à medida que a rede cresce, as energias vão se aproximando, ou seja, são de fato estados de baixa energia. Este vetor de estado apresenta ordem de longo alcance e quebra espontânea de simetria,

$$\langle\phi^\pm|\left(\frac{O}{N}\right)^2|\phi^\pm\rangle \geq q, \quad (4.33)$$

$$\langle\phi^\pm|\frac{O}{N}|\phi^\pm\rangle \geq \pm\sqrt{q}. \quad (4.34)$$

Portanto, vai ser um estado fisicamente estável.

5 Diagonalização do Hamiltoniano de Ising

Neste capítulo vamos apresentar os passos para diagonalizar o Hamiltoniano de Ising, usando a transformação de Jordan-Wigner apresentada no primeiro capítulo. Seguimos de perto a abordagem descrita no artigo “*Exact results for fidelity susceptibility of the quantum Ising model: the interplay between parity, system size, and magnetic field*” [5] dos autores Bogdan Damski e Marek M. Rams.

O intuito é trazer uma completude para o texto, conectando as ideias dos capítulos anteriores, com a forma concreta de aplicar o método apresentado no terceiro capítulo para diagonalizar o hamiltoniano que vai derivar os resultados apresentados no capítulo quatro.

Os resultados são as equações para a energia do estado fundamental para diferentes casos da rede de spin. E, a partir disso, apresentar as equações exatas para o gap de energia do sistema.

5.1 Diagonalização do hamiltoniano de Ising

Considere novamente o modelo de Ising, em uma rede de tamanho N e o campo externo $\lambda > 0$:

$$H = - \sum_{j=1}^N \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \lambda \sum_{j=1}^N \sigma_j^z. \quad (5.1)$$

O primeiro passo para diagonalizar o hamiltoniano é fazer a transformação de Jordan-Wigner, descrita no capítulo 3. Reescrevendo H ,

$$H = - \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x - \sigma_N^x \sigma_1^x - \lambda \sum_{j=1}^N \sigma_j^z, \quad (5.2)$$

e substitui os operadores (3.8), (3.9) para desenvolver cada termo, e lembrando que a_j são os operadores que descrevem férmions satisfazendo (3.1), (3.2) e (3.3). O primeiro termo fica,

$$\begin{aligned} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x &= (a_j^\dagger + a_j) \bigotimes_{k < j} \sigma_k^z (a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}) \bigotimes_{k' < j+1} \sigma_{k'}^z \\ &= (a_j^\dagger + a_j)(a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}) \bigotimes_{k < j} \sigma_k^z \bigotimes_{k' < j+1} \sigma_{k'}^z \\ &= (a_j^\dagger + a_j)(a_{j+1}^\dagger + a_{j+1}) \sigma_j^z, \\ &= a_j^\dagger a_{j+1} - a_j a_{j+1}^\dagger - a_j a_{j+1} + a_j^\dagger a_{j+1}^\dagger, \end{aligned} \quad (5.3)$$

onde substituímos $\sigma_j^z = (a_j a_j^\dagger - a_j^\dagger a_j)$. O segundo termo fica

$$\begin{aligned}\sigma_N^x \sigma_1^x &= (a_N^\dagger + a_N) \bigotimes_{k < N} \sigma_k^z (a_1^\dagger + a_1) \\ &= (a_N^\dagger + a_N) (a_1^\dagger + a_1) \bigotimes_{k < N} (a_k a_k^\dagger - a_k^\dagger a_k) \\ &= -(a_N^\dagger a_1 - a_N a_1^\dagger - a_N a_1 + a_N^\dagger a_1^\dagger) \bigotimes_{k < N} (a_k a_k^\dagger - a_k^\dagger a_k),\end{aligned}\tag{5.4}$$

Segue então que

$$H = - \sum_{j=1}^{N-1} f_{j,j+1} + f_{N,1} P - \lambda \sum_{j=1}^N (a_j a_j^\dagger - a_j^\dagger a_j),\tag{5.5}$$

onde $f_{i,l} = a_i^\dagger a_l - a_i a_l^\dagger - a_i a_l + a_i^\dagger a_l^\dagger$ e P é chamado operador paridade,

$$P = \bigotimes_{j=1}^N (a_j a_j^\dagger - a_j^\dagger a_j).\tag{5.6}$$

Dado um vetor genérico de uma rede, da forma (3.5), a atuação de P é:

$$P |\psi\rangle = \bigotimes_{j=1}^N (1 - 2a_j^\dagger a_j) |\psi\rangle,$$

aplicando a equação (3.4),

$$P |\psi\rangle = \prod_{j=1}^N (1 - 2\alpha_j) |\psi\rangle = (-1)^N |\psi\rangle,$$

$$P |\psi\rangle = \begin{cases} + |\psi\rangle, & \text{se o número de férmions é 0 ou par,} \\ - |\psi\rangle, & \text{se o número de férmions é ímpar.} \end{cases}$$

podemos definir então as projeções nos subespaços de paridade positiva e negativa:

$$P^\pm = \frac{1}{2}(1 \pm P).\tag{5.7}$$

Definimos também:

$$H^\pm = - \sum_{j=1}^N [f_{j,j+1} + \lambda(a_j a_j^\dagger - a_j^\dagger a_j)],\tag{5.8}$$

com o termo de fronteira para H^+ , anti-periódico: $a_{N+1} = -a_1$, e para H^- , periódico: $a_{N+1} = a_1$. Usando esses operadores, o hamiltoniano é reescrito como:

$$H = H^+ P^+ + H^- P^-. \quad (5.9)$$

Como o operador de paridade e o hamiltoniano comutam, $[P, H] = 0$, a diagonalização é feita separadamente nos subespaços de paridades diferentes. É preciso separar os casos em N par ou ímpar.

i) N par e subespaço de paridade positiva

O próximo passo para desenvolver é fazer uma transformada de Fourier:

$$a_j = \frac{e^{-\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikj}. \quad (5.10)$$

Os operadores c são novos operadores de férmions que também satisfazem as relações de anticomutação. A multiplicação de cada termo do hamiltoniano é feita, por exemplo, da forma:

$$\begin{aligned} a_j a_{j+1}^\dagger &= \frac{e^{-\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{N}} \sum_k c_k e^{ikj} \frac{e^{\frac{i\pi}{4}}}{\sqrt{N}} \sum_{k'} c_{k'}^\dagger e^{-ik'(j+1)} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k, k'} c_k c_{k'}^\dagger e^{-ik'} e^{ij(k-k')}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Para satisfazer o termo de fronteira de H^+ , o momento k só pode assumir os valores:

$$k = \pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, \dots, \left(\pi - \frac{\pi}{N} \right), \quad (5.12)$$

e o Hamiltoniano de paridade positiva fica:

$$H_{par}^+ = \sum_k H_k, \quad (5.13)$$

$$H_k = (\lambda - \cos(k))(c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) + \sin(k)(c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_{-k} c_k), \quad (5.14)$$

