UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Lucas de Morais Ramos

Comportamento crítico e informação quântica em cadeias quânticas de spins descritas por férmions ou paraférmions livres

São Carlos

2023

Comportamento crítico e informação quântica em cadeias quânticas de spins descritas por férmions ou paraférmions livres

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Teórica e Experimental

Orientador: Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz

Versão corrigida

(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

> Ramos, Lucas de Morais Comportamento crítico e informação quântica em cadeias quânticas de spins descritas por férmions ou paraférmions livres / Lucas de Morais Ramos; orientador Francisco Castilho Alcaraz - versão corrigida -- São Carlos, 2023. 102 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Teórica e Experimental) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2023.

Cadeias quânticas de spins. 2. Invariância conforme.
 Entropias de emaranhamento. 4. Não hermiticidade. I.
 Alcaraz, Francisco Castilho, orient. II. Título.

Este trabalho é dedicado as minhas sobrinhas Ana Sofia e Maria Clara e também aos meus afilhados Ricardo e Matheus.

AGRADECIMENTOS

Certa vez ouvi de um colega do IFSC, inteligentíssimo, por sinal, que Deus era campo. Permita-me ir além dizendo que somos partículas e, estamos da criação à aniquilação, imersos num campo. Por isso agradeço a Deus por todo trabalho realizado sobre esta ínfima partícula, possibilitando essa bela pesquisa.

Também agradeço pela orientação, paciência e dedicação de meu orientador, prof. Dr. Francisco C. Alcaraz. A mim, fica o exemplo de uma grande pessoa, um grande cientista e um ótimo profissional, com quem sou grato de ter trabalhado os últimos dois anos.

Agradeço a minha mãe, Vanilda, e meu pai, Niltom, que incondicionalmente me apoiam desde a graduação. Também sou grato aos meus irmãos, Larissa, Matheus e Thiago pelo suporte ao longo dessa trajetória.

A minha bela amada Denise, meu porto seguro e refúgio em tempos tão difíceis, eu cito Carl Sagan, dizendo: "Diante da vastidão do tempo e da imensidão do universo, é um imenso prazer para mim dividir um planeta e uma época com você."

Agradeço aos professores Leonardo, Miled, Eric e Reginaldo pelos esforços ao ministrarem disciplinas que foram fundamentais em minha formação como mestre.

Agradeço a USP, ao IFSC e a todos os seus funcionários por me propiciarem um ambiente digno de ensino, pesquisa e extensão.

Agradeço a todo o povo brasileiro que, através do CNPq (processo 130157/2021-0), financiou essa pesquisa.

"Quem anda no trilho é trem de ferro. Sou água que corre entre pedras: -liberdade caça jeito. Procuro com meus rios os passarinhos Eu falo desemendado." Liberdade caça jeito - Manoel de Barros

RESUMO

RAMOS, L. M. Comportamento crítico e informação quântica em cadeias quânticas de spins descritas por férmions ou paraférmions livres. 2023. 102p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

Duas novas famílias de cadeias quânticas de spins com p interações multispins foram recentemente introduzidas em (1). Uma possui simetria Z(N) e descreve férmions (N = 2)e paraférmions (N > 2) livres na rede. A outra família é uma extensão do modelo XY com N interações multispins, possuindo simetria U(1) e sendo exatamente solúvel por transformação de Jordan-Wigner para todo N. Ambas são não hermitianas para N > 2 e, sob condições abertas de contorno, compartilham quasi-energias que são obtidas a partir das raízes de um determinado polinômio característico. No presente trabalho, apresentamos um estudo geral das propriedades de invariância conforme e informação quântica em um caso particular dessa nova família de modelos XY, que contém interações de três spins (p=2). Apesar desse modelo ser não hermitiano, entropias de emaranhamento (como as de von Neumann e Rényi) são estudadas explorando a invariância de translação e usando a técnica da matriz de correlação. O estudo das propriedades espectrais do modelo revelou que o mesmo possui duas fases críticas distintas (com cargas centrais c = 1 e c = 2, respectivamente) que dependem de um dado parâmetro de anisotropia. Com relação à entropia de emaranhamento, nossos resultados seguem a conjectura de Cardy-Calabrese para sistemas finitos (2), obedecendo uma correção logarítmica que é proporcional a carga central do modelo. Além disso, observamos que cada ponto de Fermi da cadeia contribuí exatamente com 1/2 para o valor da carga central. Ademais, oscilações foram observadas nas entropias de Rényi para índices $n = 2, 3, 4 \in 6$ e os expoentes que governam o decaimento dessas oscilações seguem a conjectura de Xavier e Alcaraz (3), dados por $p_n = 2x_{\epsilon}/n$, com x_{ϵ} denotando a dimensão do operador energia do modelo.

Palavras-chave: Cadeias quânticas de spins. Invariância conforme. Entropias de emaranhamento. Não hermiticidade.

ABSTRACT

RAMOS, L. M. Critical behavior and quantum information in quantum spin chains described by free fermions or parafermions. 2023. 102p. Dissertation (Master in Science) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2023.

Two new families of quantum spin chains with p multispin interactions were recently introduced in (1). One has Z(N) symmetry and describes free fermions (N = 2) and parafermions (N > 2) in the lattice. The other family is an extension of XY model with N multispin interactions, with U(1) symmetry and being solved by Jordan-Wigner transformation. Both families are non-Hermitian for N > 2 and with open boundary conditions, they share quasi-energies that are obtained from the roots of a given characteristic polynomial. In the present work, we show a general study of the conformal invariance properties and quantum information in a particular case of this new family of XY models that has three spins interactions (p = 2). Although this model is non-Hermitian, the entanglement entropy (as von Neumann and Rényi entropy) are studied by exploring the translation invariance and using the correlation matrix technique. The study of spectral properties of the model revealed that it has two distinct critical phases (with central charge c = 1and c = 2, respectively) that depend on a given anisotropy parameter. With respect to entanglement entropy, our results follow the Cardy-Calabrese's conjecture for finite systems (2), obeying a logarithmic correction that is proportional to the central charge of the model. Furthermore, we observe that each Fermi point in the quantum chain contributes exactly 1/2 to the value of the central charge. In addition, oscillations were observed in the Rényi entropies for indices n = 2, 3, 4 and 6. The exponents governing the decay of these oscillations follow the conjecture of Xavier and Alcaraz (3), given by $p_n = 2x_{\epsilon}/n$ with x_{ϵ} being the anomalous dimension of the energy operator of the model.

Keywords: Quantum spin chains. Conformal invariance. Entanglement entropy. Non-hermiticity.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Exemplos de sistemas bipartidos em uma dimensão. À esquerda temos uma cadeia quântica com OBC e dividida pela metade. No centro temos um anel bipartido também dividido pela metade. À direita o segmento de uma cadeia infinita	34
Figura 2 –	Representação no plano complexo das autoenergias em (3.14) para o modelo de paraférmions livres $Z(3)$. Os círculos têm raio ϵ_i . Observe que cada círculo pode ser ocupado por uma e apenas uma quase energia ϵ_i . Isso significa que as quase partículas ϵ_i obedecem a um princípio de exclusão generalizado, que no caso $N = 2$ é similar ao princípio de exclusão de Pauli	42
Figura 3 –	Algumas cadeias quânticas geradas a partir da Hamiltoniana (3.19) nos casos $N = 2$ $(p = 1)$, $N = 3$ $(p = 2)$ e $N = 4$ $(p=3)$ com OBC	44
Figura 4 –	Possíveis contribuições da quasi-energia ϵ_1 para a cadeia de parafér- mions livres $Z(3)$ e para o modelo XY equivalente com interações N -multispins. A quasi-energia ϵ_1 é obtida a partir da maior raiz do polinômio característico em (3.62)	49
Figura 5 –	Espectro real da relação de dispersão obtida para o modelo XY com N=3, p=2 e PBC, considerando diferentes valores de acoplamento $\bar{\lambda}$. As quasi-energias que compõe o EF são aquelas com valores de k dados em (4.24). Em $\bar{\lambda} = 1$ os dois pontos de Fermi estão localizados em $k_F = \pm \pi/3$	56
Figura 6 –	Parte real da magnetização do EF como função do acoplamento $\bar{\lambda}$ para o modelo XY com N=3, p=2 e PBC. No <i>inset</i> é exibido a derivada da magnetização \bar{m}^z em relação à anisotropia $\bar{\lambda}$	58
Figura 7 –	Possíveis ramos de excitações no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC e $\bar{\lambda} = 1$. Os círculos preenchidos representam partículas enquanto os círculos vazios representam os buracos. Os ramos 1 e 2 decaem com $(1/L)$ e os ramos 3 e 4 decaem com $(1/L^2)$.	60
Figura 8 –	Primeira excitação do ramo relativístico 2 e possíveis excitações nos ramos clássicos 3 e 4. Observa-se que a primeira excitação no ramo relativístico 2 é precedida de várias excitações nos ramos 3 e 4	61
Figura 9 –	Dependência da energia específica do EF, $E_0/L,$ em função de $1/L^2$ para $\bar{\lambda}=1.$ A linha contínua representa o ajuste aos dados obtidos	62

Figura 10 – Dependência da lacuna de massa $E_P - E_0$ em função do tamanho da cadeia no setor de mesma magnetização do EF do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC e acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. No *inset* da figura é exibido o comportamento da velocidade do som $v_s(L)$ a medida que o tamanho da cadeia aumenta.

63

- Figura 14 Menores excitações no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e $\bar{\lambda} = 1$. Foram considerados os setores Q = 0, 1 e 2. As excitações com $j \neq 0$ estão associadas com as dimensões anômalas dos operadores descendentes da torre conforme correspondente. Os casos (a) e (c) demandam o conhecimento da maior raiz do polinômio característico. Os casos (b), (d) e (e) demandam as duas maiores raízes e, por fim, o caso (f) demanda o conhecimento da maior e terceira maior raiz do polinômio. Essas raízes estão associadas, respectivamente, com as quasi-energias $\epsilon_1, \epsilon_2 \in \epsilon_3$. . . 74

 $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$. No *inset* da figura é exibido os autovalores da matriz de correlação. 81

Figura 18 –	Entropias de Rényi para n=2,3,4 e 6 em função do tamanho do sub-	
	sistema ℓ para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$. Note que consideramos uma cadeia de	
	tamanho $L = 600$ sítios e acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. As linhas contínuas são	
	as previsões da CFT dada pela Eq. (2.48). \ldots	82
Figura 19 –	Diferença $D_n(L,\ell)$ para $n=2,3,4$ e 6. A cadeia possu i $L=600$ sítios	
	e o tamanho do subsistema varia de $1 \leq \ell \leq L/2.$	83
Figura 20 –	Entropias de Rényi para $n = 2, 3, 4$ e 6 em função do tamanho do	
	subsistema ℓ para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$. Note que consideramos uma cadeia	
	de tamanho $L = 600$ sítios e acoplamento $\bar{\lambda} = 2$. As linhas contínuas	
	são as previsões da CFT dada pela Eq. (2.48)	84
Figura 21 –	Entropia de von Neumann para o EF do modelo $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}$ com PBC e	
	acoplamento $\overline{\lambda} = 1$. O tamanho do subsistema varia como $1 \le \ell \le L/2$.	
	A linha sólida (preta) representa a previsão da CFT utilizando (2.48) .	
	No $inset$ da figura é exibido a relação de dispersão do modelo com seis	
	modos de gap nulo	86

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 $$ –	Parte real da menor dimensão anômala $x_{\epsilon}(L)$ do operador energia em	
	função do tamanho da cadei a L para o modelo $\mathcal{H}^{XY}_{3,2}$ com PBC e no	
	regime de acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. O valor exato é dado por $x_{\epsilon} = 1$	67
Tabela 2 –	Parte real da menor dimensão anômala $x_1(L)$ no setor $Q = 1$ $(j = j' =$	
	0) em função do tamanho da cadei a L para o modelo $\mathcal{H}^{XY}_{3,2}$ com PBC	
	e no regime de acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. O valor exato é dado por $x_1 = 1/4$.	67
Tabela 3 $\ -$	Parte real da menor dimensão anômala $x_2(L)$ no setor $Q = 2$ $(j = j' = j')$	
	0) em função do tamanho da cadei a L para o modelo $\mathcal{H}^{XY}_{3,2}$ com PBC	
	e no regime de acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. O valor exato é dado por $x_2 = 1$.	67
Tabela 4 $\ -$	Exemplos de polinômios para o caso N=3 com acoplamentos constantes	
	$\{\bar{\lambda}=1\}$	69
Tabela 5 $\ -$	Quasi-energias de partícula única para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY} \in \omega = \exp(i2\pi/3).$	
	Essas quasi-energias fermiônicas estão relacionadas com aquelas do mo-	
	de lo de paraférmions livres $Z(3)$ de Baxter com 3 interações multispin.	69
Tabela 6 $\ -$	Razão $R(L)$ em função do tamanho da cadei a L para o modelo $\mathcal{H}^{XY}_{3,2}$	
	no setor $Q = 0$ e regime de acoplamento $\overline{\lambda} = 1$	75
Tabela 7 $\ -$	Valores numéricos obtidos para as menores dimensões anômalas super-	
	ficiais $x_s^{(1)}(L)$ e $x_s^{(2)}(L)$ do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e regime de acopla-	
	mento $\overline{\lambda} = 1$	76
Tabela 8 $\ -$	Estimativa numérica para a dimensão superficial $x_{s,1}^{(0)}(L)$ do primeiro	
	operador descendente no setor $Q = 0$ do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e	
	$\bar{\lambda} = 1$. O valor exato, obtido para $L \to \infty$, é dado por $x_{s,1}^{(0)} = 3$	76
Tabela 9 $\ -$	Valores estimados para a carga central c e para a constante universal	
	a_n no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC	82
Tabela 10 –	Os expoentes universais p_n e constantes não universais g_n obtidas atra-	
	vés do fit da Eq. (5.12) para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com $L = 600$ e acoplamento	
	$\bar{\lambda}=1.$ Os valores em parêntes es são resultados exatos	83
Tabela 11 –	Valores estimados para a carga central c e para a constante universal	
	a_n no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com acoplamento $\bar{\lambda} = 2. \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	85

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- CFT Teoria de Campos Conformes
- EE Entropia de Emaranhamento
- EF Estado Fundamental
- OBC Condições de Contorno Abertas
- PBC Condições de Contorno Periódicas
- QFT Teoria Quântica de Campos
- RDM Matriz de Densidade Reduzida

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	23
1.1	Objetivos e esboço da dissertação	25
2	TEORIAS DE CAMPOS CONFORMES E ENTROPIAS DE EMA-	
	RANHAMENTO	27
2.1	O grupo conforme em duas dimensões	27
2.2	As álgebras de Witt e Virasoro	29
2.3	Campos primários e quasi-primários	30
2.4	Representação unitária da álgebra de Virasoro	31
2.5	Efeitos de tamanho finito	32
2.6	Entropias de emaranhamento	33
2.6.1	Entropia de emaranhamento em mecânica quântica	33
2.6.2	Emaranhamento em CFT	35
3	CADEIAS QUÂNTICAS DE SPINS GENERALIZADAS	39
3.1	Modelos com simetria Z(N)	40
3.2	Modelos com simetria U(1) \ldots	43
3.3	Correspondência entre o modelo XY generalizado e o modelo de	
	paraférmions livres Z(N) com interações (p+1)-multispins	46
4	SOLUÇÃO DO MODELO XY COM N=3 E P=2	51
4.1	Transformação canônica e criticalidade	51
4.2	Solução exata do modelo XY com N=3, p=2 e PBC	53
4.2.1	Energia do EF no ponto isotrópico $ar{\lambda}=1$	58
4.2.2	Estados excitados no regime $ar{\lambda}=1$	63
4.3	Solução exata do modelo XY com N=3, p=2 e OBC	67
4.3.1	<i>Gaps</i> de energia e o expoente crítico dinâmico	70
4.3.2	Predições oriundas da invariância conforme	72
5	ENTROPIAS DE EMARANHAMENTO	77
5.1	Entropias de emaranhamento via matriz de correlação para cadeias	
	não hermitianas	77
5.2	Entropias de emaranhamento no modelo XY com N=3, p=2 e PBC	79
5.3	Extensões: O Modelo XY com N=4 e p=3	85
6	CONCLUSÃO	87

REFERÊNCI	AS	89
APÊNDICES		97
APÊNDICE	A – SOLUÇÃO DO MODELO XY COM N=3 E P=2 UTILIZANDO O OPERADOR DE TRANSLAÇÃO	99
APÊNDICE	B – TÉCNICA DA MATRIZ DE CORRELAÇÃO PARA CÁLCULOS DE EMARANHAMENTO	101

1 INTRODUÇÃO

Modelos exatamente solúveis se estabeleceram como importantes laboratórios para testar nossas hipóteses físicas e matemáticas em vista do entendimento da física de muitos corpos interagentes. Apesar de um número restrito de sistemas quânticos de muitos corpos serem passíveis de soluções exatas (4), acredita-se que todos os modelos não integráveis críticos possuem sua física a longas distanciais bem descritas por um modelo integrável equivalente.

Historicamente, técnicas poderosas foram desenvolvidas e nos fornecem importantes *insights* na interpretação de um sistema de muitos corpos. As mais famosas talvez sejam o *ansatz* de Bethe (5) e a Transformação de Jordan-Wigner (6), corriqueiramente empregadas na solução exata de diferentes cadeias quânticas de spin. Muitos modelos integráveis, na rede, exibem uma lacuna de massa zero, resultando em uma divergência no comprimento de correlação.(7) Quando isto ocorre, o modelo é classificado como crítico e admite uma descrição em termos de teorias formuladas em um espaço-tempo contínuo, i.e., uma teoria quântica de campos (QFT). Quando a invariância conforme está presente tais teorias são chamadas de teorias de campos conformes (CFT.) De uma forma geral, sabe-se que modelos com interações de curto alcance e invariâncias de escala, rotação e translação possuem uma física de baixas energias governada por uma CFT. (8)

A invariância conforme é conhecida há quase um século devido a sua estreita conexão com a invariância de escala. Como exemplo, as Equações de Maxwell no vácuo são invariantes de escala como também são invariantes conformes. (9) A primeira observação da invariância conforme em fenômenos críticos foi realizada apenas em 1970 por Polyakov (10) para um número arbitrário de dimensões espaciais. O caso bidimensional, estudado por Belavin, Polyakov e Zamolodchikov em 1984 (11), mostrou-se um caso especial. De fato, em duas dimensões, o grupo conforme é de dimensão infinita e, portanto, fortes restrições nas funções de correlação podem ser impostas. Para esses sistemas bidimensionais, a invariância conforme estendeu consideravelmente nossa compreensão acerca dos fenômenos críticos, fornecendo valores exatos para diferentes expoentes que governam o decaimento das funções de correlação presentes no modelo. A invariância conforme também tornou-se importante em diferentes contextos da física como, por exemplo, no âmbito da teoria de cordas (12), na teoria da gravitação quântica (13–14) e, mais recentemente, na teoria da informação quântica. (15–17)

Uma das principais contribuições da invariância conforme para sistemas críticos é a possibilidade de catalogar-se as diferentes classes de universalidades. Isso é feito indexando ao modelo uma anomalia conforme (ou carga central), que nos diz qual a correspondente CFT responsável por governar toda a dinâmica do sistema no limite do contínuo. Por isso, identificar a carga central em um dado sistema crítico é de substancial importância e diferentes técnicas podem sem empregadas para tal. Uma técnica muito utilizada é a de *finite-size scaling* (transformação de escala em sistemas finitos), que extrai o comportamento de diferentes quantidades físicas no ponto crítico de um modelo com geometria finita. (18)

Em 2009, utilizando esta técnica, Calabrese e Cardy (19) mostraram que entropias de emaranhamento (EE) em sistemas finitos podem ser obtidas diretamente da CFT adjacente, fornecendo assinaturas importantes do ponto crítico, como a carga central do modelo. Essa conexão entre a invariância conforme e o emaranhamento quântico em sistemas críticos tem motivado cada vez mais o campo científico sobre as possibilidades de caracterização de fenômenos críticos via conceitos de informação quântica. As medidas mais usadas para quantificar o emaranhamento quântico em sistemas físicos são as entropias de Rényi e von Neumann. As mesmas foram empregadas com sucesso no estudo da criticalidade do modelo XY (20–21), do modelo XXZ (3, 22–23), do modelo de paraférmions Z(N) (24) e em vários outros casos (25–27). Avanços recentes tem sido realizados na direção de entender as propriedades de emaranhamento de estados excitados (28– 29), cadeias quânticas de spins não hermitianas (30–32) e na correspondência AdS/CFT. (33–35)

Nos últimos anos, sistemas quânticos não hermitianos tem recebido um aumento significativo de atenção da comunidade científica. Esse aumento é impulsionado por avanços teóricos e experimentais realizados neste campo. Experimentalmente, sistemas não hermitianos já foram implementados em cristais fotônicos, sistemas biológicos, redes óticas, quase cristais, etc. (36–41) No âmbito teórico, propriedades únicas ausentes em sistemas hermitianos tem sido evidenciadas, incluindo transições de fases topológicas generalizadas (42–43) e novas classes de universalidade, algumas até mesmo indexadas por valores negativos da carga central. (32,44) Devido à importância central da EE na física de muitos corpos, seu estudo em sistemas não hermitianos possui também uma relevância significativa. Além disso, ainda não está muito claro como a não hermiticidade influência nas transições de fase quânticas. (45) Essas questões nos motivaram a estudar a EE em cadeias de férmions livres^{*} não hermitianas.

Recentemente, duas novas famílias de cadeias quânticas não hermitianas foram propostas na literatura por Alcaraz e Pimenta. (1, 46-47) Uma diz respeito aos modelos Z(N) de Baxter, descritos por férmions (N = 2) e paraférmions livres (N > 2). O caso N = 2 resgata o modelo de Ising quântico (hermitiano) enquanto para N > 2 os modelos

^{*} Entre os modelos integráveis, desempenharam um papel importante no entendimento da física e da matemática aqueles correspondentes a sistemas não interagentes. Em particular, os modelos de férmions livres (sem interação) são protótipos importantes, pois permitem resultados analíticos mesmo em casos onde o modelo esteja formulado em sua geometria finita.

são não hermitianos. Essas cadeias são extensões do modelo de Ising, onde as matrizes de Pauli 2×2 dão lugar as matrizes de Pauli generalizadas $N \times N$ que satisfazem à álgebra com simetria Z(N). Os autores mostram em (46) que, inserindo interações (p+1)multispin[†] na cadeia Z(N), os modelos permanecem integráveis, com suas quasi-energias sendo obtidas a partir das raízes de um polinômio característico. A segunda família de modelos proposta em (1) está associada com uma generalização da cadeia XY, obtida inserindo-se interações N-multispins. Para N = 2 é possível recuperar o modelo XY usual (48) (hermitiano) enquanto para N > 2 os modelos tornam-se não hermitianos. Diferentemente dos modelos Z(N), o modelo XY com interações N-multispins possui uma simetria $U(1)^{\ddagger}$ e permanece solúvel por transformação de Jordan-Wigner, sendo descrito por férmions livres para todo N. Apesar destas diferentes simetrias, foi possível verificar que os modelos XY com interações N-multispins possuem uma correspondência exata com os modelos Z(N) com interações (p+1)-multispins. Os mesmos possuem espectros dados pelas raízes de um polinômio característico comum. Isso significa que todo o espectro dos modelos Z(N) com interações N-multispins está contido no espectro dos modelos XY também com interações N-multispins, compartilhando assim as mesmas quasi-energias.

Algumas propriedades críticas dessas famílias de modelos foram investigadas em. (1, 47) Em particular, o expoente crítico dinâmico dos modelos Z(N) com interações (p + 1)-multispins em seu ponto multicrítico é dado por z = (p + 1)/N, que deve, pela correspondência acima mencionada, ser idêntico ao valor do expoente crítico dinâmico do modelo XY com interações N-multispins. Para os casos onde N = p + 1 os modelos possuem z = 1, expoente este típico de modelos invariantes conformes. De fato, mostraremos que essas famílias de modelos com interações multispin exibem um rico diagrama de fase, indicando que tais modelos são invariantes conformes. As duas famílias de modelos mostrar-se-ão como excelentes laboratórios para testar tanto o comportamento universal crítico como as medidas de informação quântica em sistemas não hermitianos.

1.1 Objetivos e esboço da dissertação

Em resumo, o objetivo geral do nosso trabalho é compreender o comportamento crítico e as propriedades de informação quântica que surgem nos modelos Z(N) e XY com interações N-multispins. Tais estudos serão feitos abordando-se as cadeias com condições de contorno abertas (OBC) e periódicas (PBC). Nossos estudos indicam que os modelos estudados, apesar de não hermitianos, possuem propriedades espectrais e de emaranhamento típicas daqueles governados por CFTs. Assim, calcularemos as dimensões anômalas críticas e as entropias de Rényi e von Neumann destes modelos. As entropias de Rényi e

^{\dagger} Denotaremos as interações de multispins envolvendo x spins como interações x-multispins.

^{\ddagger} A componente z da magnetização é um bom número quântico.

von Neumann serão utilizadas para inferirmos independentemente a anomalia conforme do modelo, sem a necessidade do conhecimento das excitações espectrais ou mesmo da velocidade do som.

Essa dissertação foi organizada da seguinte forma: no capítulo 2 introduzimos o grupo conforme em duas dimensões, onde previsões da CFT para as energias e EE em cadeias críticas são discutidas. No capítulo 3 discutimos as duas famílias de modelos com interações de multispins a serem estudadas: os modelos com simetria Z(N) e os modelos XY generalizados. No capítulo 4, utilizando a transformação de Jordan-Wigner, apresentamos a solução exata da cadeia XY com N = 3 e sob condições periódicas (PBC) e fechadas (OBC) de contorno. Apresentamos ainda neste capítulo alguns resultados referentes às propriedades conformes do modelo. Em seguida, no capítulo 5, calculamos a matriz de correlação para obtenção das entropias de emaranhamento de Rényi e von Neumann para um bloco de spins contíguos na rede. Tais resultados nos dão o comportamento universal dessas entropias em cadeias finitas. Ao final deste capítulo é apresentado uma extensão desses cálculos para o modelo XY com N = 4. Finalmente, no capítulo 6, apresentamos a conclusão dos nossos estudos e possíveis extensões dos mesmos.

2 TEORIAS DE CAMPOS CONFORMES E ENTROPIAS DE EMARANHA-MENTO

Neste capítulo, apresentaremos uma breve introdução acerca da CFT em duas dimensões e suas previsões para a física a longas distâncias em cadeias de spins críticas e de tamanho finito. Uma revisão com relação a álgebra do grupo conforme bidimensional é exposta seguindo o desenvolvimento realizado por di Francesco *et al.* (49) e Christie e Henkel. (8) Também mencionamos que a condição de unitariedade da CFT, como usualmente esperado em mecânica estatística e teorias de muitos corpos, produz restrições aos possíveis modelos críticos bidimensionais. No âmbito da informação quântica, comentaremos sobre a relação das EE com a matriz de densidade reduzida (RDM) e discutiremos os principais resultados da CFT para o comportamento do emaranhamento em sistemas finitos.

2.1 O grupo conforme em duas dimensões

O comportamento de muitas quantidades físicas próximas do ponto crítico é descrito por leis de potências que são invariantes frente à transformação de escala. A hipótese do grupo de renormalização fornece uma representação natural dessa invariância e nos permite calcular os expoentes críticos que governam essas leis. (50) Uma transformação de escala é matematicamente representada como uma dilatação, i.e., uma transformação de coordenadas do tipo $\mathbf{x} \to \mathbf{x}' = b^{-1}\mathbf{x}$.