Para diagonalizar esse novo hamiltoniano é feita a transformação de Bogolubov,

$$c_k = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \gamma_k - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \gamma_{-k}^\dagger, \quad (5.15)$$

onde

$$\cos(\theta) = \frac{\lambda - \cos(k)}{\epsilon_k}, \quad \sin(\theta) = \frac{\sin(k)}{\epsilon_k},$$

e ϵ_k é dado por:

$$\epsilon_k = \sqrt{(\lambda - \cos(k))^2 + \sin^2(k)},$$

com um novo operador γ_k que, também, satisfaz as relações de anticomutação para férmions, o resultado fica:

$$H_{par}^+ = \sum_k \epsilon_k (2\gamma_k^\dagger \gamma_k - 1). \quad (5.16)$$

Que é da forma de um hamiltoniano de férmions livres, como desejado. Aplicando o operador destruição γ_k para construir o vetor $|vac\rangle$, obtém-se o estado fundamental:

$$|gs\rangle = \bigotimes_{k>0} \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) c_k^\dagger c_{-k}^\dagger \right] |vac\rangle, \quad (5.17)$$

enquanto a energia associada é:

$$\varepsilon_{par}^+ = - \sum_k \epsilon_k. \quad (5.18)$$

Observe que fazer a transformação de Fourier em conjunto com a transformação de Bogolubov é equivalente a encontrar a matriz unitária que diagonaliza a matriz de coeficientes γ nas equações (3.15) e (3.16). Para os demais casos, o procedimento é similar.

ii) N par e subespaço de paridade negativa

O momento k agora deve assumir os valores:

$$k = 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, \dots, \pm \left(\pi - \frac{2\pi}{N} \right), \pi. \quad (5.19)$$

para satisfazer as condições de contorno anti-periódicas, o hamiltoniano com a transformada de Fourier fica:

$$H_{par}^- = \sum_{k/\{0,\pi\}} H_k + h_{par}^-, \quad (5.20)$$

$$h_{par}^- = (\lambda - 1)(c_0^\dagger c_0 - c_0 c_0^\dagger) + (\lambda + 1)(c_\pi^\dagger c_\pi - c_\pi c_\pi^\dagger),$$

onde h_{par}^- é diagonalizado, também, com a transformação de Bogolubov. Dessa forma, os estados com $k = 0, \pi$, são excitados. A energia fundamental é com $k = 0$ ocupado e $k = \pi$ desocupado. A energia associada é:

$$\varepsilon_{par}^- = - \sum_{k/\{0,\pi\}} \epsilon_k - 2. \quad (5.21)$$

iii) N ímpar e subespaço de paridade positiva

O momento vai assumir os valores:

$$k = \pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, \dots, \pm \left(\pi - \frac{2\pi}{N} \right), \pi. \quad (5.22)$$

O hamiltoniano transformado fica:

$$\begin{aligned} H_{impar}^+ &= \sum_{k/\{\pi\}} H_K + h_{impar}^+, \\ h_{impar}^+ &= (\lambda + 1)(c_\pi^\dagger c_\pi - c_\pi c_\pi^\dagger), \end{aligned} \quad (5.23)$$

h_{impar}^+ é diagonalizado com a transformação de Bogolubov. A energia fundamental é com $k = \pi$ vazio. A equação da energia fundamental é:

$$\varepsilon_{impar}^+ = - \sum_{k/\{\pi\}} \epsilon_k - \lambda - 1. \quad (5.24)$$

iv) N ímpar e subespaço de paridade negativa

O momento vai assumir os valores:

$$k = 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, \dots, \left(\pi - \frac{\pi}{N} \right), \quad (5.25)$$

o hamiltoniano transformado fica:

$$\begin{aligned} H_{impar}^- &= \sum_{k/\{0\}} H_k + h_{impar}^-, \\ h_{impar}^- &= (\lambda + 1)(c_0^\dagger c_0 - c_0 c_0^\dagger), \end{aligned} \quad (5.26)$$

h_{impar}^- é diagonalizado com a transformação de Bogolubov. A energia fundamental é com $k = 0$ ocupado, com a energia:

$$\varepsilon_{impar}^- = - \sum_{k/\{0\}} \epsilon + \lambda - 1. \quad (5.27)$$

5.1.1 Intervalo de energia entre os estados fundamentais

Com as equações da energia do estado fundamental de cada caso, é possível encontrar a equação exata do intervalo entre as energias dos subespaços de paridade positiva e negativa do hamiltoniano, para uma rede com $N > 2$. Todos os passos dessa demonstração estão detalhados em [5].

$$\varepsilon^- - \varepsilon^+ = \lambda^N \int_0^1 \frac{4N}{\pi} \frac{t^{N-\frac{3}{2}} \sqrt{(1-t)(t-\lambda^2 t)}}{1 - (\lambda t)^{2N}} dt, \quad \text{para } \lambda < 1, \quad (5.28)$$

$$\varepsilon^- - \varepsilon^+ = \text{sign}(\lambda^N)(2|\lambda| - 2) + \lambda^{-N} \int_0^1 \frac{4N}{\pi} \frac{t^{N-\frac{3}{2}} \sqrt{(1-t)(t-\lambda^2 t)}}{1 - \frac{t^{2N}}{\lambda^{2N}}} dt, \quad \text{para } \lambda > 1, \quad (5.29)$$

$$\varepsilon^- - \varepsilon^+ = 2 \tan\left(\frac{\pi}{4N}\right) \text{sign}(\lambda^N), \quad \text{para } \lambda = 1. \quad (5.30)$$

Dessas equações são tiradas algumas propriedades importantes, a primeira é a relação:

$$\text{sign}(\varepsilon^- - \varepsilon^+) = \text{sign}(\lambda^N), \quad (5.31)$$

que implica na seguinte relação entre a paridade do estado fundamental do hamiltoniano (5.1) e o tamanho da rede N :

- . se N é par, a paridade é positiva,
- . se N é ímpar e $\lambda > 0$, a paridade é positiva,
- . se N é ímpar e $\lambda < 0$, a paridade é negativa.

A segunda propriedade é a relação, a seguir, que mostra como o intervalo de energia, na fase ferromagnética, é limitado.

$$\max\left(\lambda^N \frac{2\sqrt{1-\lambda^2}}{\sqrt{\pi N}}, \frac{4\lambda^{N+1}}{\pi N}\right) \leq \varepsilon^- - \varepsilon^+ \leq 2\lambda^N \frac{\sqrt{1-\lambda^2}}{\sqrt{N-1}} + \lambda^N \frac{\pi\lambda}{2N-1}. \quad (5.32)$$

O comprimento de correlação para uma rede infinita é:

$$\xi \simeq \frac{1}{|\ln \lambda|}. \quad (5.33)$$

No limite termodinâmico, quando esse fator é muito menor que a rede finita, o intervalo diminui exponencialmente com o tamanho da rede N .

$$\varepsilon^- - \varepsilon^+ \propto \frac{e^{-\frac{N}{\xi}}}{\sqrt{N}}. \quad (5.34)$$

Quando o tamanho da rede é menor que esse fator, temos a relação:

$$\varepsilon^- - \varepsilon^+ \propto \frac{1}{N}, \quad (5.35)$$

o intervalo desaparece na fase ordenada e o sistema se comporta como se tivesse no ponto crítico λ_c . Que corresponde ao intervalo $0 < \lambda < \lambda_c$, onde o primeiro estado excitado é um estado de *baixa energia* e converge para o estado fundamental exato conforme a rede cresce, como foi dito no capítulo anterior.

6 Entropia de emaranhamento e localização no modelo XY

O objetivo deste capítulo é elaborar o conceito de entropia de emaranhamento de um bloco da rede com seu restante, em uma rede descrita pelo modelo XY. Para isso vamos apresentar, de forma breve, o conceito de emaranhamento e o Hamiltoniano do modelo. Será apresentado também a equação que descreve a evolução temporal da entropia de emaranhamento, no limite termodinâmico e após uma mudança repentina dos parâmetros iniciais do hamiltoniano. A entropia cresce linearmente com o tempo até saturar em valor que é proporcional tamanho de um do bloco da cadeia.

Por último, vamos tratar o modelo XY com desordem. A desordem é introduzida no sistema fazendo o parâmetro que descreve a força de interação do campo com a rede ser aleatório para cada sítio. Isso pode simular, por exemplo, flutuações da força do campo numa situação experimental.

Para um modelo em uma dimensão, quando é introduzido desordem no sistema acontece uma mudança para uma fase localizada, o que faz com que a entropia de emaranhamento passe a ter um limite superior que não dependa mais do tamanho do bloco.

6.1 Emaranhamento

O emaranhamento surge com a aplicação do princípio de superposição para um sistema de mais de um subsistema, e é caracterizado pela existência de correlações entre as partes do sistema. Dado um estado puro $|\psi\rangle$, pertencente ao produto tensorial $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, sua forma mais geral é escrita:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \alpha_{i,j} |i\rangle \otimes |j\rangle, \quad (6.1)$$

onde $\alpha_{i,j}$ são constantes e $|i\rangle, |j\rangle$ são bases quaisquer para \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B , respectivamente. Usando o teorema da decomposição de Schmidt, o estado pode ser reescrito como:

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |u_i\rangle_A \otimes |v_i\rangle_B, \quad (6.2)$$

sendo os vetores $|u_i\rangle$ e $|v_i\rangle$ novos vetores de bases específicos que são encontrados quando o estado $|\psi\rangle$ é fixado. O Emaranhamento vai estar relacionado com os valores das constantes λ_i .

É possível entender melhor através do seguinte exemplo, considere um sistema com apenas dois spins $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, e considere também o estado $|\psi\rangle$ pertencente a esse espaço tensorial,

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\uparrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2 + \lambda_2 |\downarrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2, \quad (6.3)$$

quando $\lambda_1 = \lambda_2$ temos o máximo de emaranhamento, pois, se medimos no estado $|\uparrow\rangle$ para o primeiro spin, sabemos que o segundo spin também está em $|\uparrow\rangle$ e o mesmo é válido para os estados $|\downarrow\rangle$.

6.2 Entropia de emaranhamento

Dado um sistema composto por dois subsistemas $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, os observáveis A atuando em \mathcal{H}_A e B atuando em \mathcal{H}_B , e um estado puro $|\psi\rangle$ com sua matriz densidade ρ . A entropia de emaranhamento do sistema A com o B é dada pela entropia de Von Neumann [6].

$$S_A = -Tr_A(\rho_A) \ln \rho_A, \quad (6.4)$$

onde $\rho_A = Tr_B(\rho)$ é a matriz densidade reduzida do sistema \mathcal{H}_A . Tem-se a propriedade $S_A = S_B$ para um estado global puro.

6.2.1 Entropia de emaranhamento no modelo XY

Considerando uma rede de spins em uma dimensão com N sítios e condições de contorno periódicas, o hamiltoniano do modelo XY é escrito como:

$$H = - \sum_{j=1}^N \left(\frac{1+\gamma}{4} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \frac{1-\gamma}{4} \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \frac{\lambda}{2} \sigma_j^z \right), \quad (6.5)$$

onde σ são as matrizes de Pauli atuando no sítio j , γ é o parâmetro de anisotropia e λ o campo magnético externo. Esse modelo recebe esse nome porque no caso onde não existe campo magnético, o hamiltoniano possui apenas os termos com σ^x e σ^y . O modelo de Ising (4.1) é caso particular desse modelo, com $\gamma = 1$.

Assim como o modelo de Ising transversal, o modelo XY também é resolvido usando a técnica da transformada de Jordan-Wigner que foi descrita no capítulo (3), onde é feito o mapeamento que leva os operadores de Pauli para os operadores de férmions e, através da transformada de Fourier, escrevemos o Hamiltoniano na forma de férmions livres para diagonalizá-lo. É usando esse mesmo passo a passo utilizado no modelo de Ising transversal que é possível derivar a expressão para entropia de emaranhamento, que vai apresentada em seguida, dentre outras propriedades desse modelo.

Nesse modelo pode ser realizado um *quench*, que é definido como a mudança repentina dos parâmetros. Dessa forma, tomando um bloco de l sítios da rede e o hamiltoniano inicial \mathcal{H}_0 com os parâmetros γ_0 e λ_0 . Após realizar um *quench* em $t = 0$, onde os parâmetros mudam de γ_0 e λ_0 para γ e λ a entropia de emaranhamento do bloco com o resto da rede que é definida pela entropia de Von Neumann (6.4):

$$S_l = -\text{Tr}(\rho_l) \ln \rho_l, \quad (6.6)$$

onde $\rho_l = \text{Tr}_{n \geq l}(\rho)$ é a matriz reduzida do bloco de l spins, resulta em [7]:

$$S_l(t) = t \int_{2|\epsilon'| < l} 2|\epsilon'| H(\cos \Delta_\varphi) \frac{d\varphi}{2\pi} + l \int_{2|\epsilon'| > l} H(\cos \Delta_\varphi) \frac{d\varphi}{2\pi}, \quad (6.7)$$

onde,

$$H(x) = -\frac{(1+x)}{2} \ln\left(\frac{1+x}{2}\right) - \frac{(1-x)}{2} \ln\left(\frac{1-x}{2}\right). \quad (6.8)$$

O termo $\epsilon' = d\epsilon/d\varphi$ é a derivada da relação de dispersão $\epsilon^2(\lambda - \cos \varphi)^2 + \gamma^2 \sin^2 \varphi$, o termo $\cos \Delta_\varphi = [\lambda\lambda_0 - \cos \varphi(\lambda + \lambda_0) + \cos^2 \varphi + \gamma\gamma_0 \sin^2 \varphi]/\epsilon\epsilon_0$ contém todas as informações do *quench*. Esse resultado é obtido considerando o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ e um bloco grande $l \gg 1$.

Em outras palavras, o estado inicial $\rho(t)$ está associado ao hamiltoniano inicial com os parâmetros γ_0 e λ_0 . É feita a evolução temporal dessa matriz densidade usando o Hamiltoniano, após o *quench*, que possui os parâmetros γ e λ , com a evolução temporal do $\rho(t)$ é calculado a entropia de Von Neumann.