Propriedades físicas interessantes surgem quando o parâmetro b acima mencionado possui uma dependência local em \mathbf{x} , i.e., $\mathbf{x} \to \mathbf{x}' = b(\mathbf{x})^{-1}\mathbf{x}$. Na realidade, essa é uma extensão direta da invariância de escala para a invariância conforme (os ângulos da métrica são localmente invariantes). Embora a invariância conforme não seja geral para os modelos críticos em duas dimensões, a grande maioria dos modelos o são. Em duas dimensões, pelo fato das transformações conformes serem isomorfas às transformações analíticas, a invariância conforme determina os expoentes críticos de vários modelos, fornecendo uma maneira de catalogar as possíveis classes de universalidade de modelos críticos descritos por CFTs.

Para explorar a invariância conforme em modelos críticos, iniciamos considerando um espaço bidimensional com uma métrica plana $g_{\mu\nu}$. Uma transformação conforme de coordenadas é um mapa invertível $\mathbf{x} \to \mathbf{x}'$, na qual a métrica permanece invariante frente a uma mudança de escala

$$g'_{\mu\nu}(\mathbf{x}) = \Lambda(\mathbf{x})g_{\mu\nu}(\mathbf{x}). \tag{2.1}$$

Para uma transformação de coordenada $x \rightarrow x'$, a correspondente transformação da

métrica pode ser escrita como

$$g_{\mu\nu}(x) \to g'_{\mu\nu}(x') = \frac{\partial x'^{\alpha}}{\partial x^{\mu}} \frac{\partial x'^{\beta}}{\partial x^{\nu}} g_{\alpha\beta}(x),$$
 (2.2)

de tal forma que a condição para a transformação conforme é

$$\frac{\partial x^{\prime \alpha}}{\partial x^{\mu}} \frac{\partial x^{\prime \beta}}{\partial x^{\nu}} g_{\alpha\beta}(x) = \Lambda(x) g_{\mu\nu}(x).$$
(2.3)

Se considerarmos uma transformação infinitesimal, i.e., $x^{\mu} \to x'^{\mu} = x^{\mu} + \epsilon^{\mu}$, a mudança na métrica (2.3), para primeira ordem em ϵ , é dada por

$$g_{\mu\nu}(x) \to g_{\mu\nu}(x) - (\partial_{\mu}\epsilon_{\nu} + \partial_{\nu}\epsilon_{\mu}),$$
 (2.4)

onde introduzimos a notação $\partial/\partial x^{\mu} = \partial_{\mu}$. Tendo em mente que a transformação deve ser conforme, é possível escrever

$$\partial_{\mu}\epsilon_{\nu} + \partial_{\nu}\epsilon_{\mu} = f(x)g_{\mu\nu}, \qquad (2.5)$$

onde o fator de escala f(x) é obtido tomando-se o traço em ambos os lados e usando-se a convenção da soma:

$$f(x) = \frac{2}{d} \partial_{\rho} \epsilon^{\rho}.$$
 (2.6)

Em duas dimensões, d = 2, a Eq. (2.5) produz as equações de Cauchy-Riemann em uma métrica Euclidiana

$$\partial^1 \epsilon_1 = \partial^2 \epsilon_2, \quad \partial^1 \epsilon_2 = -\partial^2 \epsilon_1. \tag{2.7}$$

Há infinitas funções complexas que satisfazem às equações de Cauchy-Riemann no plano. Essas funções são chamadas funções holomórficas e preservam os ângulos locais. É interessante introduzir-se a coordenada complexa,

$$z = x^1 + ix^2, \quad \bar{z} = x^1 - ix^2,$$
 (2.8)

onde $\mathbf{x} = (x^1, x^2)$ são componentes cartesianas e \bar{z} é a parte anti-holomórfica de z. Qualquer função analítica f(z), tal que $f'(z) \neq 0$, defini uma transformação holomórfica e uma anti-holomórfica

$$z \to f(z), \ \bar{z} \to \bar{f}(\bar{z}),$$
 (2.9)

conformes em torno da origem, i.e., z = 0. Funções holomórficas e anti-holomórficas definem transformações conformes locais no sentido de que elas não são analíticas em todo o plano complexo, exceto para o caso trivial de uma constante. Em duas dimensões, a transformação conforme mais geral pode ser escrita na forma compacta

$$f(z) = \frac{az+b}{cz+d}, \quad (ad-bc=1, \ a,b,c,d \in \mathbb{C}),$$
(2.10)

englobando translações, rotações, dilatações e transformações conformes especiais. Como exemplo, translações são reproduzidas por a = 1, c = 0, d = 1 e b finito. Rotações possuem b = c = 0, d = 1 com a fase complexa $a = e^{i\theta} e \theta$ real. Similarmente, dilatações correspondem a b = c = 0, d = 1 com a um real positivo. Por fim, a transformação conforme especial é gerada inserindo a = d = 1, b = 0 com c finito.

29

2.2 As álgebras de Witt e Virasoro

O desacoplamento entre as coordenadas holomórficas e anti-holomórficas é uma característica da CFT em duas dimensões. Como veremos, esse desacoplamento produz infinitos geradores de uma álgebra de Lie conhecida como álgebra de Witt.

A fim de obter a álgebra de Witt, vamos considerar uma transformação conforme infinitesimal, isto é,

$$z \to z' = f(z) = z + \epsilon(z), \quad \bar{z} \to \bar{z}' = \bar{f}(\bar{z}) = \bar{z} + \bar{\epsilon}(\bar{z}), \tag{2.11}$$

onde $\epsilon(z)$ e $\bar{\epsilon}(\bar{z})$ são funções holomórficas e anti-holomórficas. Se considerarmos essas funções como infinitesimais, as mesmas podem ser expandidas como séries de Laurent em torno de z = 0

$$\epsilon(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \epsilon_n z^{n+1}, \quad \bar{\epsilon}(\bar{z}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \bar{\epsilon}_n \bar{z}^{n+1}.$$
(2.12)

É possível associar uma álgebra à tal transformação infinitesimal notando que

$$f(z+\epsilon(z)) - f(z) \sim f(z) + \epsilon(z)\partial_z f(z) - f(z) \equiv -\sum_{n=-\infty}^{\infty} \epsilon_n l_n f(z), \qquad (2.13)$$

onde os geradores do mapeamento conforme local são dados por:

$$l_n = -z^{n+1}\partial_z, \quad \bar{l}_n = -\bar{z}^{n+1}\partial_{\bar{z}}.$$
(2.14)

Estes geradores podem ser considerados uma base para a transformação infinitesimal (2.11). Eles formam uma álgebra de Lie de dimensão infinita chamada de álgebra de Witt,

$$[l_m, l_n] = (m-n)l_{m+n}, \quad [\bar{l}_m, \bar{l}_n] = (m-n)\bar{l}_{m+n}, \quad [l_m, \bar{l}_n] = 0.$$
(2.15)

Note que a infinitude da álgebra decorre do fato de que m e n vão de $-\infty$ até ∞ , sendo que o desacoplamento ocorre devido à última relação de comutação em (2.15). Além disso, a subálgebra gerada por $m, n = 0, \pm 1$ é fechada e representa um conjunto de geradores do mapeamento conforme global (2.10). De fato, é possível mostrar que l_{-1} e \bar{l}_{-1} geram translações, $l_0 \in \bar{l}_0$ geram a rotação e a dilatação e, finalmente, $l_1 \in \bar{l}_1$ geram a transformação conforme especial.

A álgebra de Witt admite uma extensão central chamada de álgebra de Virasoro. (49) Representando seus geradores por L_n , com $n \in \mathbb{Z}$, a álgebra de Virasoro possui as seguintes relações de comutação

$$[L_m, L_n] = (m-n)L_{m+n} + \frac{c}{12}(m^3 - m)\delta_{m+n,0},$$

$$[\bar{L}_m, \bar{L}_n] = (m-n)\bar{L}_{m+n} + \frac{\bar{c}}{12}(m^3 - m)\delta_{m+n,0},$$

$$[L_m, \bar{L}_n] = 0.$$
(2.16)

onde c é uma constante universal, chamada de carga central ou anomalia conforme, sendo importante para a classificação da CFT estudada, assim como para os modelos críticos descritos por tais CFTs^{*}. O termo proporcional à carga central surge devido ao processo de quantização radial e está associado às flutuações quânticas do vácuo. (51) Se considerarmos $n = 0, \pm 1$ em (2.16), os termos envolvendo c e \bar{c} desaparecem e a álgebra de Virasoro se reduz à álgebra de Witt, que independe da carga central.

2.3 Campos primários e quasi-primários

O fato de que a álgebra de Virasoro é de dimensão infinita nos produz em duas dimensões consequências interessantes. Uma delas é que aos campos da teoria invariante conforme são impostas um número infinito de restrições chamadas identidades de Ward. (51) Essas identidades são escritas como equações diferenciais para funções de correlação e, portanto, são importantes para caracterizar o comportamento da teoria conforme.

Frente a um mapeamento conforme $z \to f(z), \ \bar{z} \to \bar{f}(\bar{z})$, os campos locais se transformam como (51)

$$\phi_j(z,\bar{z}) \to \phi'_j(f,\bar{f}) = (\partial_z f)^{-h_j} (\partial_{\bar{z}}\bar{f})^{-\bar{h}_j} \phi_j(z,\bar{z}), \qquad (2.17)$$

sendo chamados de operadores ou campos quasi-primários. Os números reais h_j , \bar{h}_j são denominados de pesos conformes (ou dimensões conformes) do operador ϕ_j . As funções de correlação de operadores quasi-primários, portanto, satisfazem

$$\langle \phi_1(z_1, \bar{z}_1) \phi_2(z_2, \bar{z}_2) ... \rangle = \left(\prod_i (\partial_{z_i} f_i)^{h_i} (\partial_{\bar{z}_i} \bar{f}_i)^{\bar{h}_i} \right) \langle \phi_1'(f_1, \bar{f}_1) \phi_2'(f_2, \bar{f}_2) ... \rangle,$$
(2.18)

onde o valor esperado é definido por

$$\langle (...) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}_{\phi}(...)e^{-S}}{\int \mathcal{D}_{\phi}e^{-S}},$$
(2.19)

com S sendo a ação ou a Hamiltoniana efetiva da teoria. Se considerarmos uma simples transformação de escala, i.e., $f(z) = a^{-1}z$ e $\bar{f}(\bar{z}) = a^{-1}\bar{z}$, então a mudança nos campos é dada por

$$\phi'_{j}(f,\bar{f}) = a^{h_{j}+\bar{h}_{j}}\phi_{j}(z,\bar{z}), \qquad (2.20)$$

enquanto uma rotação $z \to e^{i\theta}z$
e $\bar{z} \to e^{i\theta}\bar{z}$ leva a

$$\phi'_{j}(f,\bar{f}) = e^{-i(h_{j}-\bar{h}_{j})\theta}\phi_{j}(z,\bar{z}).$$
(2.21)

A partir de (2.20) e (2.21) podemos identificar, respectivamente, a soma e a diferença dos pesos conformes com a dimensão de escala x_j e o spin s_j do campo ϕ_j ,

$$x_j \equiv h_j + \bar{h}_j, \quad s_j \equiv h_j - \bar{h}_j. \tag{2.22}$$

^{*} Qualquer teoria de campo é caracterizada por $c \in \bar{c}$, que não são necessariamente iguais. Os modelos em mecânica estatística mais estudados são descritos por CFTs onde $c = \bar{c}$.

Se um dado operador ϕ_j satisfaz (2.17) frente aos mapeamentos locais e globais, então ele é chamado de *operador primário*. Operadores primários são importantes: eles caracterizam a estrutura do espaço de Hilbert associado aos geradores da álgebra de Virasoro[†].

2.4 Representação unitária da álgebra de Virasoro

A teoria de representação da álgebra de Virasoro tem um papel importante na física e matemática. Como exemplo, nós podemos citar a teoria das algebras de Lie afins (52), na teoria de cordas (53) e na mecânica estatística. (54) A condição de unitariedade da álgebra de Virasoro implica em fortes restrições, principalmente com relação à carga central e aos pesos conformes. Na seção (2.2) vimos que a álgebra de Virasoro é definida pela relação de comutação

$$[L_m, L_n] = (m-n)L_{m+n} + \frac{c}{12}m(m^2 - 1)\delta_{m, -n}, \quad m, n \in \mathbb{Z},$$
(2.23)

onde c é a carga central. O valor de c é em princípio arbitrário em qualquer representação irredutível[‡]. Uma teoria de representação unitária possui geradores que devem satisfazer à condição de hermiticidade (49)

$$L_n^{\dagger} = L_{-n} \tag{2.24}$$

e, em especial,

$$L_n |h_j\rangle = 0, \quad n > 0,$$

$$L_0 |h_j\rangle = h_j |h_j\rangle, \qquad (2.25)$$

onde $|h_j\rangle$ é um estado vetorial correspondente a um campo primário $\phi_j(z)$ com peso conforme h_j . É simples ver também que L_{-n} aumenta a energia em n unidades enquanto L_n abaixa em n unidades. Uma representação irredutível é especificada por um par de números (c, h). É possível mostrar que, neste caso, a unitariedade requer que (56)

$$c \ge 0 \quad \text{e} \quad h \ge 0. \tag{2.26}$$

Representações unitárias também existem para todos os valores de (c, h) com $c \ge 1$ e $h \ge 0$. Todavia, Friedan, Qiu e Shenker (56) mostraram que os valores de (c, h) com $0 \le c < 1$ são quantizados e dados por

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)}, \quad m = 2, 3, 4, ...,$$
 (2.27)

е

$$h = h_{p,q} = \frac{[(m+1)p - mq]^2 - 1}{4m(m+1)}, \quad (1 \le p \le m-1, \ 1 \le q \le p).$$
(2.28)

[†] Este, no que lhe concerne, possui uma correspondência exata com o espectro de uma cadeia quântica de spin na criticalidade.

[‡] Uma representação é *redutível* se ela admite outras representações de dimensões menores e *irredutível* caso contrário. (55)

Teorias de campos conformes com os valores de $c \in h$ dados por (2.27) e (2.28) descrevem os chamados *modelos mínimos*. O primeiro modelo mínimo que surge dessa sequência é o modelo com m = 3 (c = 1/2), que descreve a criticalidade do modelo de Ising. Conforme a Eq. (2.28), os campos primários desse modelo são dados pelos pesos conformes (h_j, \bar{h}_j)

$$h_{1,1} = \bar{h}_{1,1} = 0, \quad h_{1,2} = \bar{h}_{1,2} = \frac{1}{16}, \quad h_{2,1} = \bar{h}_{2,1} = \frac{1}{2}.$$
 (2.29)

Outros casos interessantes são os casos m = 4 (c = 7/10), sendo que uma possível realização está associada ao modelo de Ising tricrítico. Um exemplo do caso m = 5 (c = 4/5) se dá na criticalidade do modelo de Potts de três estados e no caso m = 6 (c = 6/7) um exemplo se dá no modelo de Potts de três estados tricrítico[§].

A teoria de representação para as algebras conformes com c = 1 é de substancial importância. Ela descreve classes de universalidade das teorias de campo bosônicas e as dos líquidos de Luttinger. (57) Neste caso, temos que a álgebra de Virasoro possui infinitos pesos conformes que podem ser escritos como

$$h_{Q,\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{Q}{R} + \frac{\beta R}{2} \right)^2, \ \ \bar{h}_{Q,\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{Q}{R} - \frac{\beta R}{2} \right)^2,$$
 (2.30)

sendo R é o raio de compactificação e Q e β números inteiros. Alcaraz *et.al.* mostraram que essa classe de universalidade é muita rica e exibe uma equivalência exata no espectro de diferentes cadeias quânticas. (58)

2.5 Efeitos de tamanho finito

A invariância conforme nos fornece um método robusto para calcular a anomalia conforme e as dimensões anômalas de um dado modelo crítico. Essas quantidades estão relacionadas com às correções de tamanho finito do espectro da matriz de transferência associada a um dado sistema crítico. Se escrevermos a matriz de transferência como $T = e^{-a\mathcal{H}}$ onde \mathcal{H} é uma Hamiltoniana quântica de L sítios e a é o espaçamento de rede, é possível mostrar que o espectro da teoria contínua definida em uma faixa de comprimento L e PBC está relacionado ao espectro de uma cadeia de L sítios que é a discretização de \mathcal{H} . A energia do estado fundamental (EF), $E_0(L)$, de H(L) comporta-se, para L grande, como (59–60)¶

$$\frac{E_0(L)}{L} = e_\infty - \frac{\pi c v_s}{6L^2} + o(L^{-2}), \qquad (2.31)$$

onde e_{∞} é a energia específica (energia por sítio) no limite $L \to \infty$, v_s é a velocidade do som (também referida como velocidade de Fermi no caso de modelos que possuam energia de Fermi) e c a carga central. As quantidades e_{∞} e v_s dependem do modelo, portanto, são

[§] Para detalhes referentes às dimensões conformes desses modelos sugerimos a referência (56).

[¶] A notação $o(L^{-2})$ indica um termo de ordem superior à L^{-2} , enquanto $O(L^{-2})$ indicaria que o termo é da ordem L^{-2} .

não universais. Uma expressão semelhante pode ser obtida para caso onde o contorno é aberto,

$$\frac{E_0(L)}{L} = e_\infty + \frac{f_\infty}{L} - \frac{\pi c v_s}{24L^2} + o(L^{-2}), \qquad (2.32)$$

onde o termo f_{∞} é comumente chamado de energia livre superficial do modelo (59). Espera-se que e_{∞} independa da condição de contorno do modelo^{||}.

Além do EF, a estrutura dos estados excitados é determinada pelas dimensões dos operadores primários da CFT associada. Para cada operador primário ϕ_{α} com dimensão anômala x_{α} e spin s_{α} existe uma torre de estados no espectro de H(L) com PBC. Esses estados possuem energias $E_{j,j'}^{\alpha}$ e momento $P_{j,j'}^{\alpha}$ dados por (62)

$$E_{j,j'}^{\alpha} = E_0(L) + 2\pi v_s(x_{\alpha} + j + j')L^{-1} + O(L^{-2})$$
(2.33)

е

$$P_{j,j'}^{\alpha} = 2\pi (s_{\alpha} + j - j')L^{-1}, \qquad (2.34)$$

onde j, j' = 0, 1, 2, ... A degenerescência $d_{j,j'}^{\alpha}$ de uma dada torre conforme também pode ser obtida. Ela é basicamente dada pelo número de partições inteiras de j e j'. Se denotarmos essas partições por, respectivamente, $p(j) \in p(j')$, elas serão determinadas a partir da função geradora (análoga para a partição p(j'))

$$\prod_{\nu} (z) = \prod_{j=1}^{\infty} \frac{1}{1-z^j} = \sum_{j=0}^{\infty} p(j)z^j = 1 + z + 2z^2 + 3z^3 + 5z^4 + 7z^5 + \dots$$
(2.35)

2.6 Entropias de emaranhamento

O estudo do emaranhamento quântico permeia a física há quase um século. Neste período, avanços científicos foram realizados e que possibilitarão o surgimento de novas tecnologias onde o emaranhamento quântico tem um papel essencial. Como exemplo, mencionamos a construção de um computador quântico escalável que parece factível a médio prazo. O reconhecimento deste avanço se constata no Prêmio Nobel de Física de 2022 concedido aos pesquisadores Alain Aspect, John F. Clauser e Anton Zeilinger. Nesta seção, introduziremos o conceito de emaranhamento quântico no contexto de sistemas quânticos bipartidos. Discutiremos também as previsões da CFT para as EE bem como o comportamento das mesmas em sistemas com geometrias finitas.

2.6.1 Entropia de emaranhamento em mecânica quântica

Ainda que em 1932 von Neumann tenha contribuído significativamente para uma descrição completa do mundo quântico não relativístico (63), foram Einstein, Podolsky

Isso já foi verificado para vários modelos, inclusive para os modelos estudados nesta dissertação. Há, contudo, exceções para modelos em que as condições de contorno introduzem efeitos topológicos relevantes. (61)

e Rosen (EPR) e Schrödinger que primeiro reconheceram as estranhezas da mecânica quântica. (64–65) Sobre a luz de uma ação fantasmagórica a distância^{**}, o termo *ema-ranhamento* foi originalmente empregado por Schrödinger para descrever a existência de estados globais de um sistema composto, que não podiam ser escritos como um produto de estados de subsistemas individuais. O emaranhamento foi usado por EPR em sua tentativa de atribuir valores às quantidades físicas antes de uma dada medição. Foi John Bell quem mostrou o oposto: é justamente o emaranhamento que exclui essa possibilidade. (66)

Uma questão fundamental no estudo dos sistemas quânticos é a quantificação do emaranhamento. Um caso em que essa questão possui uma resposta simples é o caso de estados bipartidos puros

$$\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi| \,. \tag{2.36}$$

Neste caso, temos que o estado global $|\Psi\rangle$ é dividido em duas partes $\mathcal{A} \in \mathcal{B}$, de tal forma que

$$\left|\Psi\right\rangle = \sum_{m,n} A_{m,n} \left|\Psi_{m}^{\mathcal{A}}\right\rangle \left|\Psi_{n}^{\mathcal{B}}\right\rangle, \qquad (2.37)$$

onde $|\Psi_m^{\mathcal{A}}\rangle \in |\Psi_n^{\mathcal{B}}\rangle$ são bases ortonormais no espaço de Hilbert associados aos subsistemas $\mathcal{A} \in \mathcal{B}$. Exemplos de sistemas bipartidos unidimensionais são exibidos na Fig. (1). A matriz



FIGURA 1 – Exemplos de sistemas bipartidos em uma dimensão. À esquerda temos uma cadeia quântica com OBC e dividida pela metade. No centro temos um anel bipartido também dividido pela metade. À direita o segmento de uma cadeia infinita.

Fonte: Elaborada pelo autor.

 $A_{m,n}$ é, em geral, retangular, pois a dimensão de cada espaço de Hilbert pode ser diferente. Contudo, podemos obter uma forma diagonal via decomposição de valor singular, i.e., onde A = UDV, com U sendo uma matriz quadrada e unitária, D uma matriz diagonal e V uma matriz retangular com linhas ortonormais. Dessa forma, podemos então escrever

$$\left|\Psi\right\rangle = \sum_{m,n,k} U_{m,n} D_{n,n} V_{n,k} \left|\Psi_{m}^{\mathcal{A}}\right\rangle \left|\Psi_{k}^{\mathcal{B}}\right\rangle, \qquad (2.38)$$

e combinando $|\Psi_m^{\mathcal{A}}\rangle$ com $U \in |\Psi_k^{\mathcal{B}}\rangle$ com V, obtemos

$$\left|\Psi\right\rangle = \sum_{n} \lambda_{n} \left|\phi_{n}^{\mathcal{A}}\right\rangle \left|\phi_{n}^{\mathcal{B}}\right\rangle, \qquad (2.39)$$

^{**} Termo utilizado por Einstein para descrever consequências físicas do emaranhamento em duas partículas espacialmente distantes uma da outra.
onde consideramos $\lambda_n = D_{n,n}$. A decomposição (2.39) é chamada de decomposição de Schmidt e possui algumas propriedades importantes: (i) Os estados $|\phi_n^{\mathcal{A},\mathcal{B}}\rangle$ são ortonormais em ambas as partes; (ii) $\sum |\lambda_n|^2 = 1$ de tal forma que $\{\lambda_n\}$ codifica o emaranhamento; (iii) O caso limite em que $\lambda_1 = 1$, $\lambda_n = 0$, para n > 1, produz um único termo que é um estado produto não emaranhado; (iv) O caso em que todos os pesos são iguais, i.e., $\lambda_n = \lambda$ para todo n, será maximamente emaranhado; (v) A base ortonormal da decomposição de Schmidt coincide com a base dos autoestados da matriz de densidade reduzida:

$$\rho_{\mathcal{A},\mathcal{B}} = tr_{\mathcal{A},\mathcal{B}} \left| \Psi \right\rangle \left\langle \Psi \right| \tag{2.40}$$

As matrizes de densidade reduzida $\rho_{\mathcal{A}} \in \rho_{\mathcal{B}}$ possuem um espectro comum e, em particular, são igualmente mistas. Elas também podem ser escritas como

$$\rho_{\mathcal{A}/\mathcal{B}} = \sum_{i} \lambda_{i}^{2} \left| \phi_{i}^{\mathcal{A}/\mathcal{B}} \right\rangle \left\langle \phi_{i}^{\mathcal{A}/\mathcal{B}} \right|.$$
(2.41)

É justamente a mistura das matrizes de densidade reduzida que possibilita quantificar o emaranhamento. Isso pode ser feito tomando-se a decomposição de Schmidt (2.39) e usando-se os valores de λ_n . De modo geral, uma medida de emaranhamento S é fixada impondo três importantes condições: (a) S deve ser invariante frente a transformações unitárias locais, i. e., uma função apenas de λ_n , (b) S deve ser contínua e (c) deve ser aditiva na presença de várias cópias do sistema^{††}. A medida de emaranhamento mais utilizada que satisfaz à essas condições é a entropia de von Neumann das matrizes de densidade reduzidas

$$S(\rho_{\mathcal{A}}) = S(\rho_{\mathcal{B}}) = \sum_{i} \lambda_{i}^{2} \ln \lambda_{i}^{2}.$$
(2.42)

Observe que a entropia de von Neumann possui uma forma matemática equivalente à entropia de Shannon, onde as distribuições de probabilidades clássicas dão lugar aos pesos de Schmidt λ_i .

Podemos ainda introduzir uma larga classe de entropias que também são úteis para quantificar o emaranhamento. Essas entropias são chamadas de entropias de Rényi e são dadas por

$$S_n(\mathcal{A}) = \frac{1}{1-n} \ln Tr(\rho_{\mathcal{A}})^n, \qquad (2.43)$$

cujo limite para $n \to 1$ fornece a entropia de von Neumann.

2.6.2 Emaranhamento em CFT

Quando o comprimento de correlação diverge no ponto crítico, o modelo torna-se invariante por transformações de escala e permite uma descrição completa via CFT. (7) Uma vez que um modelo admite tal descrição, métodos poderosos podem ser utilizados

^{††} $S(|\psi_{\mathcal{AB}}\rangle \otimes |\phi_{\mathcal{AB}}\rangle) = S(|\psi_{\mathcal{AB}}\rangle) + S(|\phi_{\mathcal{AB}}\rangle)$

para obter propriedades críticas universais das correlações presentes no sistema. Pode-se também inferir-se propriedades de emaranhamento quântico do modelo. Essa abordagem é amplamente empregada em sistemas com (1 + 1) dimensão, i.e., com uma dimensão espacial e uma temporal^{‡‡}.

Um fato notável das entropias de von Neumann e das entropias de Rényi é que elas podem ser utilizadas para capturar o comportamento crítico universal da teoria conforme adjacente aos modelos. O ponto inicial dessa demonstração é a observação de que potências da matriz de densidade reduzida, ρ_I^n , podem ser calculadas para todo inteiro positivo n. Esse procedimento para o cálculo da entropia é tipicamente referido na literatura como "truque das réplicas". (68) Usando-se

$$S(\rho_{\ell}) = \lim_{n \to 1} \frac{1}{\ln(2)} \frac{\partial}{\partial n} Tr[\rho_{\ell}^{n}].$$
(2.44)

obtém-se a famosa fórmula de Cardy-Calabrese no limite $L \gg \ell \gg 1$ (2,69)

$$S(\ell) = \frac{c}{3}\log(\frac{\ell}{a}) + const., \qquad (2.45)$$

onde novamente c é a carga central e ℓ o tamanho do subsistema. Se agora considerarmos um sistema finito, a seguinte substituição deve ser feita

$$\ell \to \frac{L}{\pi} \sin \frac{\pi \ell}{L},$$
 (2.46)

de modo que podemos escrever

$$S(L,\ell) = \frac{c}{3} \log\left[\frac{L}{\pi} \sin\frac{\pi\ell}{L}\right] + a'_1, \qquad (2.47)$$

onde a'_1 é uma constante não universal. De fato, a expressão (2.47) é de extrema importância no estudo de cadeias quânticas de spins. O cálculo numérico da EE é a maneira mais eficiente de se determinar classes de universalidade de diferentes cadeias quânticas. (20, 28, 70) Tal eficiência decorre do fato que esta determinação é feita sem o conhecimento das excitações ou mesmo de quantidades não universais como a velocidade de som do modelo.

Uma expressão mais geral para (2.47) pode ser obtida considerando a previsão da CFT para as entropias de Rényi sob diferentes condições de contorno, i. e.,

$$S_n^{CFT}(L,\ell) = \frac{c}{6\eta} \left(1 + \frac{1}{n}\right) \log\left[\frac{\eta L}{\pi} \sin\frac{\pi\ell}{L}\right] + a_n^{\eta}, \qquad (2.48)$$

onde $\eta = 1(2)$ para sistemas com PBC (OBC). Além disso, a constante não universal a_n^{η} também depende do contorno utilizado, obedecendo uma relação universal do tipo (69,71)

$$a_n^2 - \frac{a_n^1}{2} = \log g \tag{2.49}$$

^{‡‡} Existem vários estudos de emaranhamento via CFT para d > 2. Veja a ref. (67) para aplicações na correspondência AdS/CFT e na gravitação quântica.

com log g sendo a entropia superficial (ou entropia de contorno). (72–73)

É importante ressaltar que a Eq. (2.48) é a previsão da CFT para o termo dominante das EE. Há uma correção subdominante que introduz oscilações na entropia. Essa correção foi primeiramente observada por La Frorencie et al. em uma cadeia de Heisenberg com spins 1/2 e OBC. (74) Em geral, é esperado que as entropias de Rényi para o EF de um sistema crítico comporta-se como

$$S_n(L,\ell) = S_n^{CFT}(L,\ell) + S_n^{OSC}(L,\ell).$$
(2.50)

Tendo em vista resultados exatos e numéricos para a cadeia XXZ de spin 1/2 a campo nulo, Calabrese e colaboradores conjecturaram que a parte oscilatória da entropia de emaranhamento, S_n^{OSC} , possui o seguinte comportamento universal (75–77)

$$S_n^{OSC}(L,\ell) = \frac{a_1 \delta_{n,1} + g_n (1 - \delta_{n,1}) \cos(k\ell + \theta)}{|L \sin \frac{\pi \ell}{\ell}|^{p_n}}$$
(2.51)

para PBC. As constantes a_1 e g_n são não universais e o expoente crítico p_n governa o decaimento das oscilações. A origem desse expoente, como observado em (74), está relacionado com singularidades canônicas produzidas no mapeamento conforme usado para descrever a matriz de densidade reduzida na CFT associada. Além disso, na descrição fermiônica do modelo, esse expoente está relacionado com o parâmetro de Luttinger K, onde $p_n = 2K/n$. Para modelos descritos por uma CFT bosônica (c = 1), o parâmetro de Luttinger K é dado por $K = 1/4x_p$ onde x_p é a menor dimensão anômala obtida a partir da torre conforme do modelo. (22) Por fim, investigando diferentes cadeias quânticas de spins na criticalidade, um conjunto de conjecturas foram apresentadas por Xavier e Alcaraz para as correções de tamanho finito das entropias de Rényi. (3) Os autores julgam que: (i) as oscilações na entropia de Rényi surgem apenas em modelos que possuem simetria contínua U(1), como o modelo XX. Modelos com simetrias discretas $(Z_2, Z_3, \text{ etc})$ não apresentam oscilações. (ii) Para qualquer cadeia quântica de spin, a amplitude da correção oscilante na entropia de Rényi tem um decaimento universal mediado pela potência $p_n = 2x_e/n$ onde x_e é a dimensão do operador energia do modelo. (iii) Correções de tamanho finito da entropia de von Neumann segue a lei de potência ℓ^{-p_1} , com $p_1 = 2$ sendo um expoente universal válido para todos os modelos críticos.

3 CADEIAS QUÂNTICAS DE SPINS GENERALIZADAS

Existem duas cadeias quânticas muito estudadas que são descritas por férmions livres: O modelo de Ising com campo transverso, dado por

$$\mathcal{H}_I(\lambda) = -\sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \lambda \sum_{i=1}^L \sigma_i^x, \qquad (3.1)$$

e o modelo XY, dado por

$$\mathcal{H}_{XY}(\lambda) = \sum_{i=1}^{L} \left[(\sigma_{2i}^{x} \sigma_{2i+1}^{x} + \sigma_{2i}^{y} \sigma_{2i+1}^{y}) + \lambda (\sigma_{2i-1}^{x} \sigma_{2i}^{x} + \sigma_{2i-1}^{y} \sigma_{2i}^{y}) \right],$$
(3.2)

sendo L o número de sítios e σ_i^x , σ_i^y , σ_i^z matrizes de Pauli de spin 1/2 que atuam no sítio *i*. Na realidade, existe uma relação entre (3.1) e (3.2). Pode-se demonstrar a partir das relações de comutação dos operadores que compõe (3.1) e (3.2) que o espectro da cadeia XY com L sítios (L par) contém o espectro dobrado da cadeia de Ising com campo transverso e L/2 sítios. (58)

É interessante observar que, apesar de (3.1) e (3.2) possuírem simetrias distintas, seus espectros estão relacionados. A simetria de (3.1) é a simetria discreta Z(2), que nos diz que

$$\mathcal{P} = \prod_{i=1}^{L} \sigma_i^x \tag{3.3}$$

é um bom número quântico ($[\mathcal{H}_I(\lambda), \mathcal{P}] = 0$), enquanto a simetria contínua U(1) presente em (3.2) nos diz que

$$\left[\sum_{i=1}^{L} \sigma_i^z, \mathcal{H}_{XY}(\lambda)\right] = 0, \qquad (3.4)$$

sendo a componente z da magnetização um bom número quântico.

Estudaremos neste trabalho interessantes extensões dessas cadeias. As primeiras generalizações dos modelos de férmions livres discutidos acima foram propostas na literatura por Baxter (78) e Alcaraz e Pimenta. (46) A primeira extensão é a Hamiltoniana Z(N) de Baxter que estende operadores de férmions livres (N = 2) para paraférmions livres (N > 2) em uma rede. O caso N = 2 é reduzido ao modelo de Ising com campo transverso (3.1) e para N > 2 o modelo torna-se não hermitiano. A Hamiltoniana do modelo de Baxter pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_{\mathcal{B}} = -\sum_{i=1}^{L} \lambda_{2i-1} X_i - \sum_{i=1}^{L-1} \lambda_{2i} Z_i^{\dagger} Z_{i+1}, \qquad (3.5)$$

onde λ_i são acoplamentos reais e Z, X são as generalizações Z(N) das matrizes de Pauli de spin 1/2, que satisfazem à álgebra

$$XZ = \omega ZX, \ X^N = Z^N, \ Z^N = 1, \ Z^{\dagger} = Z^{N-1},$$
 (3.6)

com $\omega = e^{\frac{i2\pi}{N}}$. Recentemente, uma extensão do modelo de Baxter foi proposta por Alcaraz e Pimenta (46) de modo a incluir interações de multicorpos. Inserindo um parâmetro inteiro p (onde p = 1, 2, 3, ...), sendo p + 1 o número de spins na interação de multispin, a generalização de (3.5) obtida por Alcaraz e Pimenta é dada por

$$\mathcal{H}_{M}^{(N,p)} = -\sum_{i=1}^{M} \lambda_{i} Z_{i} Z_{i+1} \dots Z_{i+p-1} X_{i+p}.$$
(3.7)

O caso do modelo de Ising com campo transverso (3.1) e do modelo parafermiônico de Baxter (3.5) corresponde a modelos relacionados com a escolha p = 1.

Neste capítulo, consideremos essa nova família de modelos descritos por férmions e paraférmions livres dada por (3.7). Também discutiremos como as quasi-energias dessas Hamiltonianas estão associadas com as raízes de certos polinômios característicos e, por fim, abordaremos a correspondência exata dos modelos em (3.7) com uma larga família de modelos XY com interações N-multispin e simetria U(1).

3.1 Modelos com simetria Z(N)

As primeiras Hamiltonianas geradas são obtidas tomando-se N = 2, ou seja, são os modelos fermiônicos livres. As Hamiltonianas resultantes contém interações (p + 1)-multispins (p = 1, 2, ...) e são dadas por

$$\mathcal{H}_{M}^{2,p} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_{i} \sigma_{i}^{x} \prod_{j=1}^{i-1} \sigma_{j}^{z} - \sum_{i=p+1}^{M} \lambda_{i} \sigma_{i}^{x} \prod_{j=i-p}^{i-1} \sigma_{j}^{z}, \qquad (3.8)$$

onde $\sigma_i^{z,x}$ são, como antes, as matrizes de Pauli de spin-1/2, M é o número de sítios e λ_i são acoplamentos reais.

No caso p=1a Hamiltoniana possui uma forma simples, com interações de dois corpos

$$\mathcal{H}_M^{2,1} = -\lambda_i \sigma_i^x - \sum_{i=2}^M \lambda_i \sigma_{i-1}^z \sigma_i^x.$$
(3.9)

Outra representação interessante para o caso fermiônico (N = 2) é obtida inserindo p = 2 em (3.8). Esse modelo recupera aquele introduzido por Fendley (79) com interações de três spins, onde

$$\mathcal{H}_{M}^{2,2} = -\sum_{i=1}^{M} \lambda_{i} \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} \sigma_{i+2}^{x}.$$
(3.10)

Essa família de modelos Z(2) com interações de multispin são, de fato, casos particulares do modelo de paraférmions livres Z(N) dado por (3.7). (46–47) Como mostrado em (46– 47), o espectro dessas cadeias quânticas são obtidas a partir das \overline{M} raízes $\{z_i\}$ do polinômio característico

$$P_M^{(p)}(z) = \sum_{\ell=0}^M C_M(\ell) z^\ell, \qquad (3.11)$$

com

$$\bar{M} = int\left(\frac{M+p}{p+1}\right),\tag{3.12}$$

onde $int(x)^*$ é a parte inteira de x. Este valor para \overline{M} está associado com o número de cargas conservadas que surgem no modelo Z(N) com interações multispins. (46) O polinômio característico (3.11) obedece à seguinte relação de recorrência

$$P_M^{(p)}(z) = P_{M-1}^{(p)}(z) - z\lambda_M^N P_{M-p-1}(z), \qquad (3.13)$$

com condições iniciais $P_j^{(p)}(z) = 1$ para $j \leq 0$. As Eqs. (3.11) e (3.13) foram obtidas por Alcaraz e Pimenta considerando a integrabilidade e as cargas conservadas do modelo Z(N) com Hamiltoniana definida em (3.7). Além disso, foi mostrado recentemente em (80) que as raízes z_i do polinômio característico são reais e de única multiplicidade.

As energias das quasi-partículas independentes $\{\epsilon_i, i = 1, ..., \overline{M}\}$ (que definirá as energias das Hamiltonianas) e as raízes do polinômio $\{z_i, i = 1, ..., \overline{M}\}$ estão relacionadas por $\epsilon_i = z_i^{-1/N}$. As energias não nulas do modelo de férmions livres (N = 2) ou das cadeias parafermiônicas livres (N > 2) são dadas por

$$E_{\{s_1,\dots,s_{\bar{M}}\}} = -\sum_{i=1}^{\bar{M}} \omega^{s_i} \epsilon_i, \qquad (3.14)$$

onde $s_i = 0, 1, ..., N - 1$ e, como antes, $\omega = e^{i\frac{2\pi}{N}}$. A energia do EF, E_0 , do modelo de Z(N) de paraférmions livres é real, sendo obtida tomando-se a escolha $s_1 = ... = s_{\bar{M}} = 0$ em (3.14),

$$E_0 = E_{0,0,\dots,0} = -\sum_{i=1}^M \epsilon_i.$$
(3.15)

Os estados excitados de menor energia são obtidos trocando a menor energia não nula ϵ_1 , com $s_1 = 0$, para $s_1 = j > 0$ na distribuição de partículas do EF. Suas energias são complexas para N > 2 e podem ser escrita como

$$E_{exc,j} = E_0 + (1 - \omega^j)\epsilon_1, \quad j = 0, ..., N - 1, \tag{3.16}$$

produzindo lacunas de massa cuja parte real é dada por

$$Re(\Delta_j) = (1 - \cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right))\epsilon_1, \ \ j = 0, ..., N - 1.$$
 (3.17)

Note que ϵ_1 está associado com a maior raiz do polinômio característico dado em (3.13). Na Fig. 2(a) exibimos a configuração para o EF do modelo N = 3 e nas Fig. 2(b) e Fig. 2(c) os menores estados excitados nesse setor. Observe que as intersecções dos círculos com as linhas radiais no ângulo $\frac{2\pi j}{N}$ (j = 0, 1, ..., N-1) fornecem as possíveis contribuições para as quasi-energias. Temos aqui o efeito análogo à repulsão fermiônica, i.e., a presença

^{*} Podemos também denotar a parte inteira utilizando a função piso, onde $int(x) = \lfloor x \rfloor$.



FIGURA 2 – Representação no plano complexo das autoenergias em (3.14) para o modelo de paraférmions livres Z(3). Os círculos têm raio ϵ_i . Observe que cada círculo pode ser ocupado por uma e apenas uma quase energia ϵ_i . Isso significa que as quase partículas ϵ_i obedecem a um princípio de exclusão generalizado, que no caso N = 2é similar ao princípio de exclusão de Pauli.

de uma regra de exclusão de círculos. Em cada círculo Z(N), podemos ter apenas uma das possíveis raízes ϵ_i , localizadas em $\omega^{\ell} \epsilon_i$ ($\ell = 0, 1, ..., N - 1$). No caso N = 2 essa regra de exclusão se reduz ao princípio de exclusão fermiônico de Pauli.

Como evidenciado em (46–47), os modelos Z(N) se mostram críticos no ponto isotrópico { $\lambda_i = 1$ }. A energia do EF por sítio, neste ponto crítico, é passível de ser obtida analiticamente e é dada em termos das séries hipergeométricas de Lauricella F_D^{p-1} . (47,81) No caso do modelo de Ising quântico (N = 2 e p = 1) os polinômios cujas raízes nos dão as quasi-energias são os polinômios de Chebyshev e uma forma analítica para F_1 é conhecida. Ademais, as lacunas de massa (($\Delta_{N,p}$)) no ponto crítico possuem uma dependência com o tamanho finito da rede, onde para redes de tamanho L grande, temos

$$Re(\Delta_{N,p}) \sim \frac{1}{L^z}, \ z = \frac{p+1}{N}.$$
 (3.18)

Conforme é sabido (58), o expoente crítico dinâmico z de uma cadeia crítica é obtido pelo comportamento assintótico $(L \to \infty)$ da primeira lacuna de massa do sistema, i.e., $\Delta E \sim 1/L^z$. Assim, temos z = (p+1)/N neste limite. Notemos que, em geral, $z \neq 1$. Apenas nos casos onde N = p + 1 teremos z = 1, como ocorre no modelo com N = 2 e p = 1 (modelo de Ising com campo transverso) e no modelo com N = 3 e p = 2 (modelo Z(3) com interações de 3-corpos). No caso em que $\lambda_i \neq 1$, as funções de correlação terão componentes do tipo e^{-aL} , caracterizando um espectro massivo. Assim, esperamos que o ponto $\lambda_i = 1$ seja, em geral, um ponto multicrítico para os modelos. O fato de que N = p + 1 produza z = 1 nos induz à possibilidade dos modelos multicríticos ($\lambda = 1$) serem descritos por teorias de campos conformalmente invariantes, o que é interessante, pois os modelos são não hermitianos e pouco se sabe sobre a física de modelos invariantes conformes não hermitianos.

3.2 Modelos com simetria U(1)

A fim de se estender a correspondência exata conhecida entre os espectros dos modelos usuais de Ising e XY, foi proposta na ref. (1) uma extensão do modelo XY (3.2) que além das interações usuais de dois corpos, também contenham interações Nmultispins (N = 2, 3, ...). O caso N = 2 recupera o modelo XY padrão, descrito por férmions livres com autoenergias reais, enquanto para N > 2 os modelos são descritos por férmions livres com autoenergias complexas. Similarmente ao modelo parafermiônico Z(N) de Baxter, as Hamiltonianas $H_{N,p}^{XY}$ são não hermitianas para N > 2. Esta nova família de cadeias XY possui L = M + N - 1 sítios e é descrita pela Hamiltoniana

$$\mathcal{H}_{N,p}^{XY} = \sum_{i=1}^{M+N-2} \mu_i \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sum_{i=1}^M \gamma_i \sigma_i^- \left(\prod_{j=i+1}^{i+N-2} \sigma_j^z\right) \sigma_{i+N-1}^+, \tag{3.19}$$

onde $N = 2, 3..., \sigma_i^{\pm} = (\sigma_i^x \pm i\sigma_i^y)/2$ e, como antes, $(\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ são as matrizes de Pauli de spin 1/2, sendo que σ^{\pm} e σ^z satisfazem à álgebra SU(2)

$$[\sigma^+, \sigma^-] = \sigma^z, \ [\sigma^\pm, \sigma^z] = \pm 2\sigma^\pm.$$
 (3.20)

Conforme veremos, a Hamiltoniana (3.19) admite uma forma bilinear em termos dos operadores fermiônicos. Mostraremos adiante que isso é possível por meio da transformação de Jordan-Wigner.

Podemos simplificar a Hamiltoniana (3.19) por meio da transformação canônica:

$$\sigma_{1}^{\pm} \to \sigma_{1}^{\pm}, \ \sigma_{i}^{\pm} \to \left(\prod_{j=1}^{i-1} \mu_{j}\right)^{\pm} \sigma_{i}^{\pm}, \ (i = 2, ..., M + N - 1),
\sigma_{i}^{z} \to \sigma_{i}^{z}, \ (i = 1, ..., M + N - 1),$$
(3.21)

que nos fornece a Hamiltoniana

$$\mathcal{H}_{N,p}^{XY}\{\lambda_i\} = \sum_{i=1}^{M+N-2} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sum_{i=1}^M \lambda_i^N \sigma_i^- \left(\prod_{j=i+1}^{i+N-2} \sigma_j^z\right) \sigma_{i+N-1}^+$$
(3.22)

onde os parâmetros efetivos λ_i são dados por

$$\lambda_i^N = \gamma_i \left(\prod_{j=i}^{i+N-2} \mu_j \right). \tag{3.23}$$

Mostramos pictoricamente na Fig. 3 os acoplamentos nos casos do modelo com p = 1, p = 2 e p = 3 para uma cadeia com 5 sítios. As flechas indicam o sentido dos operadores de *hopping*.

O espectro de energia para esta nova família de modelos XY foi completamente determinado para o caso de OBC. Alcaraz e Pimenta mostraram que um dado setor U(1)



FIGURA 3 – Algumas cadeias quânticas geradas a partir da Hamiltoniana (3.19) nos casos N = 2(p = 1), N = 3 (p = 2) e N = 4 (p=3) com OBC.

no modelo XY generalizado contém todas as autoenergias do modelo parafermiônico $Z(N) \operatorname{com} N \ge p + 1^{\dagger}$. Isso significa que nestes casos o EF e os menores estados excitados possuem a mesma energia em ambos os modelos, implicando que, no ponto crítico, eles compartilham os mesmos valores para os expoentes críticos. (1)

Devido à simetria U(1) presente nos modelos XY generalizados com interações N-multispins, o autoespaço de $\mathcal{H}_{N,p}^{XY}$ pode ser decomposto em setores disjuntos fixados pelos autovalores de $S^z = \sum \sigma_i^z$.

Consideremos a transformação de Jordan-Wigner na Hamiltoniana (3.22). Intro-
duzimos os operadores fermiônicos $\{c_j\}$ (j = 1, ..., M + N - 1)

$$c_j = \sigma_j^{-1} \prod_{i=1}^{j-1} \sigma_i^z, \quad c_j^{\dagger} = \sigma_j^{+1} \prod_{i=1}^{j-1} \sigma_i^z, \quad j = 1, \dots, M + N - 1,$$
(3.24)

onde os operadores $\{c_j\}$ são de fato operadores fermiônicos, pois decorre de (3.24) as relações de anticomutação:

$$\{c_i^{\dagger}, c_j\} = \delta_{ij}, \ \{c_i, c_k\} = \{c_i^{\dagger}, c_k^{\dagger}\} = 0.$$
(3.25)

Como consequência de (3.24) temos $\sigma_j^z = 2c_j^{\dagger}c_j - 1$ e a conservação da componente z do spin total se manifesta como a conservação do número fermiônico total $N_F = \sum c_i^{\dagger}c_i$, i. e., $[\mathcal{H}_L^{XY}, N_F] = 0$.

A Hamiltoniana (3.19) em termos dos operadores fermiônicos $\{c_j\}$ admite a forma bilinear

$$\mathcal{H}_{N,p}^{XY} = -\sum_{i,j}^{M+N-1} c_i^{\dagger} \mathbb{A}_{i,j} c_j, \qquad (3.26)$$

 $^{^\}dagger$ Essa correspondência é exibida na seção 3.3.

onde $\mathbb{A}_{i,j}$ são elementos de matriz de *hopping* definidos por

$$\mathbb{A}_{i,j} = \delta_{j,i+1} + \lambda_j^N \delta_{j,i+1-N}. \tag{3.27}$$

A matriz de hopping \mathbb{A} é uma matriz não simétrica. Apesar disso, a Hamiltoniana (3.26) pode ser reduzida a uma forma diagonal através da transformação $\{c_i, c_i^{\dagger}\} \rightarrow \{\eta_k, \eta_k^{\dagger}\}$:

$$\eta_k = \sum_{i=1}^{M+N-1} \mathbb{L}_{i,k} c_i, \quad \eta_k^{\dagger} = \sum_{i=1}^{M+N-1} \mathbb{R}_{i,k} c_i^{\dagger}, \quad (3.28)$$

onde $\mathbb{L}_{i,k}$ e $\mathbb{R}_{i,k}$ são a i-ésima componente do autovetor, respectivamente, a esquerda e à direita da matriz \mathbb{A}^{\ddagger} . Os autovetores \mathbb{L} e \mathbb{R} são biortogonais, em que a seguinte relação de normalização $\mathbb{L}^T \mathbb{R} = \mathbb{1}$ é válida. Essas relações e as relações de anticomutação fermiônicas (3.25) implicam que η_k , η_k^{\ddagger} são também operadores fermiônicos que satisfazem à álgebra

$$\{\eta_k, \eta_{k'}^{\dagger}\} = \delta_{k,k'}, \ \{\eta_k, \eta_{k'}\} = \{\eta_k^{\dagger}, \eta_{k'}^{\dagger}\} = 0.$$
(3.29)

Tomando-se a inversa de (3.28) e substituindo-a em (3.26), é possível obter \mathcal{H}_M^{XY} na sua forma diagonal,

$$\mathcal{H}_{N,p}^{XY} = -\sum_{i,j}^{M+N-1} c_i^{\dagger} \mathbb{A}_{i,j} c_j = -\sum_{i,j} \sum_{k,k'} \mathbb{L}_{i,k} \mathbb{A}_{i,j} \mathbb{R}_{j,k'} \eta_k^{\dagger} \eta_{k'}$$
$$= -\sum_j \sum_{k,k'} \sum_i (\mathbb{L}^T)_{k,i} \mathbb{A}_{i,j} \mathbb{R}_{j,k'} \eta_k^{\dagger} \eta_{k'}$$
$$= -\sum_j \sum_{k,k'} \Lambda_k \mathbb{L}_{k,j}^T \mathbb{R}_{j,k'} \eta_k^{\dagger} \eta_{k'} = -\sum_{k,k'} \Lambda_k \delta_{k,k'} \eta_k^{\dagger} \eta_{k'}$$
$$= -\sum_{k=1}^{M+N-1} \Lambda_k \eta_k^{\dagger} \eta_k.$$
(3.30)

Note que usamos o fato de que

$$\sum_{i=1}^{M+N-1} \mathbb{L}_{k,i}^T \mathbb{A}_{i,j} = \Lambda_k \mathbb{L}_{k,j}^T.$$
(3.31)

A Eq. (3.30) implica que todos os 2^{M+N-1} autovalores de (3.19) são obtidos a partir das M + N - 1 quasi-energias Λ_k dadas pelos autovalores da matriz \mathbb{A} , i.e.,

$$E_{s_1,\dots,s_{M+N-1}} = -\sum_{k=1}^{M+N-1} s_k \Lambda_k, \ s_k = 0, 1.$$
(3.32)

As quasi-energias $\{\Lambda_k\}$ são obtidas a partir das raízes de $det(\mathbb{A} - \Lambda_k \mathbb{1}) = 0$. Com exceção das energias de modo zero, i.e., $\Lambda_k = 0$, essas quasi-energias são também obtidas a partir dos zeros $\{z_k\}$ do polinômio característico definido por

$$P_M^{(p)} = det(1 - z\mathbb{A}), \tag{3.33}$$

[‡] Observe que para sistemas não hermitianos, os autovetores à esquerda e à direita são geralmente distintos, embora os autovalores sejam os mesmos.

onde $\Lambda_k = 1/z_k$. Aplicando-se a regra dos cofatores de Laplace no determinante da matriz $(1 - \Lambda \mathbb{A})$ e considerando o caso em que os acoplamentos são isotrópicos, pode-se verificar que esses polinômios satisfazem à relação de recorrência

$$P_M(z) = P_{M-1}(z) - z\lambda_M^N P_{M-N}(z), \qquad (3.34)$$

onde $z = (1/\Lambda)^N$ e

$$P_M(z) = 1, \text{ para } M \le 0.$$
 (3.35)

Comparando (3.34) com (3.13) vemos que os polinômios $P_M(z)$ são os mesmos que fixam o espectro do modelo Z(N) com interações (p + 1)-multispins. (1) Como determinado por Alcaraz e Pimenta (1) as mesmas raízes de $P_M(z_i) = 0$, que dão as quasi-energias $\epsilon_i = 1/z_i^{1/N}$ do modelo de paraférmions livres com interações multispins, também dão as quasi-energias dos modelos XY com interações N-multispins. Esse interessante fato mostra haver uma equivalência exata entre as duas famílias de modelos. Cada raiz z_i do polinômio característico fornece N quasi-energias fermiônicas da cadeia XY

$$\Lambda_{j,i} = e^{i\frac{2\pi}{N}j}\epsilon_i, \quad i = 1, ..., \left\lfloor \frac{M+N-1}{N} \right\rfloor, \quad j = 0, 1, ..., N-1.$$
(3.36)

Como a dimensão do espaço de Hilbert é $2^L = 2^{M+N-1}$ e o número total de quasi-energias em (3.32) é M + N - 1, devemos ter

$$N_z = M + N - 1 - N \left\lfloor \frac{M + N - 1}{N} \right\rfloor$$
(3.37)

modos de energia zero. Tais modos produzirão uma degenerescência de 2^{N_z} em todo o espectro. Com exceção dessa degenerescência, as energias do modelo XY com interações N-multispins (3.19) são dadas por

$$E_{\{s_{i,j},r_{i,j}\}} = -\sum_{i=1}^{\lfloor \frac{M+N-1}{N} \rfloor} \left(\sum_{j=0}^{N-1} r_{i,j} \omega^{s_{i,j}} \right) \epsilon_i,$$
(3.38)

onde para cada $i=1,...,\lfloor\frac{M+N-1}{N}\rfloor$ temos um possível valor para $s_{i,j}=0,1,...,N-1$ e $r_{i,j}=0,1.$

3.3 Correspondência entre o modelo XY generalizado e o modelo de paraférmions livres Z(N) com interações (p+1)-multispins