Em uma rede de uma dimensão a área de um bloco é definida com o número de sítios que estabelecem a fronteira desse bloco e o volume é definido como o número de sítios contidos dentro desse bloco. A equação (6.7) estabelece que a entropia de emaranhamento obedece uma lei de volume. O primeiro termo da equação descreve que o emaranhamento cresce linearmente com o tempo até que satura em um valor proporcional ao número de sítios l contidos no bloco. A entropia de emaranhamento possui um máximo, que também é proporcional a l e está relacionado a dimensão do espaço de Hilbert de cada sítio, dado por:

$$S_l(t) \leq l \ln 2 \quad (6.9)$$

Uma possível interpretação física para essa dinâmica da entropia de emaranhamento é através de uma descrição por quasipartículas. O estado inicial, que é auto estado do hamiltoniano com os parâmetros iniciais, possui muita energia quando comparado com o estado fundamental do hamiltoniano usado para realizar a evolução temporal. Dessa

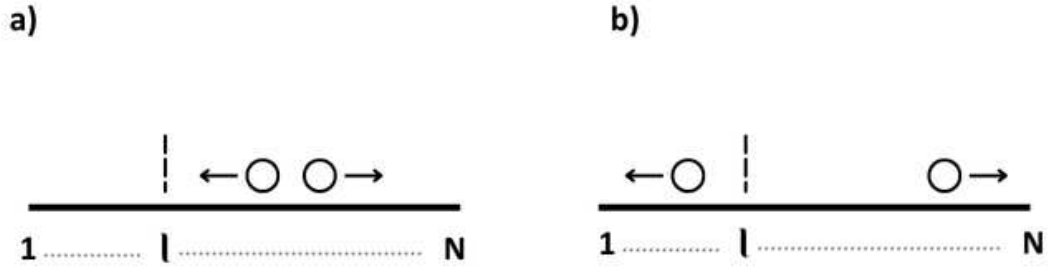


Figura 6 – a) Desenho esquemático representando um par de partículas entrelaçados sendo criados, onde cada uma viaja para um lado, em b) uma das partícula adentra o bloco de l sítios e o bloco passa a estar correlacionado com o resto da rede

forma, esse estado inicial atua como uma fonte de excitações, criando pares de partículas. Partículas criadas em diferentes pontos não estão correlacionadas, já partículas criadas em um mesmo ponto, sendo uma viajando para direita e a outra para a esquerda, estão correlacionadas. Eventualmente uma dessas partículas vai entrar no bloco de l sítios, então o bloco estará correlacionado com o resto da rede.

Essas partículas vão ter uma velocidade máxima [7], definida por: $v_M \equiv \max_{\varphi} |\epsilon'|$. Essa interpretação esta de acordo com a saturação da entropia, pois em determinado momento o bloco de sítios não tera mais espaço para receber novas partículas.

6.2.2 Entropia de emaranhamento no modelo de Ising transverso

Retomando o modelo de Ising transverso descrito pelo hamiltoniano:

$$H_I(\lambda) = -\frac{1}{2} \sum_j (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \lambda \sigma_j^z), \quad (6.10)$$

e usando os mesmo procedimentos matemáticos, é possível obter uma equação para evolução temporal da entropia para esse modelo também. Dado um estado inicial $|\psi_0\rangle$ que é um autoestado de $H(\lambda_0)$ e fazendo-se a evolução temporal usando $H(\lambda)$,

$$|\psi_0(t)\rangle = e^{-iH(\lambda)t} |\psi_0\rangle, \quad (6.11)$$

a equação que descreve a entropia de emaranhamento, no limite $t \rightarrow \infty$, resulta em [6]:

$$S_l(\infty) = \frac{l}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi H \left(\frac{1 - \cos \varphi (\lambda + \lambda_0) + \lambda \lambda_0}{\sqrt{(\lambda^2 + 1 - 2\lambda \cos \varphi)(\lambda_0^2 + 1 - 2\lambda_0 \cos \varphi)}} \right), \quad (6.12)$$

onde,

$$H(x) = -\frac{(1+x)}{2} \ln\left(\frac{1+x}{2}\right) - \frac{(1-x)}{2} \ln\left(\frac{1-x}{2}\right). \quad (6.13)$$

Dessa forma a entropia de emaranhamento é sempre linear e proporcional a l . Considerando o quench de $\lambda_0 = \infty$ para o ponto crítico do campo magnético externo $\lambda = 1$, é obtido o valor máximo que a entropia pode assumir [6], $S_l = l(2 \ln 2 - 1)$, como é proporcional a l o modelo de Ising também obedece a lei de área.

6.3 Fase localizada

Introduzindo desordem no modelo XY faz com que a rede entre numa fase localizada, onde não tem transporte de energia e partícula. A desordem é aplicada atribuindo valores aleatórios para os parâmetros γ e λ do Hamiltoniano em cada sítio. O hamiltoniano do modelo XY com desordem é:

$$H = -\sum_{j=1}^{N-1} \left[\frac{(1+\gamma_j)}{4} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \frac{(1-\gamma_j)}{4} \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y \right] - \sum_{j=1}^N \frac{\lambda_j}{2} \sigma_j^z. \quad (6.14)$$

Em uma dimensão já foi provado [8] que a localização surge não importa o qual pequeno é a desordem aplicada. Quando fazemos a transformada de Jordan-Wigner nesse hamiltoniano vamos obter o hamiltoniano quadrático de férmions com uma matriz (3.20) em que as entradas vão ser os coeficientes do Hamiltoniano. Podemos interpretar essa matriz como uma partícula vagando pela rede, e já é sabido [8] [9] que quando essa matriz possui valores aleatórios, seus autoestados passam a ser localizados. Dessa forma, a transformada de Jordan-Wigner permite reduzir o problema de uma rede com desordem a um problema de uma partícula localizada.

Essa fase localizada causada pela desordem vai fazer com que a evolução temporal da entropia de emaranhamento, após um quench, continue apresentando um máximo, porém que não respeita mais uma lei de volume, e sim uma lei de área [10]:

$$S_l(t) \leq C, \quad (6.15)$$

onde C é uma constante finita. Comparando as equações (6.9) e (6.15), vemos que a entropia de emaranhamento possui sempre um limite superior onde vai saturar conforme a evolução temporal acontece, contudo, aplicando a desordem no campo externo, o limite superior deixa de ser proporcional ao tamanho do bloco l .