Nesta seção mostraremos que uma escolha apropriada de um conjunto de N acoplamentos $\{\lambda_i\}$ faz com que o autoespectro do modelo XY contenha todo o autoespectro da cadeia de paraférmions livres Z(N). Essa correspondência é estabelecida fixando o polinômio característico que determina o espectro do modelo. Além disso, ela também generaliza a correspondência conhecida entre o modelo de Ising quântico e o modelo XY usual. Primeiramente, consideremos o caso geral $N \ge 2 \text{ com } p = 1$. Nossa estratégia para provar tal correspondência consiste em primeiro dividir os M acoplamentos constantes em células idênticas de tamanho N. De modo que, há

$$M = N \left\lfloor \frac{M}{N} \right\rfloor + \ell_M \tag{3.39}$$

acoplamentos, sendo que em cada célula apenas os dois primeiros acoplamentos são não nulos, i.e.,

$$\lambda_i = \lambda_{(k-1)N+j} = 0, \text{ para } j = 3, ..., N.$$
 (3.40)

Podemos redefinir os acoplamentos não nulos fazendo

$$\tilde{\lambda}_{\ell} = \tilde{\lambda}_{2(k-1)+j} \equiv \lambda_{(k-1)N+j}, \text{ para } j = 1, 2, \qquad (3.41)$$

tal que $\ell=1,2,...,\tilde{M}$ e o número destes torna-se então

$$\tilde{M} = 2\left\lfloor \frac{M}{N} \right\rfloor + \min(\ell_M, 2).$$
(3.42)

Logo, nesse caso, o conjunto das constantes de acoplamentos pode ser representado por

$$\{\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_2, 0, ..., 0; \tilde{\lambda}_3, \tilde{\lambda}_4, 0, ..., 0; ...\}.$$
 (3.43)

Dessa forma, a Hamiltoniana do modelo XY com interações $N\mbox{-multispins}$ ep=1pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_{N,1}^{XY} = \sum_{i=1}^{M+N-2} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sum_{\ell=1}^{\tilde{M}} \tilde{\lambda}_{\ell}^N \sigma_{\tilde{\ell}}^- \left(\prod_{j=\tilde{\ell}+1}^{\tilde{\ell}+N-2} \sigma_j^z\right) \sigma_{\tilde{\ell}+N-1}^+,$$
(3.44)

onde

$$\tilde{\ell} = \ell + (N-2) \left\lfloor \frac{\ell-1}{2} \right\rfloor.$$
(3.45)

Como exemplo, no caso N = 4 e M = 8 temos quatro acoplamentos não nulos, de forma que a Hamiltoniana (3.44) torna-se

$$\mathcal{H}_{4,1}^{XY} = \sum_{i=1}^{10} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \tilde{\lambda}_1^4 \sigma_1^- \sigma_2^z \sigma_3^z \sigma_4^+ + \tilde{\lambda}_2^4 \sigma_2^- \sigma_3^z \sigma_4^z \sigma_5^+ + \tilde{\lambda}_5^4 \sigma_5^- \sigma_6^z \sigma_7^z \sigma_8^+ + \tilde{\lambda}_6^4 \sigma_6^- \sigma_7^z \sigma_8^z \sigma_9^+.$$
(3.46)

Podemos ainda inserir (3.40) na relação de recorrência (3.34) do modelo XY. Para j = 3, ..., N, obtemos

$$P_i^{(N-1)} = P_{(k-1)N+j}^{(N-1)} = P_{(k-2)N+2}^{(N-1)}$$
(3.47)

e para j = 1, 2, podemos definir

$$\tilde{P}_{\ell}^{1} = P_{i}^{(N-1)} = P_{(k+1)N+j}, \qquad (3.48)$$

 $\operatorname{com} \ell = (k-1)2 + j$. Então, segue-se da relação de recorrência que

$$P_{i-1}^{(N-1)} \equiv \tilde{P}_{\ell-1}^{(1)} \tag{3.49}$$

$$P_{i-1}^{(N-1)} = P_{(k-2)N+j}^{(N-1)} = \tilde{P}_{(k-2)2+j}^{(1)} \equiv \tilde{P}_{\ell-2}^{(1)}.$$
(3.50)

Inserindo (3.49)-(3.50) na relação de recorrência (3.34)-(3.35), obtemos

$$\tilde{P}_{\ell}^{(1)}(z) = \tilde{P}_{\ell-1}^{(1)}(z) - z\tilde{\lambda}_{\ell}^{N}\tilde{P}_{\ell-2}^{(1)}(z), \qquad (3.51)$$

para $\ell = 1, 2, ..., \tilde{M}$, com condições iniciais dadas por

$$\tilde{P}_{\ell}^{(1)}(z) = 1, \text{ para } \ell \le 0.$$
 (3.52)

Note que a relação de recorrência (3.51)-(3.52) são precisamente aquelas que obtivemos para o polinômio $P_M^{(p)}(z)$ na cadeia de paraférmions livres Z(N) com p = 1 (veja Eq. (3.13)) e $\tilde{M} \leftrightarrow M$, $\tilde{\lambda}_{\ell} \leftrightarrow \lambda_{\ell}$. Como vimos, as raízes z_i desses polinômios dão as quasienergias $\epsilon_i = 1/z_i^{1/N}$ dos modelos. Isso implica que o modelo XY com interações Nmultispins dada pela Hamiltoniana $\mathcal{H}_{N,1}^{XY}$ possui as mesmas quasi-energias do modelo de paraférmions livres Z(N) com Hamiltoniana $\mathcal{H}_M^{N,1}$ dada em (3.7).

Vamos agora generalizar as equações acima considerando p qualquer e $N \ge (p+1)$. Como antes, começamos dividindo os acoplamentos constantes em células contendo N sítios. Em cada célula, cancelamos os acoplamentos

$$\lambda_i = \lambda_{(k-1)N+j} = 0, \text{ para } j = p+2, ..., N,$$
 (3.53)

e definimos

$$\tilde{\lambda}_{\ell} = \tilde{\lambda}_{(p+1)(k-1)+j} \equiv \lambda_{(k-1)N+j}, \quad \text{para } j = 1, \dots, (p+1), \tag{3.54}$$

com $\tilde{\ell}=1,2,...,\tilde{M}.$ O número de acoplamentos não nulos são agora dados por

$$\tilde{M} = (p+1) \left\lfloor \frac{M}{N} \right\rfloor + \min(\ell_M, p+1).$$
(3.55)

Em termos desses acoplamentos, o modelo XY multispin pode ser escrito como

$$\mathcal{H}_{N,p}^{XY} = \sum_{i=1}^{M+N-2} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sum_{\ell=1}^{\tilde{M}} \tilde{\lambda}_\ell^N \sigma_{\tilde{\ell}}^- \left(\prod_{j=\tilde{\ell}+1}^{\tilde{\ell}+N-2} \sigma_j^z\right) \sigma_{\tilde{\ell}+N-1}^+, \tag{3.56}$$

onde

$$\tilde{\ell} = \ell + (N - p - 1) \left\lfloor \frac{\ell - 1}{p + 1} \right\rfloor.$$
(3.57)

Inserindo (3.53) na relação de recorrência (3.34) e considerando j = p + 2, ..., N, obtemos

$$P_i^{(N-1)} = P_{(k-1)N+j}^{(N-1)} = P_{(k-2)N+p+1}^{(N-1)}$$
(3.58)

e para j = 1, ..., p + 1, definimos

$$\tilde{P}_{\ell}^{(p)} = P_i^{(N-1)} = P_{(k+1)N+j}, \qquad (3.59)$$

com $\ell = (k-1)(p+1) + j$. A partir dessas relações, podemos obter as generalizações de (3.49)-(3.50)

$$P_{i-1}^{(N-1)} \equiv \tilde{P}_{\ell-1}^{(p)} \tag{3.60}$$

$$P_{i-1}^{(N-1)} = P_{(k-2)N+j}^{(N-1)} = \tilde{P}_{(k-2)(p+1)+j}^{(p)} \equiv \tilde{P}_{\ell-(p+1)}^{(p)}.$$
(3.61)

Inserindo essas duas últimas equações na relação de recorrência (3.34), podemos finalmente obter

$$\tilde{P}_{\ell}^{(p)}(z) = \tilde{P}_{\ell-1}^{(p)}(z) - z\tilde{\lambda}_{\ell}^{N}\tilde{P}_{\ell-(p+1)}^{(p)}(z), \qquad (3.62)$$

para $\ell = 1, 2, ..., M$, com condições iniciais dadas por

$$\tilde{P}_{\ell}^{(p)}(z) = 1, \text{ para } \ell \le 0.$$
 (3.63)

Veja que essas relações são as mesmas do modelo Z(N) com interações (p+1)-multispins dadas em (3.13). Portanto, o modelo XY definido em (3.19) e (3.56) possui o espectro de partícula livre com as mesmas quasi-energias do modelo Z(N) mencionado (veja a Fig. (4)). Convém notar que essa correspondência é válida apenas no caso de OBC. No caso periódico, apesar dos modelos Z(N) serem integráveis, suas soluções são mais complexas e o espectro deixa de ser o de paraférmions livres. Nestes casos, a correspondência entre as duas famílias de modelos não é imediata. (1)



FIGURA 4 – Possíveis contribuições da quasi-energia ϵ_1 para a cadeia de paraférmions livres Z(3)e para o modelo XY equivalente com interações N-multispins. A quasi-energia ϵ_1 é obtida a partir da maior raiz do polinômio característico em (3.62).

Fonte: Elaborada pelo autor.

4 SOLUÇÃO DO MODELO XY COM N=3 E P=2

Neste capítulo, consideramos o modelo XY com interações 3-multispins (p = 2), obtido diretamente da família dos modelos para N = 3 em (3.22). Menções a esse modelo serão representadas por $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$. Condições de contorno periódicas e abertas foram impostas a essa cadeia e, nestes dois casos, efeitos de tamanho finito na energia do EF e nas excitações serão discutidos. Diante disso, será possível verificar se o espectro do modelo seria condizente com previsões de teorias conformes e, se possível, classificá-lo em alguma das classes de universalidade existentes.

4.1 Transformação canônica e criticalidade

O caso N = 3 e OBC produz a Hamiltoniana

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = \sum_{i=1}^{M+1} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sum_{i=1}^M \lambda_i^3 \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^+.$$
(4.1)

Considerando-se a transformação

$$\sigma_1^{\pm} \to \tilde{\sigma}_1^{\pm}, \ \sigma_i^{\pm} \to \left(\prod_{j=1}^{i-1} \lambda_j\right)^{\mp} \tilde{\sigma}_i^{\pm}, \ (i=2,...,M+N-1),$$

$$\sigma_i^z \to \tilde{\sigma}_i^z, \ (i=1,...,M+N-1),$$
(4.2)

vemos que a álgebra

$$\left[\tilde{\sigma}_i^{\pm}\right]^2 = 0, \quad \tilde{\sigma}^+ \tilde{\sigma}^- = \sigma^+ \sigma^- = \frac{\sigma^z + 1}{2} = \frac{\tilde{\sigma}^z + 1}{2} \tag{4.3}$$

é preservada e assim a transformação é canônica. Observe também que

$$\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- = \left(\prod_{j=1}^{i-1} \lambda_j\right)^{-1} \tilde{\sigma}_i^+ \left(\prod_{j=1}^{i-1} \lambda_j\right)^{+1} \lambda_i \tilde{\sigma}_{i+1}^- = \lambda_i \tilde{\sigma}_i^+ \tilde{\sigma}_{i+1}^-$$
$$\lambda_i^3 \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^+ = \lambda_i^3 \left(\prod_{j=1}^{i-1} \lambda_j\right)^{+1} \tilde{\sigma}_i^- \tilde{\sigma}_{i+1}^z \left(\prod_{j=1}^{i-1} \lambda_j\right)^{-1} \frac{1}{\lambda_i^2} \tilde{\sigma}_{i+2}^+ = \lambda_i \tilde{\sigma}_i^- \tilde{\sigma}_{i+1}^z \tilde{\sigma}_{i+2}^+.$$

Logo, a Hamiltoniana (4.1) pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = \sum_{i=1}^{M+1} \lambda_i \tilde{\sigma}_i^+ \tilde{\sigma}_{i+1}^- + \sum_{i=1}^M \lambda_i \tilde{\sigma}_i^- \tilde{\sigma}_{i+1}^z \tilde{\sigma}_{i+2}^+.$$
(4.4)

Para o caso isotrópico, i.e., para $\lambda_i = \lambda$, temos que (4.1) se reduz a

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY}(\lambda) = \sum_{i=1}^{M+1} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \lambda^3 \sum_{i=1}^M \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^+$$
(4.5)

ou, equivalentemente, (4.4) se reduz a

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = \lambda \left[\sum_{i=1}^{M+1} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \sum_{i=1}^M \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^+ \right].$$
(4.6)

Isto nos diz que $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}(\lambda) = \lambda \mathcal{H}_{3,2}^{XY}(1)$ e, portanto, a física do modelo com OBC independe da anisotropia λ .

A cadeia (4.1) possui as mesmas quasi-energias do modelo Z(3) parafermiônico com acoplamentos $\{\lambda_i\}$. O caso $\lambda_i = 1$ é o ponto multicritico em que o expoente crítico dinâmico é dado por $z = \frac{p+1}{N} = 1$. O caso em que o modelo Z(N) parafermiônico possui acoplamentos $\lambda_{3i-2} = \lambda_{3i-1} = 1$ e $\lambda_{3i} = \lambda \neq 1$ é não crítico e corresponde à escolha $\lambda_{3i-2}^3 = \lambda_{3i-1}^3 = 1$ e $\lambda_{3i}^3 = \lambda^3$ em (4.1). As quasi-energias da cadeia aberta são dadas por (3.36), sendo obtidas a partir das raízes do polinômio característico

$$P_M^{N-1}(z) = P_{M-1}^{N-1}(z) - z\lambda_M^3 P_{M-3}^{N-1}(z), \qquad (4.7)$$

 $\operatorname{com} P_M(z) = 1$, para $M \leq 0$.

No caso periódico temos uma física distinta. A equivalência entre o modelo parafermiônico Z(3) generalizado e o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ inexiste. A Hamiltoniana $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = \sum_{i=1}^{M+1} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \lambda^3 \sum_{i=1}^M \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^+ + \mathcal{H}_S, \qquad (4.8)$$

onde

$$\mathcal{H}_{S} = \sigma_{M+2}^{+} \sigma_{1}^{-} + \lambda^{3} (\sigma_{M+1}^{-} \sigma_{M+2}^{z} \sigma_{1}^{+} + \sigma_{M+2}^{-} \sigma_{1}^{z} \sigma_{2}^{+})$$
(4.9)

descreve a densidade de Hamiltoniana superficial. A transformação canônica (4.2) fornece, para os termos de superfície,

$$\sigma_{M+2}^{+}\sigma_{1}^{-} = \left(\prod_{j=1}^{M+1}\lambda_{j}\right)^{-1}\tilde{\sigma}_{M+2}^{+}\tilde{\sigma}_{1}^{-} = \lambda^{-(M+1)}\tilde{\sigma}_{M+2}^{+}\tilde{\sigma}_{1}^{-},$$
$$\lambda^{3}\sigma_{M+1}^{-}\sigma_{M+2}^{z}\sigma_{1}^{+} = \lambda^{3}\left(\prod_{j=1}^{M}\lambda_{j}\right)\tilde{\sigma}_{M+1}^{-}\tilde{\sigma}_{M+2}^{z}\tilde{\sigma}_{1}^{+} = \lambda^{M+3}\tilde{\sigma}_{M+1}^{-}\tilde{\sigma}_{M+2}^{z}\tilde{\sigma}_{1}^{+},$$
$$\lambda^{3}\sigma_{M+2}^{-}\sigma_{1}^{z}\sigma_{2}^{+} = \lambda^{3}\left(\prod_{j=1}^{M+1}\lambda_{j}\right)\tilde{\sigma}_{M+2}^{-}\tilde{\sigma}_{1}^{z}\frac{1}{\lambda}\tilde{\sigma}_{2}^{+} = \lambda^{M+3}\tilde{\sigma}_{M+2}^{-}\tilde{\sigma}_{1}^{z}\tilde{\sigma}_{2}^{+}.$$

Portanto, a Hamiltoniana (4.8) pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = \lambda \bigg[\sum_{i=1}^{M+1} \widetilde{\sigma}_i^+ \widetilde{\sigma}_{i+1}^- + \sum_{i=1}^M \widetilde{\sigma}_i^- \widetilde{\sigma}_{i+1}^z \widetilde{\sigma}_{i+2}^+ + \frac{1}{\lambda^{M+2}} \widetilde{\sigma}_{M+2}^+ \widetilde{\sigma}_1^- + \lambda^{M+2} (\widetilde{\sigma}_{M+1}^- \widetilde{\sigma}_{M+2}^z \widetilde{\sigma}_1^+ + \widetilde{\sigma}_{M+2}^- \widetilde{\sigma}_1^z \widetilde{\sigma}_2^+) \bigg].$$
(4.10)

Note que, para $\lambda > 1$ ou $\lambda < 1$, apenas um dos termos de superfície sobrevivem no limite $M \to \infty$. Se tomarmos o caso $\lambda > 1$ e considerarmos uma determinada variação δ , temos

que, no limite do bulk $M \to \infty$, o acoplamento do termo de superfície contribui para uma energia proporcional a

$$\lambda^{M+2} = (1+\delta)^{M+2} \sim 1 + M\delta.$$
(4.11)

Se compararmos esse valor com a contribuição dada pelos acoplamentos dos dois primeiros termos em (4.10), proporcional a 2M, vemos que a razão devido aos termos de superfície com relação ao restante da cadeia é dada por

$$\frac{1+M\delta}{2M} \sim \frac{\delta}{2}, \text{ para } M \to \infty.$$
 (4.12)

Isso nos mostra que os termos de borda contribuem de maneira relevante para a energia do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ periódico. Dessa forma, o modelo com PBC pode possuir uma física distinta daquela presente no modelo com OBC. Conforme veremos adiante, é o que de fato acontece.

4.2 Solução exata do modelo XY com N=3, p=2 e PBC

Nesta seção, estudaremos o caso particular do modelo XY com N = 3, p = 2e PBC. Alguns modelos com interação de três spins já foram relatados na literatura no contexto de redes ópticas (82), emaranhamento térmico (83) e invariância conforme. (84– 85) Aqui, consideramos a cadeia $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ estudando-se suas propriedades críticas bem como as entropias de emaranhamento de blocos de spins.

Considerando a Hamiltoniana (4.8) periódica com L = M + N - 1 sítios, tem-se

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = \sum_{i=1}^{L-1} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \bar{\lambda} \sum_{i=1}^{L-2} \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^+ + \mathcal{H}_S, \qquad (4.13)$$

onde, por simplicidade, redefinimos o acoplamento isotrópico para $\bar{\lambda} = \lambda_i^3$. A densidade de Hamiltoniana superficial \mathcal{H}_S em (4.13) é dada por

$$\mathcal{H}_{S} = \sigma_{L}^{+} \sigma_{1}^{-} + \bar{\lambda} (\sigma_{L-1}^{-} \sigma_{L}^{z} \sigma_{1}^{+} + \sigma_{L}^{-} \sigma_{1}^{z} \sigma_{2}^{+}).$$
(4.14)

Vimos que frente à transformação de Jordan-Wigner (3.24), a Hamiltoniana (4.13) tornase bilinear nos operadores fermiônicos, assumindo a forma

$$\mathcal{H}_M^{XY} = -\sum_{i,j} c_i^{\dagger} \mathbb{A}_{i,j}^{PBC} c_j.$$
(4.15)

com $\mathbb{A}_{i,j}^{PBC}$ sendo a matriz de *hopping* que considera os termos de borda que surgem no caso de condições cíclicas. Podemos determinar a forma da matriz de *hopping* aplicando a transformação de Jordan-Wigner em (4.13) e (4.14). A Hamiltoniana em termos dos operadores fermiônicos $c_i \in c_i^{\dagger}$ é dada por:

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = -\sum_{i=1}^{L-1} c_i^{\dagger} c_{i+1} - \bar{\lambda} \sum_{i=1}^{L-2} c_{i+2}^{\dagger} c_i + \mathcal{H}_S, \qquad (4.16)$$

sendo a densidade de Hamiltoniana de superfície dada por

$$-(-1)^{N_F+1}[c_L^{\dagger}c_1 + \bar{\lambda}(c_1^{\dagger}c_{L-1} + c_2^{\dagger}c_L)].$$
(4.17)

Observe que N_F é o operador de número fermiônico, sendo escrito como

$$N_F = \sum_{j=1}^{L} c_j^{\dagger} c_j.$$
 (4.18)

Como (4.16) é biquadrática nos operadores fermiônicos, temos que $[\mathcal{H}_{3,2}^{XY}, N_F] = 0$, e o espaço de Fock associado à (4.16) pode ser separado em setores disjuntos indexados pelo número de férmions que poderá ser par ou ímpar. Quando N_F for par (ímpar), devido à (4.17), a Hamiltoniana (4.16) descreve férmions em um anel com condições de contorno antiperiódicas (periódicas), i.e.,

$$c_{L+n} = (-1)^{N_F+1} c_n, \ c_{L+n}^{\dagger} = (-1)^{N_F+1} c_n^{\dagger}.$$
 (4.19)

A matriz de hopping em (4.15), facilmente obtida, pode ser escrita como

$$\mathbb{A}_{i,j}^{PBC} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & (-1)^{N_F + 1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & (-1)^{N_F + 1} \\ \bar{\lambda} & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\lambda} & 0 & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 & 1 \\ (-1)^{N_F + 1} & 0 & \cdots & \bar{\lambda} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (4.20)

Diferentemente do caso OBC, a invariância translacional da rede nos induz à introdução de operadores fermiônicos indexados pelos autovalores do operador de translação. Estes operadores são dados por

$$\eta_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^{L} e^{ikj} c_j$$

$$\eta_k^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^{L} e^{-ikj} c_j^{\dagger},$$
(4.21)

que obedecem à álgebra fermiônica

$$\{\eta_k, \eta_{k'}^{\dagger}\} = \delta_{k,k'} \ , \{\eta_k, \eta_{k'}\} = \{\eta_k^{\dagger}, \eta_{k'}^{\dagger}\} = 0,$$
(4.22)

decorrente de (4.21) e da álgebra dos férmions $\{c_i, c_i^+\}$. Estes férmions são análogos aos férmions (3.28) introduzidos no caso de OBC.

Os momentos k que definem os férmions são fixados pela condição de contorno, i.e., tomando a inversa em (4.21), podemos escrever

$$c_{L+n} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=1}^{L} e^{-ik(L+n)} \eta_k = e^{i\pi(N_F+1)} c_n.$$
(4.23)

Para que a expressão acima seja verdadeira, é necessário que $e^{-ikL} = e^{i\pi(N_F+1)}$. Portanto, os possíveis momentos que satisfazem a essa condição são dados por

$$k_j = \begin{cases} 2\pi j/L, & \text{se } N_F \text{ \'e impar} \\ 2\pi (j+1/2)/L, & \text{se } N_F \text{ \'e par}, \end{cases}$$
(4.24)

com

$$j = \begin{cases} -L/2 + 1, ..., 0, ..., L/2, & \text{se } L \text{ é par} \\ -(L-1)/2, ..., 0, ..., (L-1)/2, & \text{se } L \text{ é impar.} \end{cases}$$
(4.25)

Dessa forma, a Hamiltoniana (4.16), levando-se em conta (4.21), será escrita na sua forma diagonal:

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = -\sum_{k_j} (e^{-ik_j} + \bar{\lambda}e^{i2k_j})\eta_{k_j}^{\dagger}\eta_{k_j} = -\sum_{k_j} \Lambda(k_j)\eta_{k_j}^{\dagger}\eta_{k_j}, \qquad (4.26)$$

com a relação de dispersão $\Lambda(k_j)$ sendo dada por^{*}.

$$\Lambda(k_j) = -[\cos k_j + \bar{\lambda}\cos 2k_j] - i[\bar{\lambda}\sin 2k_j - \sin k_j].$$
(4.27)

A presença da interação entre segundos vizinhos origina termos do tipo $\cos(2k)$ e $\sin(2k)$ na relação de dispersão. Note o surgimento de uma parte imaginária devido a não hermiticidade do modelo. A parte real da relação de dispersão, que comandará o decaimento das correlações, é exibida na Fig. 5 para alguns valores de $\overline{\lambda}$. O estado fundamental é aquele com menor energia (no presente caso é real, pela simetria $k \to -k$ na relação de dispersão 4.27). Ele é formado pela soma de todos os modos de Fourier que nos deem $\Lambda(k_j) < 0$. Os pontos de Fermi são os pontos que limitam as quasi-energias negativas. Os momentos k_F são os momentos de Fermi, i.e., os pontos onde $\Lambda(k_F) = 0$.

No presente caso tem-se para $\bar{\lambda} \leq 1$ dois pontos de Fermi localizados em

$$\pm k_F^- = \arccos\left[(-1 + \sqrt{1 + 8\bar{\lambda}^2})/4\bar{\lambda}\right],\tag{4.28}$$

de tal forma que, no caso $\overline{\lambda} = 1$, temos $k_F = \pm \pi/3$. Para $\overline{\lambda} > 1$, além dos pontos de Fermi anteriores, surgem dois novos pontos de Fermi localizados em

$$\pm k_F^+ = \arccos\left[\left(-1 - \sqrt{1 + 8\bar{\lambda}^2}\right)/4\bar{\lambda}\right].$$
(4.29)

Reparemos que o modelo XY dado em (4.13) é crítico para quaisquer valores de $\overline{\lambda}$, pois as excitações acima dos respectivos mares de Fermi (para $\overline{\lambda} \leq 1$ ou $\overline{\lambda} > 1$) produzem lacunas de massa que decaem com $\frac{1}{L^z} \propto \frac{1}{L}$. Assim, para todos os valores de $\overline{\lambda}$ temos o expoente crítico dinâmico z = 1. O fato de que dependendo do valor de $\overline{\lambda}$ temos 2 ou 4 pontos de Fermi nos mostra que a PBC produz efeitos que não estavam presentes na cadeia aberta, como já havíamos previsto (veja a Eq. (4.10) e discussões que se seguem).

^{*} No caso de condições abertas de contorno, por não termos invariância de translação, as quasi-energias eram obtidas diretamente dos autovalores da matriz de *hopping* \mathbb{A} (veja as Eqs. (3.26)-(3.30)).



FIGURA 5 – Espectro real da relação de dispersão obtida para o modelo XY com N=3, p=2 e PBC, considerando diferentes valores de acoplamento $\bar{\lambda}$. As quasi-energias que compõe o EF são aquelas com valores de k dados em (4.24). Em $\bar{\lambda} = 1$ os dois pontos de Fermi estão localizados em $k_F = \pm \pi/3$.

Essa mudança da superfície de Fermi para $\overline{\lambda} > 1$ produz consequências interessantes. Em (61) foi estudado um modelo de férmions livres hermitiano com relação de dispersão energia-momento análoga à (4.27). Naquele caso, há um acoplamento crítico λ_c onde os números de pontos de Fermi mudam, indicando uma transição de fase. Acreditamos que o mesmo ocorra em nosso modelo periódico.

Para caracterizar a possível transição no ponto $\overline{\lambda} = 1$ (onde o número de pontos de Fermi muda) calcularemos a componente z da magnetização por sítio do sistema. A mesma é obtida levando-se em conta o número de pontos de Fermi que compõe o EF. O EF do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ periódico é construído preenchendo-se todos os níveis de energias negativas. Como o modelo é não hermitiano, podemos escrever a autofunção do EF à direita e à esquerda como sendo

$$\langle GS_L | = \langle 0 | \prod_{|k| \le k_F} \eta_k, \ |GS_R \rangle = \prod_{|k| \le k_F} \eta_k^{\dagger} |0\rangle, \qquad (4.30)$$

onde $|0\rangle$ é o estado de vácuo[†]. Note que o EF contém apenas os modos fermiônicos com $|k| \leq k_F$, i.e.,

$$\langle GS_L | \eta_k^{\dagger} \eta_k | GS_R \rangle = \begin{cases} \delta_{kk'}, & \text{se } |k| \le k_F \\ 0, & \text{se } |k| > k_F. \end{cases}$$
(4.31)

A magnetização do sistema, no estado fundamental do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$, é dada por

$$\bar{m}^z = \frac{1}{2L} \sum_{n=1}^{L} \langle GS_L | \sigma_n^z | GS_R \rangle .$$
(4.32)

t

 Como

$$\sum_{n=1}^{L} \sigma_n^z = \sum_{n=1}^{L} (2c_n^{\dagger}c_n - 1) = 2\sum_k (\eta_k^{\dagger}\eta_k - \frac{1}{2}),$$

tem-se de (4.30) que no regime a
) $\lambda \leq 1$

$$\bar{m}^{z} = \frac{1}{L} \sum_{k} \langle GS_{L} | \eta_{k}^{\dagger} \eta_{k} | GS_{R} \rangle - \frac{1}{2} = \frac{1}{L} \frac{L}{2\pi} \int_{-k_{F}^{-}}^{k_{F}^{-}} dk - \frac{1}{2} = \frac{k_{F}^{-}}{\pi} - \frac{1}{2}, \qquad (4.33)$$

enquanto no regime b) $\overline{\lambda} > 1$

$$\bar{m}^{z} = \frac{1}{L} \sum_{k} \langle GS_{L} | \eta_{k}^{\dagger} \eta_{k} | GS_{R} \rangle - \frac{1}{2} = \frac{1}{L} \frac{L}{2\pi} \left[\int_{-\pi}^{-k_{F}^{+}} + \int_{-k_{F}^{-}}^{k_{F}^{-}} + \int_{k_{F}^{+}}^{\pi} \right] dk - \frac{1}{2} = \frac{k_{F}^{-} - k_{F}^{+}}{\pi} - \frac{1}{2},$$
(4.34)

onde passamos a soma dos modos normais para uma integral:

$$\sum_{k} \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int dk. \tag{4.35}$$

Portanto, a magnetização por sítio do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC pode ser escrita como

$$\bar{m}^{z}(\bar{\lambda}) = \frac{1}{2L} \sum_{n} \langle \sigma_{n}^{z} \rangle = \begin{cases} k_{F}^{-}/\pi - 1/2, & \text{em } \bar{\lambda} \leq 1\\ (k_{F}^{-} - k_{F}^{+})/\pi - 1/2, & \text{em } \bar{\lambda} > 1 \end{cases}.$$
(4.36)

Usando as equações (4.28) e (4.29), encontramos que o EF do sistema é singleto, com $\bar{m}^z = 0$, apenas nos limites em que $\bar{\lambda} \to 0$ e $\bar{\lambda} \to \infty$. Para um acoplamento arbitrário $\bar{\lambda}$ diferente de zero, a magnetização do sistema é finita. O gráfico da magnetização $\bar{m}^z(\bar{\lambda})$ é mostrado na Fig. 6. $\bar{m}^z(\bar{\lambda})$ é uma função monotonicamente decrescente com o parâmetro $\bar{\lambda}$ no intervalo $0 < \bar{\lambda} < 1$. Seu valor mínimo é atingido em $\bar{\lambda} = 1$ com $\bar{m}^z = -1/6$, com um aumento monotônico que tende assintoticamente para zero conforme $\bar{\lambda} \to \infty$. Esse comportamento sugere a presença de um rico diagrama de fase no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$. Notemos que a magnetização do sistema é negativa para $\bar{\lambda}$ arbitrário. Isto pode ser entendido a partir da Hamiltoniana (4.13). O acoplamento $\bar{\lambda}$ nos dá termos cinéticos que são favorecidos (contribuições negativas) nos spins dos sítios i, i + 2 quando mediados por um spin no sítio i + 1 que tenha magnetização local negativa.

Reparemos que o parâmetro $\overline{\lambda}$ no regime $\overline{\lambda} < 1$ desempenha o papel de um campo magnético na direção $-\hat{z}$ que troca de sinal em $\overline{\lambda} = 1$. Para $0 < \overline{\lambda} \leq 1$ é fácil entender que a magnetização decresça com $\overline{\lambda}$, pois para se ter mudanças de magnetização nos sítios i, i+2 é necessário que o sítio i+1 esteja vazio. Contudo, para $\overline{\lambda} > 1$, surpreendentemente, o sistema prefere uma densidade maior de spins $\sigma^z = 1$. Fato similar foi relatado em um modelo fermiônico hermitiano. (61) Da mesma forma que em (61), um possível cenário para o entendimento dos distintos comportamentos para $\overline{\lambda} > 1$ e $\overline{\lambda} < 1$ é obtido a partir da probabilidade de formação de blocos de buracos (*Emptiness Formation Probability* (EFP) (86))

$$P(n) = \langle GS_L | \prod_{j=1}^n (1 - \sigma_j^z) | GS_R \rangle.$$

$$(4.37)$$

Calculando-se em pontos com mesma magnetização média nas regiões $\overline{\lambda} > 1$ e $\overline{\lambda} < 1$, o valor dos primeiros momentos de P(n), i.e.,

$$\bar{p}^{1}(\bar{\lambda}) = \frac{\sum nP(n)}{\sum P(n)},\tag{4.38}$$

revela que na região $\bar{\lambda} > 1$ a EFP é menor que nos pontos correspondentes para $\bar{\lambda} < 1$. Como mostrado em (61), este efeito é crescente conforme $\bar{\lambda}$ cresce. Assim, podemos visualizarmos o ponto $\bar{\lambda} = 1$ como um ponto onde a presença de blocos de buracos tendem a ser favorecidos conforme $\bar{\lambda}$ aumenta até este ponto.



FIGURA 6 – Parte real da magnetização do EF como função do acoplamento $\bar{\lambda}$ para o modelo XY com N=3, p=2 e PBC. No *inset* é exibido a derivada da magnetização \bar{m}^z em relação à anisotropia $\bar{\lambda}$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

No *inset* da Fig. 6 é exibido a derivada da magnetização em relação ao parâmetro $\bar{\lambda}$, que exibe uma descontinuidade em $\bar{\lambda} = \bar{\lambda}_c = 1$ e corrobora a presença de uma mudança de fase no modelo.

4.2.1 Energia do EF no ponto isotrópico $\overline{\lambda} = 1$

Considerando uma rede com um número par de sítios e N_F o número de férmions do EF, observamos na seção anterior que podemos construir este estado preenchendo todos os níveis de energia negativa. Como sabemos, o maior nível ocupado é chamado de nível de Fermi. O número de partículas do EF pode ser facilmente calculado sendo dado por

$$N_F^{\langle GS \rangle} = \langle GS_L | \sum_{i=1}^L c_i^{\dagger} c_i | GS_R \rangle = \sum_{k \le |k_F|} \langle GS_L | \eta_k^{\dagger} \eta_k | GS_R \rangle = \sum_{k \le |k_F|} \theta(|k_F| - k) = \frac{L}{3}, \quad (4.39)$$

onde usamos a substituição (4.35).

Verificamos que para o presente caso de L par, o número de quasi-energias negativas é também par. Assim, a energia do EF é obtida somando-se os valores de momentos $k_j = \frac{2\pi}{L}(j+1/2) \text{ com } j \in [-L/2+1, ..., L/2], \text{ i.e.},$

$$E_0(L) = \sum_{|k| \le \frac{\pi}{3}} \Lambda_{k_j}.$$
 (4.40)

Observe que a relação de dispersão $\Lambda(k_j)$ possui uma estrutura simples, portanto, a soma (4.40) pode ser feita analiticamente para $\overline{\lambda} = 1$, resultando em

$$E_0(L) = -\frac{\sqrt{3}}{2} \left[\csc\left(\frac{\pi}{L}\right) + \csc\left(\frac{2\pi}{L}\right) \right].$$
(4.41)

Tomando o limite $L \to \infty$, $E_0(L)$ comporta-se como

$$\frac{E_0(L)}{L} = -\frac{3\sqrt{3}}{4\pi} - \frac{3\sqrt{3}}{2}\frac{\pi}{6L^2} + \mathcal{O}(L^{-3}).$$
(4.42)

Decorre que a energia específica é:

$$e_{\infty} = -\frac{3\sqrt{3}}{4\pi} = -0,413497. \tag{4.43}$$

É interessante salientar que a mesma é idêntica àquela obtida por Alcaraz e Pimenta para o modelo de paraférmions livres Z(3) e seu corresponde modelo XY dado em (4.63) para o caso OBC. (46) Isto não é verdade para os modelos parafermiônicos Z(N) de Baxter $(p = 1, N \ge 2)$ onde os casos periódico e aberto possuem uma energia específica distinta, provavelmente devido a efeitos topológicos não presentes na versão XY estendida que calculamos.

Os estados excitados para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ em $\bar{\lambda} = 1$ possuem uma estrutura especial. A fim de melhor visualizarmos as excitações reproduzimos na Fig. 7 a Fig. 5 tomando-se uma nova zona de Brillouin[‡]. Vemos que acima do EF, temos quatro ramos de excitações onde dois deles ocorrem em torno de k_F^- , produzindo ramos cujas lacunas de massa possui decaimento da ordem de O(1/L) com o tamanho do sistema, i.e.,

$$E_{exc}^r - E_0 \propto O(1/L), \ r = 1, 2.$$
 (4.44)

Os outros dois ramos de excitações que ocorrem no entorno de $k_F^* = \pi$ exibirá um decaimento da ordem de $O(1/L^2)$ com o tamanho do sistema, i.e.,

$$E_{exc}^{(r)} - E_0 \propto O(1/L^2), \ r = 3, 4.$$
 (4.45)

Este é um efeito que ocorre somente no modelo crítico com $\bar{\lambda} = 1$. Para o caso em que $\bar{\lambda} > 1$, o decaimento será da ordem de O(1/L) como nos ramos r = 1, 2. Para ver isto,

[‡] Observe que esta nova zona de Brillouin se inicia no ponto de momento k que é solução da equação $\frac{d\Lambda(k)}{dk} = 0.$



FIGURA 7 – Possíveis ramos de excitações no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC e $\bar{\lambda} = 1$. Os círculos preenchidos representam partículas enquanto os círculos vazios representam os buracos. Os ramos 1 e 2 decaem com (1/L) e os ramos 3 e 4 decaem com $(1/L^2)$.

notemos que para $\bar{\lambda} > 1$ surgem novos pontos de Fermi em $k = \pm k_F^+$, sendo $k_F^+ < \pi$ para $\bar{\lambda} > 1$. A expansão no entorno de $\pm k_F^+$ nos dará para L grande a menor quasi-energia de excitação

$$Re[\Lambda(k)] = \sin(k_F^+)\frac{2\pi}{L} + \bar{\lambda}\sin(2k_F^+)\frac{4\pi}{L} + O(1/L^2).$$
(4.46)

Como $k_F^+(\bar{\lambda}) < \pi$ para $\bar{\lambda} > 1$ e $k_F^+(\bar{\lambda}) = \pi$ para $\bar{\lambda} = 1$, vemos que somente no caso isotrópico $\bar{\lambda} = 1$ as excitações têm comportamento dominante da ordem de $O(1/L^2)$. Nos demais casos $(\bar{\lambda} > 1)$, os quatro ramos possuem excitações relativísticas de decaimento O(1/L). Conforme veremos adiante (capítulo 5) tais ramos indicam que o modelo tem a sua física de baixas energias descritas por uma CFT com carga central c = 2.

Especificamente no caso em que $\bar{\lambda} = 1$, as excitações dos ramos 3 e 4 produzirão degenerescências adicionais nos ramos relativísticos 1 e 2, degenerescências estas extensivas com o tamanho do sistema. Para visualizarmos este fato mostramos na Fig. 8 a primeira excitação do ramo relativístico 2 e algumas do ramo "clássico" 3. Vemos que a primeira excitação do ramo 2 é precedida por várias excitações com valores menores no ramo 3. A medida que *L* cresce, as excitações dos ramos clássicos mudarão a degenerescência da excitação relativística dos ramos 1 e 2. Para visualizarmos o comportamento da teoria conforme adjacente no caso $\bar{\lambda} = 1$, nos ateremos simplesmente aos ramos conformes 1 e 2 (veja a Fig. 7), esquecendo-se as degenerescências produzidas pelos ramos clássicos 3 e 4.

A velocidade do som v_s pode ser computada diretamente a partir da relação de dispersão energia-momento do modelo. (87) As menores excitações, no setor de magne-



FIGURA 8 – Primeira excitação do ramo relativístico 2 e possíveis excitações nos ramos clássicos 3 e 4. Observa-se que a primeira excitação no ramo relativístico 2 é precedida de várias excitações nos ramos 3 e 4.

tização onde ocorre o EF, possuem momentos $P = \pm 2\pi/L$. Estas excitações são obtidas substituindo-se, na distribuição fermiônica do EF, o férmion com momento $\pm \frac{\pi}{3} \mp \frac{\pi}{L}$ pelo férmion com momento $\pm \frac{\pi}{3} \pm \frac{\pi}{L}$. Isto fornece uma energia dada por

$$E_P - E_0 = 2Re\left[\Lambda\left(\frac{\pi}{3} + \frac{\pi}{L}\right)\right] = \frac{3\sqrt{3}}{2}\frac{2\pi}{L} + O(L^{-2}) = v_s P + O(L^{-2}), \qquad (4.47)$$

donde temos

$$v_s = \frac{3\sqrt{3}}{2}.$$
 (4.48)

Caso a cadeia quântica seja conformalmente invariante, o comportamento assintótico com o tamanho do sistema, dado em (2.31), nos indicaria de (4.42) e (4.48) que teríamos a anomalia conforme c = 1. Tal fato mostraria que a carga central é a unidade no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ e que o modelo pertence à mesma classe de universalidade dos líquidos de Luttinger e do modelo Gaussiano. (57) No capítulo 5 verificaremos tal fato explorando as propriedades de emaranhamento de blocos de spins no EF. A Eq. (4.47) também concorda com a previsão da invariância conforme (2.33),

$$E_P - E_0 = \frac{2\pi v_s x_\epsilon}{L} + o(L^{-1}), \qquad (4.49)$$

donde é possível extrair a dimensão do operador energia, dada por $x_{\epsilon} = 1$.

A fim de corroborarmos a expressão analítica dada em (4.42), analisaremos diretamente os efeitos de tamanho finito da energia do EF. Isto pode ser feito pela diagonalização numérica do Hamiltoniano no setor de partícula única. Exibimos na Fig. 9 o comportamento da energia do EF por sítio de $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ para uma cadeia com até L = 2400 sítios. Observe que $E_0(L)/L$ possui um comportamento assintótico linear com L^{-2} e, conforme a previsão analítica (4.42), temos 1,359 $\approx \sqrt{3}\pi/4$. Além disso, os coeficientes obtidos a partir do ajuste linear concordam com os valores exatos para a energia específica e para a velocidade do som.



FIGURA 9 – Dependência da energia específica do EF, E_0/L , em função de $1/L^2$ para $\bar{\lambda} = 1$. A linha contínua representa o ajuste aos dados obtidos.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Ainda para um teste numérico de (4.49), mostramos na Fig. (10) a lacuna de massa no setor com mesma magnetização que o EF do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ para uma cadeia de até L = 300 sítios e PBC. A dependência linear com 1/L, que indicaria um expoente crítico dinâmico z = 1 (veja (3.18)), é também exibida. Notemos que a previsão do expoente crítico dinâmico z = 1 obtida no caso de OBC (47) é confirmada também para o caso periódico. É esperado que para cadeias de tamanhos maiores, o expoente crítico se aproxime do valor exato z = 1, como conjecturado por Alcaraz e Pimenta em. (47) Além disso, veremos que essa mesma dependência de tamanho finito será observada no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC, devido à conexão deste com o modelo parafermiônico Z(3) com p = 2. (1) De fato, no limite de uma cadeia muito grande (onde os acoplamentos superficiais tornam-se irrelevantes), a lacuna de massa deve se comportar de forma semelhante no ponto isotrópico $\bar{\lambda} = 1$ em ambos os modelos. No *inset* da Fig. 10 exibimos a predição da velocidade do som v_s do modelo à medida que aumentamos o tamanho da cadeia. Como esperado, o valor obtido se aproxima cada vez mais do valor exato (4.48) conforme Lcresce. Como exemplo, em L = 300 encontramos o valor de $v_s = 2,5979 \approx 3\sqrt{3}/2$.



FIGURA 10 – Dependência da lacuna de massa $E_P - E_0$ em função do tamanho da cadeia no setor de mesma magnetização do EF do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC e acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. No *inset* da figura é exibido o comportamento da velocidade do som $v_s(L)$ a medida que o tamanho da cadeia aumenta.

4.2.2 Estados excitados no regime $\bar{\lambda} = 1$

Na seção anterior discutimos a menor excitação no setor do EF, onde o número de partículas permaneceu fixo. A próxima excitação pode ser obtida adicionando-se uma partícula ao EF. Os $N_F = 1 + \frac{L}{3}$ férmions de menores energias são aqueles com momento $\Omega = \{-\frac{\pi}{3}, -\frac{\pi}{3} + \frac{2\pi}{L}, ..., \frac{\pi}{3} - \frac{2\pi}{L}, \frac{\pi}{3}\}$, que dá um autoestado de momento zero e energia

$$E_1 = \sum_{k \in \Omega} \Lambda_{k_j} = \frac{\sqrt{3}}{4} \left[1 - 2 \cot^2 \left(\frac{\pi}{L} \right) \right] \tan \left(\frac{\pi}{L} \right).$$
(4.50)

Note que, no limite para L grande, podemos escrever

$$E_1 = E_0 + \frac{2\pi}{L} v_s X + O(L^{-2}), \qquad (4.51)$$

onde X = 1/4. Comparando esta última expressão com a previsão do comportamento assintótico de tamanho finito predito em (2.33) e (2.34) para cadeias conformalmente invariantes, vemos que a energia E_1 estaria associada ao menor nível j = j' = 0 da torre conforme correspondente ao operador primário de spin $s_{\alpha} = 0$ (escalar) e dimensão $x_{\alpha} = 1/4$. Observemos que esta é a mesma dimensão que ocorre no modelo XY padrão (58) e naquele caso corresponde à dimensão do operador polarização. No presente caso dar-se-á o mesmo, já que a magnetização de E_1 difere daquela do EF pela unidade.

De modo geral, os estados excitados de energias mais baixas podem ser obtidos adicionando-se simetricamente Q partículas com os menores momentos desocupados e

próximas à $\pm k_F^{-\S}$. O conjunto de momentos ocupados passa agora a ser descrito por

$$k = \begin{cases} \pm \frac{\pi}{L}, \pm \frac{3\pi}{L}, \dots, \pm \left(k_F + \frac{Q\pi}{L}\right), & \text{para } Q \text{ par} \\ 0, \frac{2\pi}{L}, \dots, \pm \left(k_F + \frac{Q\pi}{L}\right), & \text{para } Q \text{ impar}, \end{cases}$$
(4.52)

e a energia desse setor com $\mathcal{N} = N_F + Q$ partículas pode ser facilmente obtida,

$$E_Q(L) = \sum_{k=-k_F - \frac{Q\pi}{L}}^{k=k_F + \frac{Q\pi}{L}} \Lambda_{k_j} = -\frac{\sqrt{3}}{4} \left[2\cos\left(\frac{\pi}{L}\right)\cos\left(\frac{Q\pi}{L}\right) + \cos\left(\frac{2\pi Q}{L}\right) \right] \csc\left(\frac{\pi}{L}\right) \sec\left(\frac{\pi}{L}\right).$$

No limite para L grande, $E_Q(L)$ pode ser escrita como

$$E_Q(L) = E_0 + \frac{2\pi}{L} v_s Q^2 X + O(1/L^2) = E_0 + \frac{2\pi}{L} v_s X_{Q,0} + O(1/L^2),$$
(4.53)

com $X_{Q,0} = Q^2 X$. Torres adicionais podem ser obtidas inserindo um número igual $|\beta|$ de partículas e buracos, com momentos opostos, na configuração fermiônica de menor energia da torre X_Q . O sinal positivo (negativo) de β é obtido quando inserimos uma partícula com momento positivo (negativo). Os autoestados dessas excitações podem ser escritos como

$$|Q,\beta\rangle = \prod_{k=-k_F-\frac{2\pi}{L}(\frac{Q}{2}+\beta)}^{k=k_F+\frac{2\pi}{L}(\frac{Q}{2}+\beta)} \eta_k^{\dagger} |0\rangle, \qquad (4.54)$$

cuja energia e o momento são dados por

$$E_{Q,\beta} - E_0 = \frac{2\pi}{L} v_s \left[Q^2 X + \frac{\beta^2}{4X} \right]$$
 (4.55)

е

$$P_{Q,\beta} = P_0 + \frac{2\pi}{L} Q\beta, \qquad (4.56)$$

onde, comparando com (4.53), podemos identificar

$$X_{Q,\beta} = Q^2 X + \frac{\beta^2}{4X}.$$
 (4.57)

As dimensões conformes dadas em (4.57) são similares às dimensões anômalas do modelo Gaussiano, derivadas por Kadanoff e Brown. (57) Este, por sua vez, possui carga central unitária e dimensões conformes dadas por

$$X_{Q,\beta}^{(G)} = \pi K Q^2 + \frac{\beta^2}{4\pi K}, \quad (Q,\beta = 0,\pm 1,\pm 2,...),$$
(4.58)

onde Q é a vorticidade, β o número de ondas de spins e K é a constante de acoplamento Gaussiana (ou parâmetro de Luttinger). A equivalência de (4.57) com (4.58) nos diz que a constante K da teoria Gaussiana é dada por $K = X/\pi = 1/4\pi$. Além disso, como

 $[\]overline{\ensuremath{\S}\xspace}$ De modo análogo, pode-se remover Q partículas do EF e, neste caso, Q < 0.

esperado para uma teoria com carga central c = 1, observamos a existência de infinitos pesos conformes no modelo[¶].

Os estados dados nas Eqs. (4.55) e (4.56) representam a base das torres de energia previstas pela CFT. Elas fornecem as dimensões x_n e o spin s_α dos operadores primários da teoria. As altas energias da torre conforme $E_{Q,\beta}^{j,j'}$ (j, j' = 0, 1, 2, ...) associadas com os operadores descendentes da CFT podem ser geradas saltando a partícula mais próxima do ponto de Fermi em $\frac{2\pi j}{L}$ $(\frac{2\pi j'}{L})$ momentos para à direita (esquerda). Note que a excitação de menor energia no setor do EF é obtida inserindo-se j = 1 e j' = 0, cujo operador primário é o operador identidade I. Na Fig. 11 são exibidas diferentes excitações que podem ocorrer nos setores Q = 0 e Q = 2.



FIGURA 11 – Diferentes excitações no setor Q = 0 e Q = 2 do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC e acoplamento uniforme $\bar{\lambda} = 1$. Círculos preenchidos (vazios) representam estados ocupados (desocupados). a) Excitação obtida removendo $\beta = 1$ partícula de maior energia do lado esquerdo e b) saltando a partícula em uma unidade de $\frac{2\pi j}{L}$, com j = 1. c) Excitação obtida removendo uma partícula, $\beta = -1$, de maior energia do lado direito e saltando a partícula em uma unidade de $\frac{2\pi j'}{L}$, com j' = 1. d) Distribuição fermiônica com $\mathcal{N} = 2 + \frac{L}{3}$ e $\beta = 0$. Note que as partículas são adicionadas simetricamente. e) e f) representam excitações no setor Q = 2 para $\beta = -2$ e $\beta = 2$, respectivamente, com j = j' = 0.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Isto está relacionado ao fato do modelo ser descrito como uma álgebra mais abrangente que a de Virasoro, a álgebra de Kac-Moody. (88)

Como evidenciado na Fig. 11 b) e c), as energias e os momentos obtidos saltando as partículas em j ou j' unidades de momento são dados, respectivamente, por

$$E_{Q,\beta}^{j,j'} - E_0 = \frac{2\pi v_s}{L} (X_{Q,\beta} + j + j') + O(L^{-2}), \qquad (4.59)$$

е

$$P_{Q,\beta}^{j,j'} - P_0 = \frac{2\pi}{L} (Q\beta + j - j').$$
(4.60)

resgatando, assim, a previsão da invariância conforme (62).

A degenerescência das excitações geradas a partir de j e j' são obtidas a partir da função geradora (2.35). Por exemplo, no caso em que j = 4, as possíveis configurações geradas são p(4) = 5 vezes degeneradas^{||}, i.e., há 5 possíveis maneiras de saltar as partículas mais energéticas: (i) saltar a partícula mais energética em quatro unidades de momento para à direita; (ii) saltar as quatro partículas mais energéticas em uma unidade de momento cada; (iii) saltar a partícula mais energética em três unidades de momento para à direita e a segunda mais energética em uma unidade; (iv) saltar as duas partículas mais energéticas em duas unidades de momento cada e (v) saltar a partícula mais energética em uma unidade de momento e depois saltar a segunda e a terceira mais energética em uma unidade de momento cada. Dessa forma, podemos obter a degenerescência completa das excitações em um dado setor do modelo.

Utilizando (4.59) podemos obter a menor dimensão anômala (com j = j' = 0) nos setores $Q = 0, 1 \in 2$. No setor Q = 0, vimos que a menor dimensão é a do operador energia x_{ϵ} que esperamos ser igual a $x_{\epsilon} = 1$. Essa dimensão pode ser obtida a partir da menor excitação, ou seja,

$$x_{\epsilon}(L) = \frac{L(E_{0,1} - E_0)}{2\pi v_s} \tag{4.61}$$

onde v_s é a previsão da velocidade do som obtida analiticamente e verificada através do ajuste linear da Fig. (9). A Tab. 1 exibe uma verificação numérica do valor obtido para x_{ϵ} à medida que aumentamos o tamanho da cadeia. Como esperado, o valor para L grande concorda com o valor previsto pela CFT com $x_{\epsilon} = 1$.

No setor Q = 1, vimos que a menor dimensão anômala possui o valor $x_1 = 1/4$ com j = j' = 0. Essa dimensão pode ser verificada numericamente através da razão

$$x_1(L) = \frac{E_{1,0} - E_0}{E_{0,1} - E_0}.$$
(4.62)

Observe que ao dividirmos a expressão acima por $E_{0,1} - E_0$ estamos eliminando o fator $2\pi v_s/L$. Na Tab. 2 exibimos a dependência dos valores numéricos de x_1 , estimados para os vários tamanhos da cadeia.

Por fim, na Tab. 3 exibimos a menor dimensão anômala no setor Q = 2 (j = j' = 0). Através da expressão (4.57) (com $\beta = 0$), podemos observar que o valor exato é dado por $x_2 = Q^2 x_1 = 1$.

Há cinco maneiras distintas de escrever o número 4 (1+1+1+1, 1+2, 1+3, 1+1+2, 2+2).

TABELA 1 – Parte real da menor dimensão anômala $x_{\epsilon}(L)$ do operador energia em função do tamanho da cadeia L para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC e no regime de acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. O valor exato é dado por $x_{\epsilon} = 1$.

L	$x_{\epsilon}(L)$	L	x_{ϵ}
3	0.5517	30	0.9952
6	0.8702	60	0.9993
9	0.9410	120	1.0004
15	0.9789	240	1.0007

Fonte:	Elaborada	pelo	autor.
--------	-----------	------	--------

TABELA 2 – Parte real da menor dimensão anômala $x_1(L)$ no setor Q = 1 (j = j' = 0) em função do tamanho da cadeia L para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC e no regime de acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. O valor exato é dado por $x_1 = 1/4$.