7 Sistemas abertos

Nesse último capítulo vamos apresentar uma extensão dos conceitos dos capítulos passados. Podemos considerar a rede de spins acoplada a reservatórios térmicos que vão, através da interação, forçar a rede a convergir para um estado de equilíbrio térmico ou de não-equilíbrio estático. Primeiro vamos apresentar a equação mestra de Lindblad, que rege a evolução temporal da matriz densidade de estado do sistema. Depois o cálculo da matriz de covariância, técnica matemática para calcular a matriz densidade usando a equação de Lindblad. Apresentamos alguns resultados já conhecidos na literatura para sistemas que são redes de spins interagindo com reservatórios térmicos, onde esse reservatórios são modelados como um conjunto infinito de partículas que interagem com a rede através de colisões. A interação é descrita pelo protocolo de interações repetidas. Por último vai ser apresentado um exemplo de uma rede com um único spin acoplado a um único reservatório, onde vamos aplicar diversos conceitos já tratados nesse texto, a transformada de Jordan-Wigner para rescrever o hamiltoniano de spins em forma de férmions livres, e o cálculo da matriz de covariância com a equação de Lindblad para determinar o estado estacionário da rede, seja térmico ou de não-equilíbrio estático.

7.1 Sistema e ambiente

Vamos focar no caso em que o ambiente do sistema é formado por reservatórios térmicos. O banho transmite calor e realiza trabalho no sistema. A equação mestra de Lindblad [11] [12] descreve a dinâmica do operador densidade do sistema:

$$\frac{d\rho_s}{dt}(t) = -i[H_s(t), \rho_s(t)] + \sum_r \mathcal{D}_r(\rho_s(t)), \quad (7.1)$$

onde os dissipadores, que representam os banhos, são dados por [11]:

$$\mathcal{D}_r(\rho) = \sum_m \gamma_r^m (2L_r^m \rho L_r^{m\dagger} - \{L_r^{m\dagger} L_r^m, \rho\}). \quad (7.2)$$

As equações gerais para energia interna, variação do trabalho e calor do sistema são definidas como:

$$U(t) = Tr[H_s(t)\rho_s(t)], \quad (7.3)$$

$$\dot{W}(t) = Tr[\dot{H}_s(t)\rho_s(t)], \quad (7.4)$$

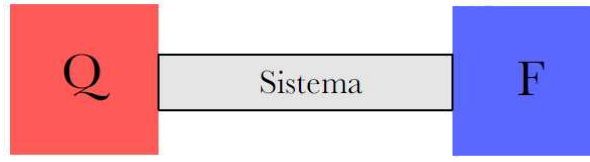


Figura 7 – a) Desenho esquemático representando um sistema acoplado a dois reservatórios, o da esquerda quente e o da direita frio, conjunto que leva o sistema a um estado de não equilíbrio estático (NESS).

$$\dot{Q}_r(t) = \text{Tr}[H_s(t)\mathcal{D}_r(\rho_s(t))], \quad (7.5)$$

em que vale observar que \dot{Q}_r é o calor que flui de cada reservatório, sendo o calor total a soma $\dot{Q}(t) = \sum_r \dot{Q}_r(t)$. Dessa forma, caracterizando a primeira lei da termodinâmica $\dot{U} = \dot{W} + \dot{Q}$.

A interação entre reservatórios e sistema pode forçar o sistema a estacionar em um estado de equilíbrio térmico ou um estado de não equilíbrio estático (NESS). A definição de um estado em equilíbrio térmico é quando pode ser descrito pelo ensemble de Gibbs [13]. O que defini um estado de não-equilíbrio estático, é quando o sistema não atinge o estado de equilíbrio térmico mas as principais quantidades do sistema param de variar no tempo. Um exemplo, é um sistema acoplado a um reservatório quente na esquerda e um reservatório frio na direita, neste caso, o calor nunca para de fluir pelo sistema, porém flui sempre de forma constante.

7.1.1 Protocolo de interações repetidas

Cada reservatório é modelado como um conjunto de infinitas partículas idênticas e não-interagentes entre si. Cada partícula interage com a borda do sistema durante um determinado tempo por meio de uma colisão. Assumimos também que a rede está em contato com dois reservatórios, um em cada extremidade. Cada partícula do reservatório é escrita por um hamiltoniano interno H_i , o hamiltoniano total do banho será $H_r = \sum_i H_r^i$, onde $r = d, e$, para diferenciar os reservatórios da direita e esquerda. Assumindo, que o potencial V_r^i descreva a interação de cada partícula do reservatório com a rede e que a interação ocorra por um tempo τ .

Em $t = 0$ o sistema e o reservatório estão desacoplados, o estado total vai ser:

$$\rho_T = \rho(0) \bigotimes_i (\rho_d^i \otimes \rho_e^i), \quad (7.6)$$

um estado produto do estado do sistema e os estados dos banhos. Fazendo a evolução temporal, o sistema vai interagir com cada copia idêntica do banho, com o potencial

$V_d^i + V_e^i$, o sistema após a n -ésima interação, trançando fora a copia n do ambiente [11]:

$$\rho_s(n\tau) = \text{Tr}_n[U_n(\rho_s((n-1)\tau) \otimes \rho_n)U_n^\dagger], \quad (7.7)$$

e a unitária é dada por $U_n = e^{\frac{-i\tau}{\hbar}(H_s + H_d^n + H_e^n + V_d^i + V_e^i)}$. No limite $\tau \rightarrow 0$, essa equação converge para a equação de Lindblad (7.1). A quantidade de trabalho realizada pelo reservatório, e a quantidade de calor que flui para o sistema, no intervalo τ , são dados por:

$$\Delta W_r = -\text{Tr}[V_r^n U_n \rho_s((n-1)\tau) \otimes \rho_n U_n^\dagger], \quad (7.8)$$

$$\Delta Q_r = \text{Tr}[H_r^n (\rho_n - \rho'_n)], \quad (7.9)$$

sendo $\rho'_n = \text{Tr}_s[U_n \rho_s((n-1)\tau) \otimes \rho_n U_n^\dagger]$ a matriz densidade da n -ésima copia do ambiente.

A produção de entropia no intervalo τ [11], é dada por:

$$\Delta S = D(\rho'_n, \rho_n) + I(S' : n') \geq 0, \quad (7.10)$$

onde o termo $I(S' : n') \equiv S(\rho_s(n\tau) + S(\rho'_n) - S(U_n \rho_s((n-1)\tau) \otimes \rho_n U_n^\dagger)$ quantifica o crescimento da correlação entre o sistema e a n -ésima copia do ambiente.

Para um sistema que interage com os reservatórios térmicos pelo método de interações repetidas e assumindo que o potencial de interação é $V = \sum_r V_r$ com cada $V_r = v_r/\sqrt{\tau}$ e o estado de cada banho é $\rho_n = \omega_{\beta_d} \otimes \omega_{\beta_e}$, as equações para a variação de trabalho e calor ficam:

$$\dot{W}_r = D_r(H_s + H_r), \quad (7.11)$$

$$\dot{Q}_r = -D_r(H_r), \quad (7.12)$$

onde o termo $D_r(H) = \text{Tr}[(v_r H v_r \frac{1}{2} \{v_r^2, H\})\rho_s(t) \otimes \omega_{\beta_r}]$

7.1.2 Matriz de covariância

A matriz de covariância permite calcular a evolução temporal da matriz densidade do sistema $\rho_s(t)$ [14], é definida:

$$C_{ij} = \langle a_j^\dagger a_i \rangle. \quad (7.13)$$

Calcula-se a evolução temporal dessa matriz, a partir da equação mestra de Lindblad (7.1),

$$\frac{dC_{ij}}{dt} = \text{Tr} \left[a_j^\dagger a_i \frac{d\rho}{dt} \right] \quad (7.14)$$

$$= -i \text{Tr} \left[a_j^\dagger a_i [H, \rho] + a_j^\dagger a_i \sum_{m=i}^N \mathcal{D}_m(\rho) \right]. \quad (7.15)$$

Como o interesse é estudar o sistema quando estaciona no estado de equilíbrio térmico ou atinge um estado de não-equilíbrio estático, toma-se o estado estacionário,

$$\frac{dC_{ij}}{dt} = 0. \quad (7.16)$$

Para estados Gaussianos o teorema de Wick [15] relaciona o valor esperado de qualquer observável com os valores esperados de $a_j^\dagger a_i$, então é possível obter a matriz densidade estacionaria do sistema.