L	$x_1(L)$	L	x_1
3	0.5000	30	0.2514
6	0.2887	60	0.2503
9	0.2660	120	0.2501
15	0.2556	240	0.2500

TABELA 3 – Parte real da menor dimensão anômala $x_2(L)$ no setor Q = 2 (j = j' = 0) em função do tamanho da cadeia L para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC e no regime de acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. O valor exato é dado por $x_2 = 1$.

L	$x_2(L)$	L	x_2
3	0.6667	30	0.9445
6	0.7887	60	0.9711
9	0.8440	120	0.9852
15	0.8973	240	0.9925

Fonte: Elaborada pelo autor.

Portanto, analisando o comportamento assintótico de tamanho finito das menores excitações nos setores Q = 0, 1 e 2, confirmamos a previsão da existência de parte do espectro da invariância conforme para as dimensões anômalas do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ periódico. Convém notar que a análise foi realizada apenas para a parte real das dimensões anômalas e elas concordam perfeitamente com as dimensões já obtidas para modelos com carga central c = 1. (58,87)

4.3 Solução exata do modelo XY com N=3, p=2 e OBC

O caso N = 3 e p = 2 produz a primeira Hamiltoniana não hermitiana em (3.19) que vimos, na geometria de cadeia fechada (PBC), ter um comportamento assintótico com o tamanho do sistema, típico de modelos conformalmente invariantes **. A Hamiltoniana com OBC possui um termo de interação de três corpos, sendo dada por

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = \sum_{i=1}^{M+1} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \bar{\lambda} \sum_{i=1}^M \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^+, \qquad (4.63)$$

onde L = M + 2 é o número de sítios da rede. Conforme vimos, a transformação de Jordan-Wigner (3.24) produz a Hamiltoniana fermiônica bilinear

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = -\sum_{i,j=1}^{M+2} c_i^{\dagger} \mathbb{A}_{ij} c_j, \qquad (4.64)$$

sendo a matriz de hopping \mathbb{A} , com elementos \mathbb{A}_{ij} , dada por

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \bar{\lambda} & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\lambda} & 0 & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & \bar{\lambda} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
(4.65)

onde consideramos os acoplamentos uniformes, i.e., $\{\lambda_j^3 = \bar{\lambda}\}$. Os autovalores de \mathbb{A} nos darão as quasi-energias Λ_l (l = 1, 2, ..., M + 2) dos modos fermiônicos. Estas, por sua vez, são determinadas pelas raízes de $det(\mathbb{A} - \Lambda \mathbb{1})$, que a menos dos modos de energia zero, podem ser equivalentemente obtidas pelas raízes z_i (i = 1, ..., M + 2) do polinômio característico

$$P_M(u) = \det(\mathbb{1} - \mathbb{A}u), \ P_M(u_i) = 0,$$
 (4.66)

com $\Lambda_i = 1/u_i$. Aplicando-se a regra dos cofatores de Laplace para determinantes nas últimas colunas e linhas da matriz \mathbb{A} , podemos obter a relação de recorrência

$$P_M(z) = P_{M-1}(z) - \bar{\lambda} z P_{M-3}(z), \qquad (4.67)$$

onde $z = (1/\Lambda)^3$ e

$$P_l(z) = 1, \text{ para } l \le 0.$$
 (4.68)

Como um exemplo das equações acima, podemos considerar uma cadeia com L = 10 sítios e, portanto, M = 8. Neste caso, temos que a relação de recorrência (4.67) produz os polinômios exibidos na Tab. (4) no caso $\bar{\lambda} = 1$. O polinômio característico $P_8^3(z)$ possui grau

$$\left\lfloor \frac{M+N-1}{p+1} \right\rfloor = 3, \tag{4.69}$$

^{**} Como observado por Alcaraz e Pimenta, espera-se que os modelos XY com N = p + 1interações multispin sejam invariantes conformes na criticalidade. (47)

TABELA 4 – Exemplos de polinô	mios	para o caso N=3 com a	coplamentos con	stantes $\{\bar{\lambda}=1\}.$
:	M	$P_M^3(z)$		

Fonte: Elaborada pelo autor.

correspondente a

$$P_8(z) = 1 - 8z + 15z^2 - 4z^3. ag{4.70}$$

As raízes desse polinômio são facilmente obtidas e são dadas por

 $z_1 = 0, 18785, \quad z_2 = 0, 42411, \quad z_3 = 3, 13805.$ (4.71)

As quasi-energias serão dadas por

$$\Lambda_{i,l} = e^{i\frac{2\pi l}{3}}\epsilon_i, \ \ \text{com} \ l = 0, 1, 2, \tag{4.72}$$

e $\epsilon_i = 1/z_i^{1/3}$, ou seja,

 $\epsilon_1 = 1,7461, \ \epsilon_2 = 1,3310, \ \epsilon_3 = 0,6830.$ (4.73)

Observe que a menor quasi-energia está associada com a maior raiz do polinômio. Na Tab. (5), exibimos as quasi-energias fermiônicas não nulas obtidas a partir de (4.72) e (4.73). De (3.37) vemos que existe ainda um modo de energia zero adicional, pois $N_z = 1$, dando um total de 10 autovalores de (4.65). Dessa forma, tomando-se todas as combinações das quasi-energias, conseguimos obter as 2^{10} energias do modelo XY com N = 3 e p = 2.

TABELA 5 – Quasi-energias de partícula única para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ e $\omega = \exp(i2\pi/3)$. Essas quasi-energias fermiônicas estão relacionadas com aquelas do modelo de paraférmions livres Z(3) de Baxter com 3 interações multispin.

\overline{k}	$-\Lambda_{1,k}$	$-\Lambda_{2,k}$	$-\Lambda_{3,k}$
0	$\epsilon_1 = 1,7461$	$\epsilon_2 = 1,3310$	$\epsilon_3 = 0,6830$
1	$\epsilon_1 \omega = -0,8731 + 1,5122i$	$\epsilon_2 \omega = -0,6655 + 1,1527i$	$\epsilon_3 \omega = -0,3415 + 0,5915i$
2	$\epsilon_1 \omega^2 = -0,8731 - 1,5122i$	$\epsilon_2 \omega^2 = -0,6655 - 1,1527i$	$\epsilon_3 \omega^2 = -0,3415 - 0,5915i$

Fonte: Elaborada pelo autor.

As quasi-energias do modelo parafermiônico Z(3) com p = 2 são também dadas pelas raízes do polinômio P(z) que obedecem a mesma relação de recorrência (4.67) e (4.68). Dessa forma, as energias não nulas deste modelo Z(N) estão contidas nas do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ dado em (4.63). As 2⁹ energias não nulas obtidas no exemplo anterior para o modelo XY são dadas por

$$E_{s_l}^{(l)} = -\sum_{k=1}^3 s_k \Lambda_{k,l}, \qquad (4.74)$$

com $s_k = 0, 1, l = 0, 1, 2$ e $\Lambda_{k,l}$ dado em (4.72). Essas energias possuem entre elas as 3^3 energias do modelo parafermiônico Z(3) com p = 2, dadas por

$$E_{t_k} = -\sum_{i=1}^{3} \omega^{t_i} \frac{1}{z_i^{1/3}},\tag{4.75}$$

com $t_k = 0, 1, 2$. Veja a Fig. 4 para o caso de somente uma raiz do polinômio.

4.3.1 *Gaps* de energia e o expoente crítico dinâmico

Para encontrar a excitação de menor energia, devemos determinar a maior raiz dos polinômios dados em (4.67) e (3.34). Isso pode ser feito de maneira prática através do método de Newton, onde as raízes de um polinômio P(z) são obtidas a partir da iteração

$$z^{i+1} = z^{i} - \frac{P(z^{(i)})}{P'(z^{(i)})}, \quad i = 0, 1, ...,$$
(4.76)

sendo z^0 um chute inicial. O êxito desse método depende de dois fatores importantes: (i) um bom valor inicial z^0 para a maior raiz e (ii) uma maneira precisa e eficiente para calcular P(z) para valores de z em torno da maior raiz. Como verificado em (1,46,89), o polinômio característico para o modelo XY com interações multispin possui apenas raízes reais e, consequentemente, podemos utilizar o *Laguerre bound* (LB) como um excelente valor inicial para a maior raiz (constate o corolário 6.2.4 da Ref. (90)). Para os polinômios definidos em (3.11), i.e.,

$$P_M(z) = \sum_{\ell=0}^{\bar{M}} C_M(\ell) z^{\ell}, \qquad (4.77)$$

a LB para a maior raiz é dado por (90)

$$z_{+} = -\frac{y_{1}}{\bar{M}} + \frac{\bar{M} - 1}{\bar{M}} \sqrt{y_{1}^{2} - 2\left(\frac{\bar{M}}{\bar{M} - 1}\right)y_{2}},$$
(4.78)

onde

$$y_1 = \frac{C_M(\bar{M}-1)}{C_M(\bar{M})}, \quad y_2 = \frac{C_M(\bar{M}-2)}{C_M(\bar{M})},$$
(4.79)

e como antes, temos

$$\bar{M} = \left\lfloor \frac{M+2}{3} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{L}{3} \right\rfloor.$$
(4.80)

Note que o LB necessita apenas dos três últimos coeficientes do polinômio característico. Isto se mostra como uma vantagem numérica com relação a outros *bounds* da literatura que demandam o conhecimento de todos os coeficientes do polinômio. Como veremos,
além de ser um bom chute inicial para a maior raiz do polinômio característico, a raiz aproximada dada pelo LB em (4.78) e (4.78) também possui a mesma dependência com o tamanho finito da maior raiz exata do polinômio, fornecendo assim uma estimativa analítica para o expoente crítico dinâmico do modelo.

Na Fig. 12 exibimos a lacuna de massa em função do tamanho da rede L. A lacuna de massa estimada via LB também é exibida. No ponto isotrópico vimos que no caso periódico a lacuna de massa possui o seguinte comportamento assintótico com o tamanho da rede $\Delta \sim L^{-z}$. Dessa forma, o expoente crítico z = 1 (veja Eq. (3.18)) pode ser obtido. Esse expoente é facilmente obtido mediante um ajuste linear para as lacunas de massa da Fig. 12. Os resultados obtidos usando-se a raiz aproximada do LB e aquela obtida numericamente são: z = 0,99239 e $z_{LB} = 0,99283$, indicando o valor exato z = 1, como no modelo XY padrão invariante conforme (N = 2 e p = 1). O modelo definido por N = 3 e p = 2 é o primeiro modelo na série onde recuperamos esse resultado. De fato, como observado por Alcaraz e Pimenta (1), os modelos dados por N = p + 1 possuem um expoente crítico z unitário e espera-se que sejam invariantes conformes. De fato, isso se confirmou no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e PBC. Note que as lacunas de



FIGURA 12 – Lacunas de massa Δ e o LB estimado Δ_{LB} para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC, acoplamento ($\bar{\lambda} = 1$) e tamanhos de cadeia L = 30, 60, ..., 12000. As lacunas de massa estão associadas com a menor excitação no setor do EF do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ na cadeia aberta (veja Fig. 2).

Fonte: Elaborada pelo autor.

massa obtidas diretamente do LB para a maior raiz dos polinômios característicos, não apenas estão próximas dos valores exatos das maiores raízes, mas também têm o mesmo comportamento assintótico com o tamanho da cadeia. No caso de sistemas críticos com acoplamentos uniformes, o LB nos dá estimantes para o expoente crítico dinâmico que coincidem com o valor exato.

4.3.2 Predições oriundas da invariância conforme

Como mencionamos na seção 2.5, a energia do EF em uma cadeia crítica com OBC, que tenha a sua física a longas distâncias descritas por teorias de campos conformes, deve seguir assintoticamente $(L \to \infty)$ um comportamento dado por (59,62)

$$E_0(L) = \epsilon_{\infty} L + f_{\infty} - \frac{\pi v_s c}{24L} + o(L^{-1}), \qquad (4.81)$$

onde f_{∞} é a energia livre de superfície (não universal), que aparece devido à existência de uma borda no caso OBC.

Para estimar o comportamento apresentado em (4.81), calcularemos $E_0(L)$ para cadeias com $3 \leq L \leq 2400$. Como todas as raízes z_i $(i = 1, ..., \lfloor L/3 \rfloor)$ do polinômio P(z)são positivas, o EF é aquele em que tomamos o ramo real de quasi-energias $\epsilon_i = 1/z_i^{1/3}$, i.e.,

$$E_0(L) = -\sum_{i=1}^{\lfloor L/3 \rfloor} \frac{1}{z_i^{1/3}} = -\sum_{i=1}^{\lfloor L/3 \rfloor} \epsilon_i.$$
(4.82)

Poderíamos em princípio calcular todas as raízes do polinômio P(z) gerados pela relação de recorrência (3.11) e (3.35). Contudo, os polinômios P(z) gerados possuem coeficientes que são da ordem de ~ 1000 dígitos, dificultando o cálculo de todas as raízes com precisão numérica razoável (por exemplo, no caso de precisão quádrupla). Assim, alternativamente, diagonalizamos a matriz de hopping (4.65) usando métodos numéricos usuais, obtendo as quasi-energias ϵ_i . Na Fig. 13 exibimos a dependência da energia de $E_0(L)$ com o tamanho da cadeia L. Note que consideramos uma cadeia de até L = 2400 sítios. Mostramos na Fig. 13 o resultado de um ajuste utilizando a expressão (4.81), que indica $f_{\infty} = 0,3528$ e $\frac{\pi v_s c}{24} \sim 0,31409$. A velocidade do som, no caso de OBC, é obtida considerando-se a primeira excitação no setor de mesma magnetização do EF, sendo dada por

$$v_s(L) = \frac{L}{\pi} (E^{exc} - E_0) + o(L^{-1}), \qquad (4.83)$$

sendo v_s o limite $L \to \infty$ de $v_s(L)$. Com os dados apresentado na Fig. 12, calculamos os estimados $v_s(L)$ e os apresentamos na Fig. 13, cuja extrapolação para L grande nos dá $v_s = 2,5989$ que é próxima do valor obtido analiticamente em (4.48) no modelo com PBC. A energia específica ϵ_{∞} coincide também com o valor obtido no caso periódico. Conforme esperado, nossos resultados indicam que a teoria de campo conforme adjacente ao modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC possui carga central c = 1 no regime $\bar{\lambda} = 1$, assim como no caso periódico.

A parte real das excitações de baixa energia para a cadeia aberta também pode ser obtida. Conforme a previsão de CFT é esperado a existência de torres conformes que se comportam como

$$E_{Q,j}(L) = E_0(L) + \frac{\pi v_s(x_s^{(Q)} + j)}{L} + o(L^{-1}), \quad j = 0, 1, 2, ...,$$
(4.84)



FIGURA 13 – Dependência da energia do EF em função do tamanho da cadeia L para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e no regime crítico $\bar{\lambda} = 1$. No *inset* da figura é exibido a previsão para a velocidade do som $v_S(L)$ do modelo à medida que o tamanho da cadeia cresce.

Fonte: Elaborada pelo autor.

onde, como antes, Q são inteiros que dependem da magnetização do autoestado, i.e., são excitações relacionadas às dimensões dos operadores primários da torre conforme. Para ilustrar, mostramos na Fig. 14 algumas das excitações que ocorrem nos setores Q = 0, Q = 1 e Q = 2. Nos casos (a) e (c) da Fig. 14 é necessário apenas o conhecimento da maior raiz do polinômio P(z) dado em (4.67) para o cálculo do autovalor correspondente. Enquanto nos casos (b), (d) e (e) devemos estimar as duas maiores raízes do polinômio P(z). As degenerescências dos estados das torres conformes em (4.84) estão relacionados aos chamados caracteres da álgebra de Virasoro associados aos operadores primários da CFT. (49) Podemos observar que a mesma é bem maior que aquelas que aparecem no caso do modelo XY padrão, isto se deve ao aparecimento de três ramos de excitações. Há diferentes formas de compor as excitações exibidas na Fig. 14, gerando uma degenerescência na parte real das energias associadas a cada excitação. Como exemplo, podemos observar que no setor Q = 1 a partícula pode ser adicionada tanto ao longo da linha radial ω^1 quanto ao longo de ω^2 . A parte real dessas excitações são as mesmas, diferindo apenas pela sua parte imaginária.

As energias das excitações nesses três setores são, respectivamente,

$$\Delta_{0,1}^{(s)} = E_{0,1} - E_0 = (1 - \omega)\epsilon_1, \quad \Delta_{1,0}^{(s)} = E_{1,0} - E_0 = \omega\epsilon_1, \quad \Delta_{2,0}^{(s)} = E_{2,0} - E_0 = \omega(\epsilon_1 + \epsilon_2).$$

Na Fig. 15 exibimos a parte real dessas três lacunas de massa em função do inverso do tamanho da cadeia. Segundo a previsão dada em (4.84), é esperado um comportamento linear, como pode ser constatado na figura.



FIGURA 14 – Menores excitações no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e $\bar{\lambda} = 1$. Foram considerados os setores Q = 0, 1 e 2. As excitações com $j \neq 0$ estão associadas com as dimensões anômalas dos operadores descendentes da torre conforme correspondente. Os casos (a) e (c) demandam o conhecimento da maior raiz do polinômio característico. Os casos (b), (d) e (e) demandam as duas maiores raízes e, por fim, o caso (f) demanda o conhecimento da maior e terceira maior raiz do polinômio. Essas raízes estão associadas, respectivamente, com as quasi-energias $\epsilon_1, \epsilon_2 \in \epsilon_3$.

Fonte: Elaborada pelo autor.



FIGURA 15 – Parte real das excitações nos setores Q = 0, 1 e 2 do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e acoplamento $\bar{\lambda} = 1$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Em todo modelo crítico invariante conforme, a torre conforme cujo menor estado é o estado fundamental corresponde ao operador identidade de dimensão x = 0. No presente

caso esta é a torre dada por $E_{0,j}$. A primeira dimensão nesta torre, no caso OBC, estaria associada a lacuna $\Delta_{0,1}^{(s)}$. No caso PBC, esta lacuna está associada com o operador energia com dimensão $x_{\epsilon} = 1$ (veja seção 4.2.1). Assim, para estimar a dimensão $x_{\epsilon}^{(s)}$ relacionada ao expoente de superfície correspondente é conveniente utilizar a razão das condições livres e periódicas, i.e.,

$$R(L) = \frac{\Delta^{PBC}}{\Delta^{OBC}} = \frac{\frac{2\pi}{L} v_s x_{\epsilon}}{\frac{\pi}{L} v_s x_{\epsilon}^{(s)}} = \frac{2x_{\epsilon}}{x_{\epsilon}^{(s)}}, \qquad (4.85)$$

Na Tab. 6 exibimos a razão R(L) para cadeias de diferentes tamanhos. Os resultados TABELA 6 – Razão R(L) em função do tamanho da cadeia L para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ no setor Q = 0 e regime de acoplamento $\bar{\lambda} = 1$.

L	R(L)	L	R(L)
3	2	30	1,161
6	1,791	60	1,071
9	1,558	120	1,026
15	1,338	240	1.003

Fonte: Elaborada pelo autor.

mostram que o limite assintótico $L \to \infty$ é coerente com $R(\infty) = 1$. Isto indica que a dimensão anômala de superfície relativa ao operador energia da cadeia aberta é dada por $x_{\epsilon}^{(s)} = 2$. Esse valor para $x_{\epsilon}^{(s)}$ já foi obtido para outros modelos com OBC (incluindo o modelo de Ising (91), o modelo XXZ (58) e o modelo crítico de Potts de q = 3 e 4 estados (92)). Na realidade, esse resultado segue a conjectura de Cardy (92) de que a dimensão superficial do operador energia para condições abertas possui sempre o valor $x_{\epsilon}^{(s)} = 2$, independente do modelo conforme.

Através de (4.85), podemos determinar uma estimava para a menor dimensão anômala nos setores Q = 1 e Q = 2 da cadeia aberta. Isso pode ser feito com o auxílio da previsão da invariância conforme (4.84), i.e.,

$$x_s^Q(L) = \frac{L}{\pi v_s} [E_{Q,0}(L) - E_0(L))], \qquad (4.86)$$

sendo $E_{Q,0}$ o menor estado no setor indexado por $Q e v_s$ nossa estimativa numérica para a velocidade do som do modelo. A Tab. 7 exibe os efeitos de tamanho finito das dimensões anômalas superficiais $x_s^{(1)} e x_s^{(2)}$ obtidas diretamente das lacunas de massa nos setores Q = 1 e Q = 2.

Os resultados exibidos na Tab. 7 seguem um comportamento já obtido para líquidos de Luttinger e modelos gaussianos, cuja carga central da CFT é unitária. Por exemplo, para o modelo XXZ, que pertence a essa classe de universalidade, foi observado por Alcaraz *et.al.* que os expoentes superficiais x_s^Q são dados por (93)

4

$$x_s^Q = 2Q^2 x_p, \tag{4.87}$$

e x_s (L) do modelo $\pi_{3,2}$ com OBC e regime de acoptamiento $\lambda = 1$.							
	Set	for $Q =$	= 1		Setor	Q = 2	
L	$x_s^{(1)}(L)$	L	$x_s^{(1)}(L)$	L	$x_s^{(2)}(L)$	L	$x_{s}^{(2)}(L)$
15	0.4321	120	0.4983	15	1.5959	120	1.9417

30

45

60

1.7739

1.8439

1.8817

150

240

300

1.9556

1.9755

1.9822

0.5002

0.5041

0.5052

150

240

300

TABELA 7 – Valores numéricos obtidos para as menores dimensões anômalas superficiais $x_s^{(1)}(L)$ $a_{x}^{(2)}(I)$ do modelo \mathcal{U}^{XY} com OBC o regime de acontemento $\bar{\lambda}$

Fonte: Elaborada pelo autor.

onde x_p é a menor dimensão anômala do operador polarização, dado em nosso caso por $x_p = x_1 = 1/4.$ Sendo assim, é esperado que a expressão em (4.87) também seja válida para a cadeia $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$, onde os valores exatos dos expoentes $x_s^{(1)}$ e $x_s^{(2)}$ são, respectivamente, $x_s^{(1)} = 1/2 \ \mathrm{e} \ x_s^{(2)} = 2.$

Outra excitação interessante que podemos obter no setor Q = 0 é aquela que gera o primeiro estado descendente em (4.84) com j = 1 e dimensão $x_{s,1}^{(0)} = x_s^{(0)} + 1 = x_{\epsilon}^{(s)} + 1$. Como mencionado anteriormente, essa excitação é gerada saltando a partícula do nível ϵ_1 para o nível ϵ_2 ao longo da linha radial ω^1 . Pela previsão da invariância conforme, é esperado que o expoente superficial que domina essa excitação tenha dimensão $x_{s,1}^{(0)} = 3$. De fato, considerando a lacuna de massa dessa excitação

$$E_{0,1}(L) - E_0(L) = (1 - \omega)\epsilon_2, \qquad (4.88)$$

podemos obter uma estimativa numérica de $x_{s,1}^{(0)}$ tendo o conhecimento da segunda maior raiz do polinômio característico. Os valores obtidos são exibidos na Tab. 8. Os resultados indicam que no limite de uma cadeia grande, os valores obtidos tendem para o valor previsto $x_{s,1}^{(0)} = 3.$

TABELA 8 – Estimativa numérica para a dimensão superficial $x_{s,1}^{(0)}(L)$ do primeiro operador descendente no setor Q = 0 do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e $\bar{\lambda} = 1$. O valor exato, obtido para $L \to \infty$, é dado por $x_{s,1}^{(0)} = 3$.

L	$x_{s,1}^{(0)}(L)$	L	$x_{s,1}^{(0)}(L)$
15	2.3277	120	2.8887
30	2.6136	150	2.9000
45	2.7271	240	2.9428
60	2.7887	300	2.9540

Fonte: Elaborada pelo autor.

30

45

60

0.4670

0.4803

0.4873

5 ENTROPIAS DE EMARANHAMENTO

Neste capítulo apresentamos os resultados numéricos obtidos para as EE (von Neumann e Rényi) do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$, com a matriz de densidade de um estado puro formado pelo EF. Consideraremos cadeias com PBC e estudaremos o modelo em diferentes regimes de acoplamento $\bar{\lambda}$. As entropias de emaranhamento de dois subsistemas podem ser calculadas, como veremos a seguir, a partir da matriz de correlação \mathcal{C} , cujos elementos \mathcal{C}_{ij} são as funções de correlação de férmions nas posições $i \in j$. Nossos resultados indicam que, embora o modelo seja não hermitiano, a EE segue a lei de escala prevista por uma CFT (2.48) unitária com carga central c = 1 no regime $\bar{\lambda} = 1$. Além disso, foram observadas oscilações espaciais nas entropias de Rényi com índices $n = 2, 3, 4 \in 6$ para a cadeia $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$, como já reportado em outras cadeias quânticas. (22) Por fim, uma extensão do cálculo de emaranhamento para o modelo $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}$ também é discutida.

5.1 Entropias de emaranhamento via matriz de correlação para cadeias não hermitianas

Há usualmente dois métodos que possibilitam calcular os autovalores da matriz de densidade reduzida (RDM) em sistemas bipartidos com partições de spins contíguas: i) a decomposição de seus autovetores (*singular value decomposition*) e (ii) a técnica da matriz de correlação. No primeiro caso, há um problema de crescimento computacional exponencial com o tamanho do sistema, que restringe o uso do método para sistemas pequenos. Em particular, a RDM cresce de maneira $\sim 2^{\ell}$, onde ℓ é o tamanho do bloco reduzido. Em contrapartida, no último caso a complexidade aumenta linearmente com ℓ , tornando o método mais conveniente para cálculos numéricos.

Como bem salientado em (94–95), é possível usar a matriz de correlação para extrair os autovalores da RDM de um sistema de férmions livres^{*}. Essa abordagem pode ser estendida de modo a englobar modelos fermiônicos não hermitianos. A matriz de correlação possui elementos C_{ij} dados pela função de correlação fermiônica:

$$\mathcal{C}_{ij} = \langle GS_L | c_i^+ c_j | GS_R \rangle, \qquad (5.1)$$

onde $\langle GS_L | e | GS_R \rangle$ são os estados fundamentais à esquerda e à direita, respectivamente:

$$\langle GS_L | = \langle 0 | \prod_{k \le k_F} \eta_k, \ |GS_R \rangle = \prod_{k \le k_F} \eta_k^{\dagger} | 0 \rangle, \qquad (5.2)$$

^{*} O fato do sistema ser livre resulta na forma Gaussiana da RDM (96).

sendo $|0\rangle$ o estado de vácuo fermiônico. Dada a estrutura simples do EF, que obedece uma estrutura de semipreenchimento, podemos observar que

$$\langle \eta_k^{\dagger} \eta_k \rangle = \begin{cases} \delta_{kk'}, & \text{se } k \le k_F \\ 0, & \text{se } k > k_F. \end{cases}$$
(5.3)

Dessa forma, considerando a transformação $\{c_i, c_i^{\dagger}\} \rightarrow \{\eta_k, \eta_k^{\dagger}\}$ em (3.28), podemos escrever

$$\mathcal{C}_{ij} = \langle GS_L | c_i^+ c_j | GS_R \rangle = \langle 0 | \prod_{|k| \le k_F} \eta_k c_i^+ c_j \prod_{|k| \le k_F} \eta_k^\dagger | 0 \rangle$$

$$= \langle 0 | \prod_{|k| \le k_F} \eta_k \left(\sum_{k'} \mathbb{L}_{i,k'} \eta_{k'}^\dagger \right) \left(\sum_{k''} \mathbb{R}_{j,k''} \eta_{k''} \right) \prod_{|k| \le k_F} \eta_k^\dagger | 0 \rangle$$

$$= \langle 0 | \sum_{|k| \le k_F} \mathbb{L}_{i,k} \mathbb{R}_{j,k} | 0 \rangle$$

$$= \sum_{|k| \le k_F} \mathbb{L}_{i,k} \mathbb{R}_{j,k}, \qquad (5.4)$$

Portanto, a matriz de correlação pode ser obtida diretamente dos autovetores à esquerda e à direita da matriz A. Para o caso periódico, $\mathbb{L}_{i,k} \in \mathbb{R}_{j,k}$ são modos de Fourier e com isso obtemos

$$\mathcal{C}_{mn} = \sum_{|k| \le k_F} \mathbb{L}_{m,k} \mathbb{R}_{n,k} = \sum_{|k| \le k_F} \frac{1}{L} e^{-\frac{i2\pi k}{L}(m-n)} \\
= \sum_{k=0}^{k_F} \frac{1}{L} \left(e^{-\frac{i2\pi k}{L}(m-n)} + e^{\frac{i2\pi k}{L}(m-n)} \right) \\
= \frac{2}{L} \sum_{k=0}^{k_F} \cos \left[\frac{2\pi k}{L}(m-n) \right].$$
(5.5)

No limite $L \to \infty$ a soma pode ser substituída por uma integral (veja a Eq. (4.35)), fornecendo

$$\mathcal{C}_{mn} = \langle GS_L | c_i^+ c_j | GS_R \rangle = \frac{1}{\pi} \frac{\sin(k_F(m-n))}{(m-n)}.$$
(5.6)

Note que o cálculo acima reproduz a mesma fórmula para a matriz de correlação do modelo XX no ponto isotrópico. (75) Os elementos da matriz (5.6) dependem apenas da distância espacial entre dois pontos da cadeia e isso é uma consequência imediata da invariância de translação.

Se considerarmos um subsistema \mathcal{A} de tamanho ℓ , temos que a RDM tem uma forma Gaussiana (96)

$$\rho_{\mathcal{A}} = \mathcal{K}e^{\mathcal{H}_{\mathcal{A}}},\tag{5.7}$$

sendo $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ o chamado Hamiltoniana de emaranhamento do subsistema \mathcal{A} . É possível diagonalizar simultaneamente a matriz de correlação \mathcal{C} e a Hamiltoniana $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ de modo a encontrar uma relação entre seus autovalores (veja o apêndice B)). Os autovalores da matriz ${\mathcal C}$ satisfaz

$$\nu_k = \frac{e^{-\epsilon_k}}{1 + e^{-\epsilon_k}},\tag{5.8}$$

onde ϵ_k são os autovalores de $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$. Dessa forma, a EE do subsistema \mathcal{A} pode ser obtida por (94)

$$S_{\mathcal{A}} = -Tr\rho_{\mathcal{A}}\ln\rho_{\mathcal{A}} = -Tr\left[\frac{e^{-\epsilon_{k}}}{1+e^{-\epsilon_{k}}}\ln\frac{e^{-\epsilon_{k}}}{1+e^{-\epsilon_{k}}} + \frac{1}{1+e^{-\epsilon_{k}}}\ln\frac{1}{1+e^{-\epsilon_{k}}}\right] = -\sum_{m} \left[\nu_{m}\ln\nu_{m} + (1-\nu_{m})\ln(1-\nu_{m})\right],$$
(5.9)

onde ν_m são os autovalores de C_{ij} . Como $x \ln x \approx 0$ para $x \to 0$ e $x \to 1$, temos que os autovalores próximos de 0 e 1 não contribuem para o cálculo da entropia (veja o *inset* da Fig. (17)).

Similarmente (veja Apêndice B), podemos escrever as entropias de Rényi em função dos autovalores da matriz de correlação:

$$S_n = \frac{1}{1-n} \ln Tr \rho_{\mathcal{A}}^n = \frac{1}{1-n} \sum_m \ln \left[\nu_m^n + (1-\nu_m)^n\right].$$
(5.10)

A partir dos autovalores da matriz de correlação podemos calcular as entropias de Rényi para todo $n \ge 1$.

Na próxima seção, apresentamos resultados numéricos para a EE de um sistema bipartido no modelo XY com N = 3, p = 2 e sob PBC. A EE é calculada para um bloco de tamanho ℓ ($\ell = 1, 2, ..., L/2$), enquanto o restante do sistema possui tamanho $L - \ell$. Apesar de o modelo original ser não hermitiano, a matriz de correlação que obtemos em (5.5) é hermitiana e possui, portanto, autovalores ν_m reais.

5.2 Entropias de emaranhamento no modelo XY com N=3, p=2 e PBC

Na Fig. 16 exibimos a entropia de von Neumann como uma função do tamanho do subsistema ℓ para o EF nos casos em que $\bar{\lambda} = 1$ e $\bar{\lambda} = 2$. Nos dois casos, a entropia aumenta logaritmicamente conforme a previsão da CFT dada pela Eq. (2.48). A linha sólida representa o ajuste dos nossos dados utilizando esta equação. A carga central obtida através desse ajuste é c = 1.0044 para $\bar{\lambda} = 1$. Novamente enfatizamos que, diferentemente das correções de tamanho finito das autoenergias (veja o Capítulo 4), as correções finitas da EE não dependem da velocidade do som, indicando que c = 1 e o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ pertence à mesma classe de universalidade do modelo XY padrão no ponto isotrópico $\bar{\lambda} = 1$. O resultado da EE para $\bar{\lambda} = 1$ concorda com a conjectura de que a carga central em modelos fermiônicos é proporcional ao número de pontos de Fermi N_{k_F} do modelo, i.e., $c = N_{k_F}/2$. (97) Na relação de dispersão, vimos que o modelo possui dois pontos de Fermi localizados em $k_F = \pm \pi/3$. No caso em que $\bar{\lambda} = 2$, a Fig. 16 nos indica uma



FIGURA 16 – Entropia de von Neumann para o EF do modelo XY com N = 3, p = 2 e PBC. Observe que consideramos os acoplamentos $\bar{\lambda} = 1$ e $\bar{\lambda} = 2$. O tamanho da cadeia é dado por L=600 e o subsistema considerado varia de $1 \le \ell \le L/2$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

carga central $c \sim 2$, o que também corrobora a conjectura acima mencionada (97) já que temos quatro pontos de Fermi (veja a Fig. 5). Além disso, utilizando a previsão da CFT podemos também determinar o valor da constante não universal $a_1^{(\bar{\lambda})}$ em (2.48) para os dois acoplamentos. Os valores encontrados são, respectivamente, $a_1^{(1)} = 0.6711$ ($\bar{\lambda} = 1$) e $a_1^{(2)} = 0.9289$ ($\bar{\lambda} = 2$).

Para melhor visualizarmos a relação entre a EE e a superfície de Fermi, exibimos na Fig. 17 o comportamento da entropia de von Neumann para $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ em função do acoplamento $\bar{\lambda}$. Neste caso, consideramos uma cadeia de tamanho L = 300 sítios enquanto o tamanho do subsistema foi mantido fixo, sendo $\ell = L/2 = 150$. Estes resultados corroboram aqueles apresentados no capítulo 4, indicando que o ponto $\bar{\lambda} = 1$ é um ponto especial separando fases críticas conformalmente invariantes com carga central c = 1 ($\bar{\lambda} = 1$) e c = 2 ($\bar{\lambda} > 1$). Observe que a entropia aumenta significativamente para $\bar{\lambda} > 1$, pois os números de pontos de Fermi dobram neste regime. Esses resultados indicam que a entropia de von Neumann depende fortemente da geometria da superfície de Fermi. Além disso, há uma forte evidência de que a previsão de CFT permanece válida na linha crítica de sistemas de férmions livres unidimensionais não hermitianos, como o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$.

No *inset* da Fig. 17 são mostrados os autovalores que contribuem para cálculo da entropia nos dois pontos de acoplamentos $\bar{\lambda} = 1$ e $\bar{\lambda} = 2$. Os autovalores próximos de 0 e 1 não dão contribuições. Os autovalores que efetivamente contribuem para a entropia praticamente dobram quando passamos para o regime $\bar{\lambda} > 1$. Isto justifica o aumento



FIGURA 17 – Entropia de von Neumann como função de λ para o EF do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$. No *inset* da figura é exibido os autovalores da matriz de correlação.

Fonte: Elaborada pelo autor.

significativo da entropia neste regime. Um modelo fermiônico que possui duas fases conformalmente invariantes (com c = 1 em uma e c = 2 em outra) foi também obtido por Eloy e Xavier; trata-se de um modelo de Heisenberg de escadas com duas pernas e interações de multispins de três spins (98), sendo o mesmo hermitiano.

Na Fig. 18 mostramos as entropias de Rényi para $n = 2, 3, 4 \in 6$ no regime de acoplamento $\overline{\lambda} = 1$ e L = 600 sítios. As previsões da CFT são denotadas pelas linhas contínuas. Observe que oscilações nas entropias aparecem para todos os valores de nconsiderados. Além disso, não foram observadas oscilações na entropia de von Neumann (n = 1), similarmente ao que ocorre no modelo XY padrão. (22) Ainda que as oscilações sejam sutis no caso n = 2, elas ainda estão presentes. Como mencionamos no capítulo 2, essas oscilações são devidas às correções de ordem superior na entropia de Rényi. Ademais, elas estão de acordo com a conjectura de Xavier e Alcaraz, surgindo em modelos críticos com superfície de Fermi e simetria U(1). (3) Esse resultado é bem conhecido para a cadeia de Heisenberg anisotrópica de spin 1/2 e PBC, onde oscilações surgem para todo índice de Rényi n > 1. (76)

A carga central (universal), assim como a constante não universal a_a em (2.48), pode ser calculada mediante um ajuste numérico das entropias da Fig. 18. Os resultados obtidos são exibidos na Tab. 9. Eles indicam que o valor da carga central para todos os valores n da entropia de Rényi é próximo do valor exato c = 1 no ponto $\bar{\lambda} = 1$. O valor da constante não universal, entretanto, parece diminuir a medida que aumentamos o índice



FIGURA 18 – Entropias de Rényi para n=2,3,4 e 6 em função do tamanho do subsistema ℓ para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$. Note que consideramos uma cadeia de tamanho L = 600 sítios e acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. As linhas contínuas são as previsões da CFT dada pela Eq. (2.48).

Fonte: Elaborada pelo autor.

TABELA 9 – Valores estimados para a carga central c e para a constante universal a_n no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com PBC.

n	с	a_n
1	1.0044	0.6711
2	0.9940	0.5469
3	0.9913	0.4960
4	0.9908	0.4679
6	0.9922	0.4370

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para melhor compreendermos o comportamento dessas oscilações, podemos definir $D_n(L, \ell)$, onde agora consideramos as correções da entropia à forma assintótica (2.48)

$$D_n(L,\ell) = S_n(L,\ell) - S_n^{CFT}(L,\ell) = S_n(L,\ell) - \frac{c}{6}\left(1 + \frac{1}{n}\right)\log\left[\frac{L}{\pi}\sin\left(\frac{\pi\ell}{L}\right)\right], \quad (5.11)$$

sendo obtida extraindo a predição (2.48) do limite contínuo. Assim $D_n(L, \ell)$ captura as oscilações que surgem devido às perturbações de tamanho finito proporcionais à (1/L). Conforme anunciado em Eq. (2.51), as oscilações comportam-se como

$$D_n(L,\ell) = a_n + \frac{a_1 \delta_{n,1} + g_n (1 - \delta_{n,1}) \cos(k_F \ell + \theta)}{|L \sin \frac{\pi \ell}{L}|^{p_n}}$$
(5.12)

no ponto $\overline{\lambda} = 1$. Dessa forma, ajustando a Eq. (5.12) aos dados da Fig. 19 podemos estimar os valores de p_n e g_n para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ periódico. Observe que a periodicidade do termo oscilatório depende do valor do momento de Fermi k_F , que no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ é dado por $k_F = \pi/3$. Os valores numéricos de p_n e g_n obtidos a partir do ajuste são exibidos na Tab. 10. Os valores exatos para os expoentes universais p_n são exibidos entre parêntesis e como podemos ver, os valores numéricos são próximos aos valores exatos, dados por $p_n = \frac{2}{n}^{\dagger}$, que coincide com os obtidos no modelo XY padrão. (22) Devido à relação entre



FIGURA 19 – Diferença $D_n(L, \ell)$ para $n = 2, 3, 4 \in 6$. A cadeia possui L = 600 sítios e o tamanho do subsistema varia de $1 \le \ell \le L/2$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

o parâmetro de Luttinger K e dimensão do operador energia x_{ϵ} , esses resultados indicam também que a dimensão obtida no capítulo 4 concorda com o valor exato, sendo $x_{\epsilon} = 1$.

TABELA 10 – Os expoentes universais p_n e constantes não universais g_n obtidas através do fit da Eq. (5.12) para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com L = 600 e acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. Os valores em parênteses são resultados exatos.

n	p_n	g_n
2	1.023(1.000)	0.434
3	$0.652 \ (0.667)$	0.349
4	0.478(0.500)	0.290
6	0.317(0.333)	0.220

Fonte: Elaboarada pelo autor.

É interessante observar que as oscilações da Fig. 19 aumentam com o índice de Rényi n. Este fato já foi reportado por Calabrese *et.al.* para o modelo XX, que também

[†] Note que estamos omitindo o parâmetro de Luttinger K, pois assim como no modelo XY padrão, seu valor é unitário no EF da cadeia $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$.

possui simetria U(1) e uma carga central unitária c = 1. (76) É surpreendente o fato dessas oscilações surgirem em um modelo não hermitiano e concordarem com a conjectura de Xavier e Alcaraz. (3) Como salientado por Bianchini *et.al.*, é esperado que cadeias quânticas de spins não hermitianas obedeça uma dinâmica não unitária. (99)[‡] Entretanto, no caso do modelo não hermitiano $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ os autovalores da matriz de correlação são reais e, portanto, não é possível observar essa não unitariedade nas EE.

Na Fig. 20 é exibido o comportamento da entropia de Rényi para os índices n = 2, 3, 4 e 6 no regime de acoplamento $\overline{\lambda} = 2$. As linhas contínuas são as previsões de CFTs dadas pela Eq. (2.48). Os valores para a carga central c e para a constante universal a_n obtidos através dos ajustes de (2.48) são exibidos na Tab 11.



FIGURA 20 – Entropias de Rényi para n = 2, 3, 4 e 6 em função do tamanho do subsistema ℓ para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$. Note que consideramos uma cadeia de tamanho L = 600sítios e acoplamento $\bar{\lambda} = 2$. As linhas contínuas são as previsões da CFT dada pela Eq. (2.48).

Fonte: Elaborada pelo autor.

É possível observar que, na fase $\bar{\lambda} > 1$, as oscilações também aumentam com o índice de Rényi *n*. Todavia, ao contrário do regime $\bar{\lambda} = 1$, os períodos dessas oscilações deixam de ser triviais, pois temos que adicionar dois novos pontos de Fermi em nossa análise.

[‡] Alguns modelos não hermitianos são descritos por CFTs não unitárias, onde a carga central é negativa. Veja por exemplo. (44,97,99) O que não é o caso presente.

TABELA 11 – Valores estimados para a carga central c e para a constante universal a_n no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com acoplamento $\bar{\lambda} = 2$.

n	с	a_n
1	2.0298	0.9289
2	1.9944	0.8017
3	1.9815	0.7405
4	1.9751	0.7056
6	1.9697	0.6670

Fonte: Elaborada pelo autor.

5.3 Extensões: O Modelo XY com N=4 e p=3

O próximo modelo XY com interações N-multispins candidato a ser invariante conforme é o modelo dado por $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}$. Conforme a predição (3.18), esse modelo possui expoente crítico dinâmico dado por z = 1 e está associado com o modelo de paraférmions livres Z(4) com interações multispins envolvendo quatro spins (p = 3). A Hamiltoniana $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}$ com PBC ($\sigma_{n+L}^{\pm} = \sigma_n^{\pm}$) pode ser escrita como

$$\mathcal{H}_{4,3}^{XY} = \sum_{i=1}^{L} \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \bar{\lambda} \sum_{i=1}^{L} \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z \sigma_{i+2}^z \sigma_{i+3}^+,$$
(5.13)

onde consideramos o ponto isotrópico em que os acoplamentos são $\{\lambda_i^4 = \bar{\lambda}\}$ (i = 1, ..., L - 3). Essa Hamiltoniana (5.13) é facilmente escrita em termos dos operadores fermiônicos dados pela transformação de Jordan-Wigner em (3.24). Como já mencionado, as Hamiltonianas da família de modelos XY com interações N-multispins são biquadráticas nesses operadores. Note que o segundo termo em (5.13) é dado por $-c_{i+3}^+c_i$ pois:

$$c_{i}c_{i+3}^{+} = \sigma_{i}^{-} \left[\prod_{j=1}^{i-1} \sigma_{j}^{z}\right] \sigma_{i+3}^{+} \left[\prod_{j=1}^{i+2} \sigma_{j}^{z}\right] = \sigma_{i}^{-} \left[\prod_{j=1}^{i-1} \sigma_{j}^{z}\right] \sigma_{i+3}^{+} \left[\prod_{j=1}^{i-1} \sigma_{j}^{z}\right] \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} \sigma_{i+2}^{z}$$
$$= \sigma_{i}^{-} \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} \sigma_{i+2}^{+} \sigma_{i+3}^{+} = \sigma_{i}^{-} \sigma_{i+1}^{z} \sigma_{i+2}^{z} \sigma_{i+3}^{+} = -c_{i+3}^{+} c_{i}$$
(5.14)

é o termo de *hopping* envolvendo os três spins mais próximos na representação fermiônica. Dessa forma, obtemos a Hamiltoniana em termos de férmions livres

$$\mathcal{H}_{4,3}^{XY} = -\sum_{i=1}^{L-1} c_i^+ c_{i+1} - \bar{\lambda} \sum_{i=1}^{L-3} c_{i+3}^+ c_i + \mathcal{H}_S, \qquad (5.15)$$

com a densidade de Hamiltoniana superficial dada por

$$\mathcal{H}_S = -(-1)^{N_F+1} [c_1^+ c_{L-1} + \bar{\lambda} (c_1^+ c_{L-2} + c_2^+ c_{L-1} + c_3^+ c_L)], \qquad (5.16)$$

e N_F é o usual número fermiônico.

A relação de dispersão para o modelo $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}$ pode ser obtida diretamente dos modos de Fourier[§], similarmente a que fizemos no capítulo 4 para o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ (veja (4.21) à

Source convém notar que $[\mathcal{H}_{4,3}^{XY}, \mathcal{H}_{3,2}^{XY}] = 0$ e $[\mathcal{H}_{3,2}^{XY}, \mathcal{H}_{2,1}^{XY} = 0]$. Dessa forma, podemos construir uma base comum (a dos modos de Fourier) para a família de modelos $\mathcal{H}_{N,p}^{XY}$ periódicos.



FIGURA 21 – Entropia de von Neumann para o EF do modelo $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}$ com PBC e acoplamento $\bar{\lambda} = 1$. O tamanho do subsistema varia como $1 \leq \ell \leq L/2$. A linha sólida (preta) representa a previsão da CFT utilizando (2.48). No *inset* da figura é exibido a relação de dispersão do modelo com seis modos de *gap* nulo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

(4.27)), onde obtemos para $\bar{\lambda} = 1$

$$\Lambda_{4,3}(k_j) = -\left[\cos(k_j) + \cos(3k_j)\right] - i\left[\sin(3k_j) - \sin(k_j)\right].$$
(5.17)

Assim como no modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$, vemos que o *hopping* envolvendo três spins vizinhos (veja Fig. 3 para p = 3) introduz um novo termo que possui a forma $\cos(3k)$ e $\sin(3k)$. Os possíveis momentos k_j são dados em (4.24).

Na Fig. 21 exibimos a EE (von Neumann) obtida por meio da matriz de correlação para o modelo $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}$ e no *inset* da figura mostramos a forma da relação de dispersão. Consideramos uma cadeia com L = 600 sítios e acoplamentos $\bar{\lambda} = 1$. Observe que a parte real da relação de dispersão exibe seis ramos de *gap* nulo, sendo as excitações de baixas energias aproximadamente lineares com k. A Fig. 21 mostra o comportamento logarítmico previsto pela CFT associada. O valor c = 3,0515 obtido por um ajuste à previsão (2.48) indica que a teoria de campos adjacente possua carga central $c = 3^{\P}$. Tal resultado concorda com a conjectura (97), pois temos seis ramos lineares de excitações a baixas energias. Diferentemente do caso $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ estudado no capítulo 4, o modelo $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}(\bar{\lambda})$ para valores arbitrários de $\bar{\lambda}$ possui sempre seis ramos de excitações lineares. A magnetização do sistema no EF (relacionada ao número de férmions com energia negativa) aumenta monotonicamente com o valor de $\bar{\lambda}$ a partir da magnetização zero. Isto indica que, neste caso, o ponto $\bar{\lambda} = 1$ não é um ponto especial de separação de regiões de comportamentos distintos.

[¶] Infelizmente, há poucos estudos que buscam caracterizar uma CFT com anomalia conforme c > 1 trazendo *insights* sobre a cadeia quântica subjacente. Veja por exemplo. (100)

6 CONCLUSÃO

tais modelos são realmente descritos por CFTs.

Nosso objetivo geral nesta dissertação era verificar a possibilidade de que duas famílias de modelos descritas por Hamiltonianas críticas não hermitianas e com interação de multicorpos fossem governadas por teorias conformes. A primeira família são modelos com graus de liberdade parafermiônicos de simetria Z(N) e interações (p+1)-multispins. A segunda família de modelos possui simetria U(1) e é descrita por modelos XY estendidos com interações N-multispins. A suspeita da invariância conforme ocorre pelo fato do expoente crítico dinâmico z calculado em (1, 47) para as cadeias Z(N) e XY acima mencionadas, com OBC, nos darem o valor z = 1. De fato, nossos resultados indicam que

Nosso estudo foi mais extenso no caso do modelo Z(3) e XY com interações de 3-multispins (veja capítulo 4 e capítulo 5). O modelo com OBC mostrou uma física que independe do parâmetro de anisotropia $\bar{\lambda}$ (veja a seção 4.1). Surpreendentemente, no caso periódico, o modelo exibiu diferentes comportamentos que dependem fortemente da anisotropia $\bar{\lambda}$. A relação de dispersão do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ mostrou que $\bar{\lambda} = 1$ é um ponto especial, que divide duas fases críticas distintas. Verificamos que para $\bar{\lambda} \leq 1$ o modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ periódico possuí dois pontos de Fermi, enquanto para $\bar{\lambda} > 1$ o modelo possuí quatro pontos de Fermi. De fato, nossos cálculos de emaranhamento indicam que, para acoplamentos $\bar{\lambda} \leq 1$, o sistema é descrito por uma CFT com carga central c = 1. Este não é o caso para acoplamentos $\bar{\lambda} > 1$, onde cálculos de entropias mostraram que a CFT adjacente possui carga central c = 2. É interessante observar o aparecimento, em $\bar{\lambda} = 1$, de ramos de excitações que decaem com $(1/L^2)$, além dos ramos usuais lineares que decaem com (1/L). No limite para $L \to \infty$ tais excitações $(1/L^2)$ degenerar-se-ão com o estado fundamental.

O estudo das dimensões anômalas do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ com OBC e PBC nos mostrou que em $\bar{\lambda} = 1$, a torre conforme de $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ possui estrutura similar à do modelo XY padrão, governado por uma teoria conforme de carga central c = 1 e parâmetro de Luttinger K = 1.

Uma extensão dos cálculos da entropia de von Neumann foi realizada para o modelo $\mathcal{H}_{4,3}^{XY}$ periódico. A relação de dispersão dessa cadeia com PBC mostrou seis ramos lineares de excitações que independem do acoplamento $\bar{\lambda}$. Verificamos que cada ramo de excitação contribui exatamente com 1/2 para a carga central da CFT adjacente, produzindo c = 3.

Através do estudo das cadeias $\mathcal{H}_{3,2}^{XY} \in \mathcal{H}_{4,3}^{XY}$ pertencentes a família de modelos XY com interações N-multispins, podemos inferir que cada modelo dessa família possui propriedades físicas que são únicas e merecem ser ainda mais exploradas. Dessa forma, uma extensão natural do trabalho considerado aqui, seria investigar propriedades termodinâmicas de ambos os modelos e de modelos subsequentes, tal como as susceptibilidades e calores específicos. Isso pode indicar se a não hermiticidade influência diretamente no comportamento dos observáveis termodinâmicos. No contexto da informação quântica, novos resultados podem ser obtidos a partir da EE para cadeias abertas, que infelizmente não entrou no escopo desta tese. Seria também interessante o estudo da informação mútua, que mede o quanto de informação duas partes de um sistema têm em comum. Tais estudos inexistem para modelos não hermitianos como os abordados nesta tese. Um questionamento final que ficará para estudos posteriores diz respeito aos modelos parafermiônicos com simetria Z(N) na condição de contorno periódica. Qual a relação destes modelos com os modelos XY generalizados estudados nesta tese?

REFERÊNCIAS

1 ALCARAZ, F. C.; PIMENTA, R. A. Free-parafermionic z(n) and free-fermionic xy quantum chains. **Physical Review E**, American Physical Society, v. 104, p. 054121, Nov. 2021.

2 CALABRESE, P.; LEFEVRE, A. Entanglement spectrum in one-dimensional systems. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 78, p. 032329, Sept. 2008.

3 XAVIER, J. C.; ALCARAZ, F. C. Finite-size corrections of the entanglement entropy of critical quantum chains. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 85, p. 024418, Jan. 2012.

4 BAXTER, R. **Exactly solved models in statistical mechanics**. San Diego: Elsevier Science, 2016. ISBN 9781483265940.

5 BETHE, H. Zur theorie der metalle. Zeitschrift für Physik, Baltimore, v. 71, p. 205–226, 1931. Discussion 73-74.

6 Jordan, P.; Wigner, E. Über das Paulische Äquivalenzverbot. Zeitschrift fur Physik, v. 47, n. 9-10, p. 631–651, Sept. 1928.

7 SACHDEV, S. Quantum phase transitions. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. ISBN 9781139500210.

8 CHRISTE, P.; HENKEL, M. Introduction to conformal invariance and its applications to critical phenomena. Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2008. v. 16.

9 FULTON, T.; ROHRLICH, F.; WITTEN, L. Conformal invariance in physics. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 34, n. 3, p. 442, 1962.

10 POLYAKOV, A. Conformal symmetry of critical fluctuations. Jetp Letters-USSR, v. 12, n. 12, p. 381–&, 1970.

11 BELAVIN, A. A.; POLYAKOV, A. M.; ZAMOLODCHIKOV, A. B. Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory. **Nuclear Physics B**, Elsevier, v. 241, n. 2, p. 333–380, 1984.

12 FRIEDAN, D.; MARTINEC, E.; SHENKER, S. Conformal invariance, supersymmetry and string theory. **Nuclear Physics B**, Elsevier, v. 271, n. 1, p. 93–165, 1986.

13 MALDACENA, J.; STANFORD, D.; YANG, Z. Conformal symmetry and its breaking in two-dimensional nearly anti-de Sitter space. **Progress of Theoretical and Experimental Physics**, v. 2016, n. 12, 11 2016. ISSN 2050-3911. 12C104.

14 FARNSWORTH, K.; HINTERBICHLER, K.; HULÍK, O. Scale versus conformal invariance at the ir fixed point of quantum gravity. **Physical Review D**, APS, v. 105, n. 6, p. 066026, 2022.

15 MURCIANO, S.; CALABRESE, P.; KONIK, R. M. Generalized entanglement entropies in two-dimensional conformal field theory. **Journal of High Energy Physics**, Springer, v. 2022, n. 5, p. 1–29, 2022.

16 PAREZ, G.; BONSIGNORI, R.; CALABRESE, P. Quasiparticle dynamics of symmetry-resolved entanglement after a quench: examples of conformal field theories and free fermions. **Physical Review B**, APS, v. 103, n. 4, p. L041104, 2021.