7.2 Rede de spins acoplada a reservatórios térmicos

Considerando que nosso sistema é composto por um rede com N spins interagindo entre si e com um campo magnético externo λ , então pode ser descrito pelo hamiltoniano do modelo XY , adotando condições de contorno aberta:

$$H_s = - \sum_{j=1}^{N-1} (J_x \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + J_y \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y) - \frac{\lambda}{2} \sum_{j=1}^N \sigma_j^z. \quad (7.17)$$

Considerando ainda que o protocolo de interações repetidas é feito usando os potenciais de interação:

$$V_e = \sqrt{\frac{\epsilon}{\tau}} (\sigma_e^x \sigma_1^x + \sigma_d^y \sigma_1^y), \quad (7.18)$$

$$V_d = \sqrt{\frac{\epsilon}{\tau}} (\sigma_d^x \sigma_N^x + \sigma_d^y \sigma_N^y). \quad (7.19)$$

Assumimos também, que as partículas do banho e da rede estão submetidas a um mesmo campo magnético externo e que o reservatório seja descrito pelo hamiltoniano $H_r = \frac{\lambda_r}{2} \sigma_r^z$. Podemos definir a magnetização de cada banho [11]:

$$M_r = - \tanh\left(\frac{\beta_r \lambda_r}{2}\right), \quad (7.20)$$

onde a constante $\beta_r = \frac{1}{KT}$ é o inverso da temperatura do reservatório e K a constante de Boltzmann.

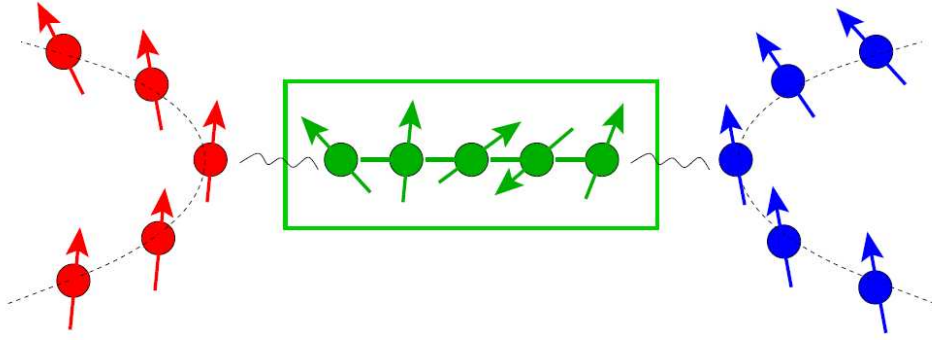


Figura 8 – a) Desenho esquemático representando a interação por colisão entre a rede spins e os spins dos reservatórios Imagem retirada de [16].

Acoplado um único banho térmico do lado esquerdo da rede, descrito pelo dissipador:

$$\mathcal{D}_e(\rho) = \gamma_e^+ [(2\sigma_1^+ \rho \sigma_1^- - \{\sigma_1^- \sigma_1^+, \rho\}) + e^{\beta_e \lambda_e} (2\sigma_1^- \rho \sigma_1^+ - \{\sigma_1^+ \sigma_1^-, \rho\})], \quad (7.21)$$

onde $\gamma_e^+ = \epsilon(1 + M_e)$. Esse sistema é chamado de *boundary driven Lindblad system* [12], pois é um sistema que está sendo compelido a atingir um certo estado através dos reservatórios agindo em suas extremidades.

As expressões para variação de calor e trabalho são [11]:

$$\dot{Q}_e = 2\lambda\epsilon(M_e - Tr_s[\sigma_1^z \rho_s(t)]), \quad (7.22)$$

$$\dot{W}_e = 2\epsilon Tr_s[(J_x \sigma_1^x \sigma_2^x + J_y \sigma_1^y \sigma_2^y) \rho_s]. \quad (7.23)$$

Para uma rede XY acoplada a um único reservatório é sabido [11] que o sistema converge para um estado de não-equilíbrio estático (NESS), onde a produção de entropia é positiva e constante e a variação de trabalho é igual ao oposto da variação do calor $\dot{W} = -\dot{Q}$. É demonstrado também que $\beta\dot{W} = dS/dt > 0$. Aqui é importante lembrarmos que a transformação de Jordan-Wigner é necessária para tratar o Hamiltoniano com a equação de Lindblad 7.1 e possibilita a obtenção desses resultados.

7.3 Um único spin acoplado a um reservatório térmico

O exemplo mais simples de sistemas abertos que pode ser interessante tratar é uma rede de um único spin acoplado a um reservatório. Esse sistema converge para um estado de equilíbrio térmico conforme o estado inicial evolui no tempo, até que estaciona nesse

estado de equilíbrio. Primeiro, partindo do hamiltoniano de spins interagentes, podemos aplicar a Transformação de Jordan-Wigner, que foi tratada no capítulo (3) para obter o hamiltoniano na forma de férmions livres, em seguida para obter a matriz densidade do estado da rede no estado estacionário, vamos usar o conceito da matriz de covariância. Nessa parte vai ser aplicado a equação mestra de Lindblad (7.1) e a álgebra das relações canônicas de anticomutação para férmions (3.1), (3.2) e (3.3). O hamiltoniano que descreve o spin é:

$$H = \lambda \sigma_1^z, \quad (7.24)$$

onde λ é o campo magnético externo que esta interagindo com a rede, não possui os termos de interação por ter apenas um spin. Fazendo a transformada de Jordan-Wigner (3.8):

$$\sigma_1^z = 1 - 2a_1^\dagger a_1, \quad (7.25)$$

aqui vale ressaltar que como a álgebra de férmions esta relacionada com dois índices de sítios diferentes, para uma rede com apenas um sítio a transformada se reduz a apenas uma mudança de variável. O Hamiltoniano fica então, escrito na forma de férmions livres,

$$H = \lambda(1 - 2a_1^\dagger a_1). \quad (7.26)$$

A equação de Lindblad é:

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + \mathcal{D}_1(\rho), \quad (7.27)$$

o dissipador pode ser escrito da seguinte forma [14]:

$$\mathcal{D}_1 = \gamma(1 - f_1)(a_1 \rho a_1^\dagger - \frac{1}{2}\{a_1^\dagger a_1, \rho\}) + \gamma f_1(a_1^\dagger \rho a_1 - \frac{1}{2}\{a_1 a_1^\dagger, \rho\}). \quad (7.28)$$

Desenvolvendo a matriz de covariância (7.14), temos

$$\frac{d\langle a_1^\dagger a_1 \rangle}{dt} = \gamma(f_1 - \langle a_1^\dagger a_1 \rangle). \quad (7.29)$$

Agora, tomando o caso estacionário, $d\langle a_1^\dagger a_1 \rangle/dt = 0$, temos

$$\langle a_1^\dagger a_1 \rangle = f_1. \quad (7.30)$$

Esse valor esperado nos permite encontrar parte da matriz densidade ρ do sistema. Considerando uma matriz densidade geral para spins:

$$\rho = \begin{pmatrix} p & c \\ c^* & 1-p \end{pmatrix}, \quad (7.31)$$

que nos leva em $\langle \sigma_1^z \rangle = 2p - 1$. Da equação (7.25) vemos que:

$$p = \langle a_1^\dagger a_1 \rangle = f_1. \quad (7.32)$$

Calculando o valor esperado de a_1 usando, também, a equação de Lindblad, vemos que $\langle a_1 \rangle = 0$, e da transformada de Jordan-Wigner (3.6), temos:

$$\langle a_1 \rangle = \sigma_1^- \quad (7.33)$$

então,

$$\langle \sigma_1^x \rangle = \langle \sigma_1^y \rangle = 0 \quad (7.34)$$

e dessa forma, temos $c = 0$. Por fim, a matriz densidade que encontramos fica da seguinte forma:

$$\rho = \begin{pmatrix} f_1 & 0 \\ 0 & 1-f_1 \end{pmatrix}, \quad (7.35)$$

que é um estado de equilíbrio associado a forma em que o dissipador está escrito, como estabelecido em [12]. Comparando as duas diferentes formas de se escrever o dissipador, as equações (7.28) e (7.21) podemos relacionar o valor da variável f com a temperatura e magnetização do banho térmico, e dessa forma o resultado coincide com o estado de Gibbs. Demonstrando que o estado estacionário da rede é, de fato, um estado de equilíbrio térmico.

8 Conclusões

O mapeamento que a transformada de Jordan-Wigner permite, se mostrou muito útil, possibilitando obter as auto energias de hamiltonianos de vários modelos que apresentam diversos resultados exatos interessantes e contribuiu para evoluir o entendimento da mecânica quântica de muitos corpos.

As redes de spins estudadas aqui possuem aplicações na física da matéria, principalmente em materiais condutores e semicondutores. Podendo, por exemplo, descrever um metal com elétrons livres, ou uma rede de átomos que compõem uma liga. A parte mais interessante dos modelos integráveis é possibilidade de se obter os resultados exatos, que nos permite ter uma compreensão completa do problema. Embora, os resultados numéricos sejam muito úteis também, e muitas vezes a única solução possível.

Os sistemas abertos são uma evolução natural dos estudos de redes de spins, possibilitando abranger outras situações em laboratório, e possivelmente progredir para o estudo de máquinas térmicas e suas aplicações.

Referências

- [1] Lieb, Elliott, Theodore Schultz e Daniel Mattis: *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*. *Annals of Physics*, 16(3):407–466, 1961, ISSN 0003-4916. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0003491661901154>. Citado na página 10.
- [2] Nielsen, Michael A.: *The Fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform*. 2005. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:199373281>. Citado 3 vezes nas páginas 18, 20 e 54.
- [3] Ballentine, Leslie E: *Quantum Mechanics*. WORLD SCIENTIFIC, 2nd edição, 2014. <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/9038>. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 52.
- [4] Tasaki, Hal: *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems*. Springer Cham, 2020. Citado 3 vezes nas páginas 23, 25 e 30.
- [5] Damski, Bogdan e Marek M Rams: *Exact results for fidelity susceptibility of the quantum Ising model: the interplay between parity, system size, and magnetic field*. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 47(2):025303, dec 2013. <https://dx.doi.org/10.1088/1751-8113/47/2/025303>. Citado 3 vezes nas páginas 28, 32 e 37.
- [6] Calabrese, Pasquale e John Cardy: *Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems*. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2005(04):P04010, apr 2005. <https://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2005/04/P04010>. Citado 3 vezes nas páginas 40, 42 e 43.
- [7] Fagotti, Maurizio e Pasquale Calabrese: *Evolution of entanglement entropy following a quantum quench: Analytic results for the XY chain in a transverse magnetic field*. *Phys. Rev. A*, 78:010306, Jul 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.78.010306>. Citado 3 vezes nas páginas 41, 42 e 52.
- [8] Guan, Chen e Xingyue Guan: *A brief introduction to Anderson Localization*. 2019. <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:211195988>. Citado na página 43.
- [9] Anderson, P. W.: *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.1492>. Citado na página 43.

- [10] Abdul-Rahman, Houssam, Bruno Nachtergaele, Robert Sims e Günter Stolz: *Localization properties of the disordered XY spin chain: A review of mathematical results with an eye toward many-body localization*. *Annalen der Physik*, 529(7), março 2017, ISSN 1521-3889. <http://dx.doi.org/10.1002/andp.201600280>. Citado 2 vezes nas páginas 43 e 52.
- [11] Barra, Felipe: *The thermodynamic cost of driving quantum systems by their boundaries*. *Scientific Reports*, 5(1), outubro 2015, ISSN 2045-2322. <http://dx.doi.org/10.1038/srep14873>. Citado 4 vezes nas páginas 44, 46, 47 e 48.
- [12] Landi, Gabriel T., Dario Poletti e Gernot Schaller: *Nonequilibrium boundary-driven quantum systems: Models, methods, and properties*. *Reviews of Modern Physics*, 94(4), dezembro 2022, ISSN 1539-0756. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.94.045006>. Citado 3 vezes nas páginas 44, 48 e 50.
- [13] Ciccarello, Francesco, Salvatore Lorenzo, Vittorio Giovannetti e G. Massimo Palma: *Quantum collision models: Open system dynamics from repeated interactions*. *Physics Reports*, 954:1–70, abril 2022, ISSN 0370-1573. <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2022.01.001>. Citado na página 45.
- [14] Lacerda, Artur M., John Goold e Gabriel T. Landi: *Dephasing enhanced transport in boundary-driven quasiperiodic chains*. *Physical Review B*, 104(17), novembro 2021, ISSN 2469-9969. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.104.174203>. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 49.
- [15] Surace, Jacopo e Luca Tagliacozzo: *Fermionic Gaussian states: an introduction to numerical approaches*. *SciPost Physics Lecture Notes*, maio 2022, ISSN 2590-1990. <http://dx.doi.org/10.21468/SciPostPhysLectNotes.54>. Citado na página 47.
- [16] Karevski, Dragi e Thierry Platini: *Quantum Nonequilibrium Steady States Induced by Repeated Interactions*. *Phys. Rev. Lett.*, 102:207207, May 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.207207>. Citado na página 48.
- [17] Tasaki, Hal: *Long-Range Order, “Tower” of States, and Symmetry Breaking in Lattice Quantum Systems*. *Journal of Statistical Physics*, 174(4):735–761, dezembro 2018, ISSN 1572-9613. <http://dx.doi.org/10.1007/s10955-018-2193-8>. Citado na página 52.
- [18] Nielsen, Michael A. e Isaac L. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, 2010. Citado na página 52.
- [19] McIntyre, David H.: *Quantum Mechanics: A Paradigms Approach*. Cambridge University Press, 2022. Citado na página 52.