17 ROY, A.; SALEUR, H. Entanglement entropy in the ising model with topological defects. **Physical Review Letters**, APS, v. 128, n. 9, p. 090603, 2022.

18 CARDY, J. Finite-size scaling. The Netherlands: Elsevier, 2012.

19 CALABRESE, P.; CARDY, J. Entanglement entropy and conformal field theory. **Journal of Physics A:** mathematical and theoretical, v. 42, n. 50, p. 504005, Dec. 2009.

20 PESCHEL, I. On the entanglement entropy for an xy spin chain. Journal of Statistical Mechanics: theory and experiment, IOP Publishing, v. 2004, n. 12, p. P12005, 2004.

21 FAGOTTI, M.; CALABRESE, P. Entanglement entropy of two disjoint blocks in xy chains. **Journal of Statistical Mechanics:** theory and experiment, IOP Publishing, v. 2010, n. 04, p. P04016, 2010.

22 XAVIER, J. C.; ALCARAZ, F. C. Rényi entropy and parity oscillations of anisotropic spin-*s* heisenberg chains in a magnetic field. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 83, p. 214425, June 2011.

23 XAVIER, J.; ALCARAZ, F.; SIERRA, G. Equipartition of the entanglement entropy. **Physical Review B**, APS, v. 98, n. 4, p. 041106, 2018.

24 ALCARAZ, F. C. Universal behavior of the shannon mutual information in nonintegrable self-dual quantum chains. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 94, p. 115116, Sept. 2016.

25 SCOPA, S.; CALABRESE, P.; BASTIANELLO, A. Entanglement dynamics in confining spin chains. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 105, p. 125413, Mar. 2022.

26 FOSS-FEIG, M. *et al.* Entanglement from tensor networks on a trapped-ion quantum computer. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 128, p. 150504, Apr. 2022.

27 MIAO, Q.; BARTHEL, T. Eigenstate entanglement scaling for critical interacting spin chains. **Quantum**, Verein zur Förderung des Open Access Publizierens in den Quantenwissenschaften, v. 6, p. 642, 2022. ISSN 2521-327X.

28 BERGANZA, M. I.; ALCARAZ, F. C.; SIERRA, G. Entanglement of excited states in critical spin chains. **Journal of Statistical Mechanics:** theory and experiment, IOP Publishing, v. 2012, n. 01, p. P01016, 2012. 29 ALBA, V.; FAGOTTI, M.; CALABRESE, P. Entanglement entropy of excited states. **Journal of Statistical Mechanics:** theory and experiment, IOP Publishing, v. 2009, n. 10, p. P10020, 2009.

30 COUVREUR, R.; JACOBSEN, J. L.; SALEUR, H. Entanglement in nonunitary quantum critical spin chains. **Physical Review Letters**, APS, v. 119, n. 4, p. 040601, 2017.

31 GOPALAKRISHNAN, S.; GULLANS, M. J. Entanglement and purification transitions in non-hermitian quantum mechanics. **Physical Review Letters**, APS, v. 126, n. 17, p. 170503, 2021.

32 TU, Y.-T.; TZENG, Y.-C.; CHANG, P.-Y. Rényi entropies and negative central charges in non-hermitian quantum systems. **SciPost Physics**, v. 12, n. 6, p. 194, 2022.

33 RYU, S.; TAKAYANAGI, T. Aspects of holographic entanglement entropy. Journal of High Energy Physics, IOP Publishing, v. 2006, n. 08, p. 045, 2006.

34 HIRATA, T.; TAKAYANAGI, T. Ads/cft and strong subadditivity of entanglement entropy. **Journal of High Energy Physics**, IOP Publishing, v. 2007, n. 02, p. 042, 2007.

35 MATSUO, Y. Entanglement entropy and vacuum states in schwarzschild geometry. Journal of High Energy Physics, Springer, v. 2022, n. 6, p. 1–28, 2022.

36 JIANG, J. *et al.* Multiband topological states in non-hermitian photonic crystals. **Optics Letters**, Optical Society of America, v. 47, n. 2, p. 437–440, 2022.

37 CHEN, L.-M. *et al.* Quantum entanglement of non-hermitian quasicrystals. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 105, p. L121115, Mar. 2022.

38 YOSHIDA, T.; MIZOGUCHI, T.; HATSUGAI, Y. Non-hermitian topology in rock–paper–scissors games. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group, v. 12, n. 1, p. 1–7, 2022.

39 LI, S. *et al.* Subspace-induced dirac point and nondissipative wave dynamics in a non-hermitian optical lattice. **Physical Review A**, APS, v. 105, n. 3, p. 033512, 2022.

40 LIANG, Q. *et al.* Dynamic signatures of non-hermitian skin effect and topology in ultracold atoms. **Physical Review Letters**, APS, v. 129, n. 7, p. 070401, 2022.

41 ZHANG, K.; YANG, Z.; FANG, C. Universal non-hermitian skin effect in two and higher dimensions. **Nature Communications**, Nature Publishing Group, v. 13, n. 1, p. 1–7, 2022.

42 KAWABATA, K.; SHIOZAKI, K.; RYU, S. Many-body topology of non-hermitian systems. **Physical Review B**, APS, v. 105, n. 16, p. 165137, 2022.

43 RAHUL, S.; SARKAR, S. Topological quantum criticality in non-hermitian extended kitaev chain. Scientific Reports, Nature Publishing Group, v. 12, n. 1, p. 1–12, 2022.

44 CHANG, P.-Y. *et al.* Entanglement spectrum and entropy in topological nonhermitian systems and nonunitary conformal field theory. **Physical Review Research**, American Physical Society, v. 2, p. 033069, July 2020. 45 ZHOU, L. *et al.* Dynamical quantum phase transitions in non-hermitian lattices. **Physical Review A**, APS, v. 98, n. 2, p. 022129, 2018.

46 ALCARAZ, F. C.; PIMENTA, R. A. Free fermionic and parafermionic quantum spin chains with multispin interactions. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 102, p. 121101, Sept. 2020.

47 ALCARAZ, F. C.; PIMENTA, R. A. Integrable quantum spin chains with free fermionic and parafermionic spectrum. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 102, p. 235170, Dec. 2020.

48 LIEB, E.; SCHULTZ, T.; MATTIS, D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. **Annals of Physics**, v. 16, n. 3, p. 407–466, 1961. ISSN 0003-4916.

49 FRANCESCO, P. D.; MATHIEU, P.; SÉNÉCHAL, D. **Conformal field theory**. New York: Springer-Verlag, 1996. (Graduate texts in contemporary physics). ISBN 139781461274759.

50 WILSON, K. G. The renormalization group and critical phenomena. **Reviews of** Modern Physics, APS, v. 55, n. 3, p. 583, 1983.

51 GINSPARG, P. Applied conformal field theory. 1991. Disponível em: https://arxiv.org/abs/hep-th/9108028. Acesso em: 15 jul. 2021.

52 FRENKEL, I. B.; ZHU, Y. Vertex operator algebras associated to representations of affine and virasoro algebras. **Duke Mathematical Journal**, Duke University Press, v. 66, n. 1, p. 123–168, 1992.

53 GIVEON, A.; KUTASOV, D.; SEIBERG, N. Comments on string theory on AdS_3 . 1998. Disponível em: https://arxiv.org/abs/hep-th/9806194. Acesso em: 12 jun. 2022.

54 ITZYKSON, C.; SALEUR, H.; ZUBER, J.-B. Conformal invariance and applications to statistical mechanics. Singapore: World Scientific, 1998.

55 CORNWELL, J. Group theory in physics. Eastbourne: Elsevier, 1999.

56 FRIEDAN, D.; QIU, Z.; SHENKER, S. Conformal invariance, unitarity, and critical exponents in two dimensions. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 52, p. 1575–1578, Apr. 1984.

57 KADANOFF, L. P.; BROWN, A. C. Correlation functions on the critical lines of the baxter and ashkin-teller models. **Annals of Physics**, v. 121, n. 1, p. 318–342, 1979. ISSN 0003-4916.

58 ALCARAZ, F. C.; BARBER, M. N.; BATCHELOR, M. T. Conformal invariance, the xxz chain and the operator content of two-dimensional critical systems. Annals of **Physics**, v. 182, n. 2, p. 280–343, 1988. ISSN 0003-4916.

59 BLÖTE, H. W. J.; CARDY, J. L.; NIGHTINGALE, M. P. Conformal invariance, the central charge, and universal finite-size amplitudes at criticality. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 56, p. 742–745, Feb. 1986.

60 AFFLECK, I. Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 56, p. 746–748, Feb. 1986.

61 TITVINIDZE, I.; JAPARIDZE, G. Phase diagram of the spin extended model. **The European Physical Journal B:** condensed matter and complex systems, Springer, v. 32, n. 3, p. 383–393, 2003.

62 CARDY, J. L. Effect of boundary conditions on the operator content of twodimensional conformally invariant theories. **Nuclear Physics B**, v. 275, n. 2, p. 200–218, 1986. ISSN 0550-3213.

63 NEUMANN, J. V. Mathematical foundations of quantum mechanics: new edition. Princeton: Princeton University Press, 2018.

64 EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Physical Review**, American Physical Society, v. 47, p. 777–780, May 1935.

65 SCHRÖDINGER, E. Die gegenwärtige situation in der quantenmechanik. Naturwissenschaften, Springer-Verlag, v. 23, n. 50, p. 844–849, 1935.

66 BELL, J. S. On the einstein podolsky rosen paradox. **Physics Physique Fizika**, APS, v. 1, n. 3, p. 195, 1964.

67 HAN, M.; WEN, Q. Entanglement entropy from entanglement contour: higher dimensions. **SciPost Physics Core**, SciPost, v. 5, p. 020, 2022.

68 CALABRESE, P.; CARDY, J. Entanglement entropy and conformal field theory: mathematical and theoretical. **Journal of Physics A**, IOP Publishing, v. 42, n. 50, p. 504005, 2009.

69 CALABRESE, P.; CARDY, J. Entanglement entropy and quantum field theory. **Journal of Statistical Mechanics:** theory and experiment, v. 2004, n. 06, p. P06002, June 2004.

70 HOYOS, J. A. *et al.* Correlation amplitude and entanglement entropy in random spin chains. **Physical Review B**, APS, v. 76, n. 17, p. 174425, 2007.

71 ZHOU, H.-Q. *et al.* Entanglement and boundary critical phenomena. **Physical Review A**, American Physical Society, v. 74, p. 050305, Nov. 2006.

72 AFFLECK, I.; LUDWIG, A. W. W. Universal noninteger "ground-state degeneracy" in critical quantum systems. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 67, p. 161–164, Jul. 1991.

73 CORNFELD, E.; SELA, E. Entanglement entropy and boundary renormalization group flow: Exact results in the ising universality class. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 96, p. 075153, Aug. 2017.

74 LAFLORENCIE, N. *et al.* Boundary effects in the critical scaling of entanglement entropy in 1d systems. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 96, p. 100603, Mar. 2006.

75 FAGOTTI, M.; CALABRESE, P. Universal parity effects in the entanglement entropy of xx chains with open boundary conditions. Journal of Statistical Mechanics: theory and experiment, v. 2011, n. 01, p. P01017, Jan. 2011.

76 CALABRESE, P. *et al.* Parity effects in the scaling of block entanglement in gapless spin chains. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 104, p. 095701, Mar. 2010.

77 CALABRESE, P.; ESSLER, F. H. L. Universal corrections to scaling for block entanglement in spin-1/2 xx chains. Journal of Statistical Mechanics: theory and experiment, v. 2010, n. 08, p. P08029, Aug. 2010.

78 BAXTER, R. A simple solvable zn hamiltonian. Physics Letters A, v. 140, n. 4, p. 155–157, 1989. ISSN 0375-9601.

79 FENDLEY, P. Free fermions in disguise. **Journal of Physics A:** mathematical and theoretical, IOP Publishing, v. 52, n. 33, p. 335002, July 2019.

80 LI, C.; YANG, F. Lee-Yang zeros in the Rydberg atoms. Frontiers in Physics, Springer, v. 18, n. 2, p. 22301, 2023.

81 SLATER, L. Generalized hypergeometric functions. Cambridge: Cambridge University Press, 1966. ISBN 9780521090612.

82 PACHOS, J. K.; PLENIO, M. B. Three-spin interactions in optical lattices and criticality in cluster hamiltonians. **Physical Review Letters**, American Physical Society, v. 93, p. 056402, July 2004.

83 FU, J.-H.; ZHANG, G.-F. Effect of three-spin interaction on thermal entanglement in heisenberg XXZ model. **Quantum Information Processing**, Springer Science and Business Media LLC, v. 16, n. 11, Oct. 2017.

84 ALCARAZ, F. C.; BARBER, M. N. Conformal invariance and the critical behaviour of a quantum spin hamiltonian with three-spin coupling. **Journal of Physics A:** mathematical and general, IOP Publishing, v. 20, n. 1, p. 179–188, Jan. 1987.

85 PENSON, K. A.; DEBIERRE, J. M.; TURBAN, L. Conformal invariance and critical behavior of a quantum hamiltonian with three-spin coupling in a longitudinal field. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 37, p. 7884–7887, May 1988.

86 KOREPIN, V. E. *et al.* Correlation function of the spin-12 xxx antiferromagnet. **Physics Letters A**, v. 190, n. 2, p. 182–184, 1994. ISSN 0375-9601.

87 ALCARAZ, F. C.; BARIEV, R. Z. An exactly solvable constrained xxz Chain. arXiv, 1999. Disponível em: https://arxiv.org/abs/cond-mat/9904042. Acesso em: 11 dez. 2022.

88 MUSSARDO, G. **Statistical field theory:** an introduction to exactly solved models in statistical physics. Oxford: Oxford University Press (Oxford gratuate texts), 2010. ISBN 9780199547586.

89 ALCARAZ, F. C.; HOYOS, J. A.; PIMENTA, R. A. Powerful method to evaluate the mass gaps of free-particle quantum critical systems. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 104, p. 174206, Nov. 2021.

90 RAHMAN, Q.; RAHMAN, D.; SCHMEISSER, G. Analytic theory of polynomials. London: Clarendon Press, 2002. (London Mathematical Society monographs). ISBN 9780198534938.

91 BURKHARDT, T. W.; GUIM, I. Finite-size scaling of the quantum ising chain with periodic, free, and antiperiodic boundary conditions. Journal of Physics A: mathematical and general, v. 18, n. 1, p. L33, Jan. 1985.

92 CARDY, J. L. Conformal invariance and surface critical behavior. Nuclear Physics B, v. 240, n. 4, p. 514–532, 1984. ISSN 0550-3213.

93 ALCARAZ, F. C. *et al.* Surface exponents of the quantum xxz, ashkin-teller and potts models. **Journal of Physics A:** mathematical and general, v. 20, n. 18, p. 6397, Dec. 1987.

94 PESCHEL, I.; EISLER, V. Reduced density matrices and entanglement entropy in free lattice models. Journal of Physics A: mathematical and theoretical, v. 42, n. 50, p. 504003, Dec. 2009.

95 PESCHEL, I. Calculation of reduced density matrices from correlation functions. Journal of Physics A: mathematical and general, v. 36, n. 14, p. L205, Mar. 2003.

96 LATORRE, J.; RIERA, A. A short review on entanglement in quantum spin systems. **Journal of Physics A:** mathematical and theoretical, IOP Publishing, v. 42, n. 50, p. 504002, 2009.

97 GUO, Y.-B. *et al.* Entanglement entropy of non-hermitian free fermions. Journal of Physics: condensed matter, IOP Publishing, v. 33, n. 47, p. 475502, Sept. 2021.

98 ELOY, D.; XAVIER, J. C. Entanglement entropy of the low-lying excited states and critical properties of an exactly solvable two-leg spin ladder with three-spin interactions. **Physical Review B**, American Physical Society, v. 86, p. 064421, Aug. 2012.

99 BIANCHINI, D. *et al.* Entanglement entropy of non-unitary conformal field theory. **Journal of Physics A:** mathematical and theoretical, IOP Publishing, v. 48, n. 4, p. 04FT01, Dec. 2014.

100 FAGOTTI, M. New insights into the entanglement of disjoint blocks. **Europhysics** Letters, v. 97, n. 1, p. 17007, Jan. 2012.

APÊNDICES

APÊNDICE A – SOLUÇÃO DO MODELO XY COM N=3 E P=2 UTILIZANDO O OPERADOR DE TRANSLAÇÃO

Conforme vimos no capítulo 4, as energias do modelo $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ no caso OBC são descritas por excitações que podem ser representadas em um círculo de raio ϵ_i nos ângulos $\omega^j = \frac{2\pi j}{3}$ (j = 0, 1, 2). Aparentemente, no caso com PBC (veja (4.27)) essa representação não é evidente. Neste apêndice, mostraremo que uma representação análoga é obtida no caso PBC. Para isto, consideraremos o setor de uma partícula na linguagem fermiônica ((4.16)-(4.17)) ou equivalentemente (já que possuem o mesmo espectro) no setor em que temos apenas um spin com $\sigma_z = 1$. Dividiremos os sítios da rede em células com uma trinca de três spins próximos, sendo o número delas dado por $N_c = L/3$ com L sendo o número de sítios (e múltiplo de 3). Os três possíveis estados com apenas um spin $\sigma_z = 1$ numa dada célula podem ser representados por

$$|1\rangle = |\uparrow,\downarrow,\downarrow\rangle, \ |2\rangle = |\downarrow,\uparrow,\downarrow\rangle, \ |3\rangle = |\downarrow,\downarrow,\uparrow\rangle,$$
 (A.1)

e os possíveis estados no setor em questão são dados por

$$\overline{|1\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\Omega \hat{T})^n |1, 0, ..., 0\rangle$$

$$\overline{|2\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\Omega \hat{T})^n |2, 0, ..., 0\rangle$$

$$\overline{|3\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\Omega \hat{T})^n |3, 0, ..., 0\rangle ,$$
(A.2)

sendo $\Omega = e^{ik}, |j, 0, ..., 0\rangle \equiv |j\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \otimes ... \otimes |0\rangle_{N_c}$ e \hat{T} o operador de translação da célula com autovalores $k = \frac{2\pi}{N_c} j \ (j = 0, 1, ..., N_c - 1)$, i.e.,

$$\hat{T}|j,0,...,0\rangle = e^{-ik}|0,j,0,...,0\rangle, \quad j = 1,2,3, \quad \hat{T}^{N_c} = 1.$$
 (A.3)

Aplicando $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ em $\{\overline{|1\rangle}, \overline{|2\rangle}, \overline{|3\rangle}\}$, obtemos

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY}\overline{|1\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\omega \hat{T})^n \mathcal{H}_{3,2}^{XY} |1, 0, ..., 0\rangle$$

$$= \frac{-1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\omega \hat{T})^n \left[|0, 0, ..., 3\rangle + \bar{\lambda} |3, 0, ..., 0\rangle \right]$$

$$= -\bar{\lambda}\overline{|3\rangle} - e^{ik}\overline{|3\rangle} = -(\bar{\lambda} + e^{ik})\overline{|3\rangle}.$$
(A.4)

Analogamente para $\overline{|2\rangle}$

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} \overline{|2\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\omega \hat{T})^n \mathcal{H}_{3,2}^{XY} |2, 0, ..., 0\rangle$$

$$= \frac{-1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\omega \hat{T})^n \left[|1, 0, ..., 0\rangle + \bar{\lambda} |0, 1, ..., 0\rangle \right]$$

$$= -\overline{|1\rangle} - \bar{\lambda} e^{-ik} \overline{|1\rangle} = -(1 + \bar{\lambda} e^{-ik}) \overline{|1\rangle},$$
(A.5)

e para $\overline{|3\rangle}$

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY}\overline{|3\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\omega \hat{T})^n \mathcal{H}_{3,2}^{XY} |3, 0, ..., 0\rangle$$

$$= \frac{-1}{\sqrt{N_c}} \sum_{n=0}^{N_c-1} (\omega \hat{T})^n \left[|2, 0, ..., 0\rangle + \bar{\lambda} |0, 2, ..., 0\rangle \right]$$

$$= -\overline{|2\rangle} - \bar{\lambda} e^{-ik} \overline{|2\rangle} = -(1 + \bar{\lambda} e^{-ik}) \overline{|2\rangle}.$$
(A.6)

Assim, podemos construir a matriz $\mathcal{H}_{3,2}^{XY}$ na base $\{\overline{|1\rangle}, \overline{|2\rangle}, \overline{|3\rangle}\}$

$$\mathcal{H}_{3,2}^{XY} = -\begin{pmatrix} 0 & 1 + \bar{\lambda}e^{-ik} & 0\\ 0 & 0 & 1 + \bar{\lambda}e^{-ik}\\ \bar{\lambda} + e^{ik} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(A.7)

Diagonalizando a matriz (A.7), podemos encontrar os autovalores

$$\Lambda_{l,j}(k) = -\omega^l e^{-i\frac{2k}{3}} (\bar{\lambda} + e^{ik}) = \omega^l \epsilon(k_j), \qquad (A.8)$$

onde $\omega^l = e^{i\frac{2\pi l}{3}}$ com l = 0, 1, 2. Todas as quasi-energias presentes na relação de dispersão (A.8) também estão presentes em (4.27).

A energia do EF é real, sendo obtida tomando l = 0 e somando todas as energias abaixo do nível de Fermi, i.e.,

$$E_0 = -\sum_{|k| \le k_F} \epsilon(k_j), \tag{A.9}$$

sendo aqui $k_F = \pi$. Os estados excitados são construídos de maneira análoga à que foi realizada no capítulo 3. Por exemplo, a energia da menor excitação no setor do EF (com número de partículas sendo par) é obtida tomando

$$E_P - E_0 = -(1 - \omega)\epsilon(\pi + \frac{2\pi}{N_c}),$$
 (A.10)

que corresponde, na formulação fermiônica, a saltar a partícula mais enérgica da linha radial ω^0 para a linha radial ω^1 .

APÊNDICE B – TÉCNICA DA MATRIZ DE CORRELAÇÃO PARA CÁLCULOS DE EMARANHAMENTO

Há uma relação exata entre o espectro da RDM e a matriz de correlação de um dado subsistema. A estratégia para calcular a entropia de emaranhamento de um dado bloco $A \operatorname{com} L$ spins consiste primeiro em calcular a função de correlação do EF desse bloco, cujos autovalores estão relacionados com os autovalores da RDM. É possível mostrar que, no limite termodinâmico, a matriz de correlação de um bloco de L férmions no espaço de momento é dada por

$$\mathcal{C}_{mn} = \langle c_m^+ c_n \rangle = \frac{1}{\pi} \frac{\sin(k_F(m-n))}{m-n}, \qquad (B.1)$$

onde $L \ge m, n \ge 0$. Note que, por meio do Teorema de Wick, qualquer operador que atua no bloco pode ser escrito em termos da matriz de correlação $C_{m,n}$. Um exemplo, são as funções de correlação spin-spin, que são dadas por

$$\rho_{mn}^{z} = \langle \sigma_{m}^{z} \sigma_{n}^{z} \rangle = \langle (2c_{m}^{+}c_{m} - 1)(2c_{n}^{+}c_{n} - 1) \rangle$$

$$= 4 \langle c_{m}^{+}c_{m}c_{n}^{+}c_{n} \rangle - 2 \langle c_{m}^{+}c_{m} \rangle - 2 \langle c_{n}^{+}c_{n} \rangle + 1$$

$$= 4(1/4 - \langle c_{m}^{+}c_{n} \rangle^{2}) - 1$$

$$= -4 \langle c_{m}^{+}c_{n} \rangle^{2},$$
(B.2)

onde usamos o Teorema de Wick para calcular o valor esperado do produto de quatro operadores fermiônicos

$$\langle ABCD \rangle = \langle AB \rangle \langle CD \rangle - \langle AC \rangle \langle BD \rangle + \langle AD \rangle \langle BC \rangle.$$
 (B.3)

A expressão (B.3) para operadores fermiônicos é devido ao fato de que o sistema é Gaussiano e seus autoestados são determinados pelo primeiro e segundo momentos desses operadores.

A matriz de correlação C_{mn} pode também ser computada usando a matriz de densidade do block ρ_A

$$\mathcal{C}_{mn} = Tr(c_m^+ c_n \rho_A). \tag{B.4}$$

Como a RDM do bloco possui autovalores positivos, ela pode ser expressa, a menos de uma constante multiplicativa \mathcal{K} , como uma exponencial de um dado operador \mathcal{H}_A ,

$$\rho_A = \mathcal{K} e^{-\mathcal{H}_A},\tag{B.5}$$

também chamado de Hamiltoniana de emaranhamento do bloco, sendo a mesma bilinear em graus de liberdade fermiônicos:

$$\mathcal{H}_A = \sum_{m,n=1}^{\ell} t_{mn} c_m^+ c_n. \tag{B.6}$$

Sendo \mathcal{H}_A bilinear em férmions, a mesma pode ser diagonalizada introduzindo os operadores fermiônicos

$$a_k = \sum_m c_m \phi_k(m), \tag{B.7}$$

onde $\phi_k(m)$ são os autoestados de \mathcal{H}_A com autovalores ϵ_k . Logo, a RDM torna-se

$$\rho_A = \mathcal{K} e^{-\sum_k \epsilon_k a_k^{\dagger} a_k}.$$
(B.8)

Inserindo essa expressão em (B.4), obtemos

$$\mathcal{C}_{mn} = \sum_{k,k'} \phi_k^*(m) \phi_{k'}(n) Tr\left(e^{\sum \epsilon_q a_q^{\dagger} a_q} a_k^{\dagger} a_k\right)$$

$$= \sum_k \phi_k^*(m) \phi_k(n) \langle a_k^{\dagger} a_k \rangle$$

$$= \sum_k \phi_k^*(m) \phi_k(n) \frac{1}{1 + e^{\epsilon_k}}.$$
(B.9)

Essa expressão pode ser comparada com a Hamiltoniana de emaranhamento escrita na base de a_k dada em (B.7), i.e.,

$$(\mathcal{H}_A)_{mn} = \sum_k \phi_k^*(m) \phi_k(n) \epsilon_k.$$
(B.10)

Comparando-se essas duas expressões, é possível identificar os autovalores ν_k da matriz de correlação em termos de ϵ_k ,

$$\nu_k = \frac{1}{1 + e^{\epsilon_k}} \tag{B.11}$$

A RDM na base de a_k é o produto de Kronecker das matrizes de partícula única ($Tr\rho_L = 1$),

$$\rho_A = \bigoplus_k \frac{e^{-\epsilon_k a_k^{\mathsf{T}} a_k}}{1 + e^{-\epsilon_k}}.$$
(B.12)

Os autovalores de $a_k^{\dagger}a_k$ são 0 ou 1, que correspondem, respectivamente, a um modo vazio ou ocupado. Assim, os autovalores de ρ_L podem ser escritos como

$$\frac{e^{-\epsilon_k}}{1+e^{-\epsilon_k}} = \nu_k, \quad \frac{1}{1+e^{-\epsilon_k}} = 1 - \nu_k \tag{B.13}$$

Logo, podemos obter a entropia de emaranhamento em termos dos autovalores da matriz de correlação

$$S_{A} = -Tr\rho_{A}\log\rho_{A} = -Tr\left[\frac{e^{-\epsilon_{k}}}{1+e^{-\epsilon_{k}}}\ln\frac{e^{-\epsilon_{k}}}{1+e^{-\epsilon_{k}}} + \frac{1}{1+e^{-\epsilon_{k}}}\ln\frac{1}{1+e^{-\epsilon_{k}}}\right]$$
(B.14)
= $-\sum_{m} \left[\nu_{m}\ln\nu_{m} + (1-\nu_{m})\ln(1-\nu_{m})\right].$

E similarmente para as entropias de Rényi, obtemos

$$S_n = \frac{1}{1-n} \log Tr \rho_A^n = \frac{1}{1-n} \sum_k \log \left[\nu_k^n + (1-\nu_k)^n\right].$$
 (B.15)