APÊNDICE A – Propriedades dos operadores fermiônicos

Neste apêndice vai ser desenvolvido, de forma detalhada, algumas demonstrações das propriedades dos operadores fermiônicos. Essas demonstrações estão apresentadas de forma resumida em [2].

i) $a_j^\dagger a_j$ é um operador hermitiano com auto-valores 0 e 1

Começamos mostrando que $a_j^\dagger a_j$ é positivo ou nulo, e por consequência hermitiano. Vamos mostrar, também que $(a_j^\dagger a_j)^2 = a_j^\dagger a_j$, dessa forma os auto-valores de $a_j^\dagger a_j$ são 0 ou 1.

Demonstração. Da relação de comutação (3.1), com $j = k$, temos:

$$\begin{aligned} a_j a_j^\dagger + a_j^\dagger a_j &= I, \\ (a_j a_j^\dagger + a_j^\dagger a_j)_{n,m} &= I_{n,m} \geq 0 \quad \forall n, m. \end{aligned}$$

Então, $a_j^\dagger a_j$ e $a_j a_j^\dagger$ são positivos e não nulos, portanto hermitianos. Desenvolvendo,

$$(a_j^\dagger a_j)^2 = a_j^\dagger a_j a_j^\dagger a_j = a_j^\dagger (a_j a_j^\dagger) a_j.$$

Usando (3.1), fazendo $j = k$ e substituindo $a_j a_j^\dagger = I - a_j^\dagger a_j$, temos:

$$\begin{aligned} (a_j^\dagger a_j)^2 &= a_j^\dagger (I - a_j^\dagger a_j) a_j, \\ &= a_j^\dagger a_j - (a_j^\dagger)^2 (a_j)^2. \end{aligned}$$

Pela relação (3.2), ainda com $j = k$,

$$\begin{aligned} a_j a_j + a_j a_j &= 0, \\ (a_j)^2 &= 0. \end{aligned}$$

e por consequência,

$$(a_j^\dagger a_j)^2 = a_j^\dagger a_j.$$

□

ii) a_j é um operador destruição

Se $|\psi\rangle$ é um auto-estado normalizado de $a_j^\dagger a_j$ com auto-valor 1, então $a_j |\psi\rangle$ é um auto-estado normalizado de $a_j^\dagger a_j$ com auto-valor 0. Sabemos também, que se $a_j^\dagger a_j |\psi\rangle = 0$, então $a_j |\psi\rangle = 0$.

Demonstração. Supondo que $|\psi\rangle$ é um estado normalizado de $a_j^\dagger a_j$, ou seja $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, e $a_j^\dagger a_j |\psi\rangle = |\psi\rangle$, fazemos o produto interno de $a_j |\psi\rangle$,

$$\langle\psi| a_j^\dagger a_j |\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1,$$

e vemos que $a_j |\psi\rangle$ é normalizado. Para demonstrar o auto-valor de $a_j |\psi\rangle$ em relação a $a_j^\dagger a_j$, usamos (3.2),

$$a_j^\dagger a_j a_j |\psi\rangle = 0.$$

Para demonstrar a última afirmação:

$$\begin{aligned} a_j^\dagger a_j |\psi\rangle &= 0, \\ a_j a_j^\dagger a_j |\psi\rangle &= a_j 0. \end{aligned}$$

Usando a relação (3.1), $a_j a_j^\dagger = I - a_j^\dagger a_j$, temos:

$$\begin{aligned} a_j a_j^\dagger a_j |\psi\rangle &= (I - a_j^\dagger a_j) a_j |\psi\rangle = 0, \\ (a_j - a_j^\dagger a_j^2) |\psi\rangle &= 0, \\ a_j |\psi\rangle &= 0. \end{aligned}$$

□

iii) a_j^\dagger é um operador criação

Se $|\psi\rangle$ um auto-estado normalizado de $a_j^\dagger a_j$ com auto-valor 0, então $a_j^\dagger |\psi\rangle$ é um auto-estado normalizado de $a_j^\dagger a_j$ com auto-valor 1. Se $|\psi\rangle$ é um auto-estado normalizado de a_j^\dagger com auto-valor 1, então $a_j^\dagger |\psi\rangle = 0$.

Demonstração. Supondo que $|\psi\rangle$ é um estado normalizado de $a_j^\dagger a_j$, e $a_j^\dagger a_j |\psi\rangle = 0$. Fazemos o produto interno de $a_j^\dagger |\psi\rangle$, para mostrar que é normalizado,

$$\langle \psi | a_j a_j^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | (I - a_j^\dagger a_j) | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle - \langle \psi | a_j^\dagger a_j | \psi \rangle = 1,$$

onde usamos a relação (3.1). Para demonstrar o auto-valor de $a_j^\dagger | \psi \rangle$ em relação a $a_j^\dagger a_j$,

$$a_j^\dagger a_j a_j^\dagger | \psi \rangle = a_j^\dagger (I - a_j^\dagger a_j) | \psi \rangle = a_j^\dagger | \psi \rangle,$$

Para última afirmação,

$$\begin{aligned} a_j^\dagger a_j | \psi \rangle &= | \psi \rangle, \\ a_j^\dagger a_j^\dagger a_j | \psi \rangle &= a_j^\dagger | \psi \rangle, \\ (a_j^\dagger)^2 a_j | \psi \rangle &= a_j^\dagger | \psi \rangle. \\ a_j^\dagger | \psi \rangle &= 0, \end{aligned}$$

□

iv) $a_j^\dagger a_j$ formam um conjunto de operadores que comutam.

Basta desenvolvermos os comutadores, onde vamos ter que dividir nos casos onde os índices são iguais ou diferentes.

Demonstração. Considerando $j \neq k$, temos

$$\begin{aligned} [a_j^\dagger a_j, a_k^\dagger a_k] &= a_j^\dagger a_j a_k^\dagger a_k - a_k^\dagger a_k a_j^\dagger a_j a_k^\dagger a_k, \\ &= -a_j^\dagger a_k^\dagger a_j a_k + a_j^\dagger a_k^\dagger a_j a_k, \\ &= 0. \end{aligned}$$

Considerando $k = j$,

$$\begin{aligned} [a_j^\dagger a_j, a_j^\dagger a_j] &= a_j^\dagger a_j a_j^\dagger a_j - a_j^\dagger a_j a_j^\dagger a_j, \\ &= 0. \end{aligned}$$

□