Universidade Estadual de Campinas Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Dinâmica Quântica de Estados de Impurezas em Cadeias de Spin

Dissertação de Mestrado

Autora: Priscila Ferrari Silveira Rosa

Orientador: Guillermo Cabrera

Este exemplar corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida pela aluna Priscila Ferrari Silveira Rosa e aprovada pela Comissão Julgadora.

Juillermo Cabrera

Campinas, 19 de Julho de 2010.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DO IFGW - UNICAMP

R71d	Rosa, Priscila Ferrari Silveira Dinâmica quântica de estados de impurezas em cadeias de spin / Priscila Ferrari Silveira Rosa Campinas, SP : [s.n.], 2010.
	Orientador: Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".
1	1. Dinâmica guântica. 2. Relaxação para o equilíbrio.
2	3. Ising quântico, Modelo de. 4. Impurezas. I. Cabrera
3	Oyarzún, Guillermo Gerardo. II. Universidade Estadual de
4	Campinas. Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.
	5 (vsv/ifgw)
- Títul	o em inglês: Quantum dynamics of impurity states in spin chains
- Títul - Pala	o em inglês: Quantum dynamics of impurity states in spin chains vras-chave em inglês (Keywords):
- Títul - Pala 1. (o em inglês: Quantum dynamics of impurity states in spin chains vras-chave em inglês (Keywords): Quantum dynamics
- Títul - Pala 1. (2. 5	o em inglês: Quantum dynamics of impurity states in spin chains vras-chave em inglês (Keywords): Quantum dynamics Spin relaxation Quantum Ising model
- Títul - Pala 1. (2. § 3. (4.	o em inglês: Quantum dynamics of impurity states in spin chains vras-chave em inglês (Keywords): Quantum dynamics Spin relaxation Quantum Ising model mpurity
- Títul - Pala 1. (2. § 3. (4. - Área	o em inglês: Quantum dynamics of impurity states in spin chains vras-chave em inglês (Keywords): Quantum dynamics Spin relaxation Quantum Ising model mpurity de Concentração: Física da Matéria Condensada
- Títul - Pala 1. (2. § 3. (4. - Área - Titul	o em inglês: Quantum dynamics of impurity states in spin chains vras-chave em inglês (Keywords): Quantum dynamics Spin relaxation Quantum Ising model mpurity de Concentração: Física da Matéria Condensada ação: Mestre em Física



MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE **PRISCILA FERRARI SILVEIRA ROSA – RA 087206** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 15 / 07 / 2010.

COMISSÃO JULGADORA:

ra

Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún - Orientador da Candidata DFMC/IFGW/UNICAMP

Prof. Dr. Alberto Sebastião de Arruda - IF/UFMT

Prof. Dr. Pascoal José Giglio Pagliuso - DEQ/IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Aos meus pais Carmo e Leni pelo apoio e incentivo incondicionais. Ao meu irmão Wendell pelo ombro amigo e pela compreensão ímpar.

Ao Professor Cabrera pela oportunidade e pela orientação objetiva e centrada.

Ao querido Zenner pelo imenso carinho e pela companhia maravilhosa.

Ao colega Júlio Garcia, por compartilhar seu conhecimento e sempre estar aberto a discussões. Ao IFGW pelos recursos disponibilizados através da Secretaria de Pós Graduação, da Secretaria do DFMC, da Biblioteca e do Centro de Computação.

A todos aqueles que fizeram parte dos meus dias na Unicamp e no prédio D: amigos, professores e funcionários.

Aos amigos de Cuiabá, que sempre me receberam tão bem.

Às agências de pesquisa FAPESP e CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

A descrição da dinâmica quântica de sistemas de muitos corpos é um ingrediente chave para a computação quântica. No presente projeto, propomos o estudo da dinâmica em cadeias finitas de spin 1/2 na presença de impurezas ou defeitos. O modelo adotado será o de Ising quântico com campo transverso, do qual é possível obter o espectro de forma exata na presença de uma impureza. A dinâmica do sistema é movida exclusivamente por flutuações quânticas, cuja origem é o Princípio da Incerteza. Investigamos a relaxação de estados iniciais caracterizados por uma magnetização espacialmente não homogênea e que não possuam hipóteses sobre a proximidade com o estado de equilíbrio. Dessa forma, a matriz densidade inicial será dependente apenas de uma única coordenada espacial. A investigação então é realizada através da grandeza de interesse, a saber, a evolução temporal do valor médio das componentes de Fourier da magnetização, $\langle S_Q^z \rangle_t$. Soluções exatas, tanto analíticas quanto numéricas, são obtidas. Um dos objetivos iniciais deste trabalho consiste na busca de processos de relaxação lentos. Para os casos de solução analítica (impurezas periódica e antiperiódica) observamos relaxações oscilatórias e amortecidas por uma lei de potência no tempo do tipo $(t/\tau_Q)^{-\nu_Q}$, onde τ_Q e ν_Q são dois parâmetros livres e Q é o número de onda associado a cada componente de Fourier. Há uma criticalidade no expoente ν_Q , o qual muda de 3/2 para 1/2 para certos valores de Q críticos. Por outro lado, para os casos de solução numérica (impurezas arbitrárias), os processos de relaxação são distintos daqueles citados acima. Os estados iniciais analisados são do tipo produto direto ferromagnético com um único spin virado, próximo ou distante da impureza. Neste caso, as evoluções temporais oscilam em torno de um valor médio não nulo e há uma larga faixa de valores de Q na qual os modos não se extinguem completamente.

Abstract

The description of many body systems quantum dynamics is a key ingredient for quantum computation. In the present project we study finite spin-1/2 chains dynamic properties in the presence of impurities or defects. We adopt the quantum Ising model with transverse field, of which it is possible to obtain the energy spectrum by exact calculations in the presence of one impurity. The system dynamics is driven exclusively by quantum fluctuations, whose origin is the Uncertainty Principle. We investigate the relaxation of initial states characterized by spatially inhomogeneous magnetization without any hypothesis about the proximity with the equilibrium state. Thus, the initial density matrix will be dependent of only one spatial coordinate. The investigation then is realized through the temporal evolution of the magnetization's Fourier components. Exact solutions, analytical and numerical, are obtained. One of the goals of this work consist in the search of slow relaxation processes. For the analytical cases (periodic and anti-periodic impurities) we observe oscillatory relaxations with a decay given by a power law in time $(t/\tau_Q)^{-\nu_Q}$, where τ_Q and ν_Q are two free parameters and Q is the wave number associated to a Fourier component. There is a criticality in the exponent ν_Q : its value changes from 3/2 to 1/2 for certain critical values of Q. On the other hand, for the numerical cases (arbitrary impurities), the relaxation processes are distinct from the cases cited above. The initial state analyzed is a ferromagnetic direct product with only one flipped spin, near or far from the impurity. In this case, the temporal evolutions oscillate around a finite mean value and there is a large interval of Q values in which the modes do not extinguish completely.

Notação

Nesta dissertação, utilizar-se-ão as palavras estrangeiras gap e *nesting* sem as traduzir, tendo em vista que o significado destas palavras está cristalizado na literatura. A identificação de palavras estrangeiras será realizada através do itálico.

A convenção na escrita dos números decimais será aquela adotada no inglês, a saber, a utilização de ponto ao invés de vírgula.

Conteúdo

$\operatorname{Agradecimentos}$		iv		
R	esum	10		v
A	bstra	ict		vi
N	otaçã	ĩo		vii
1	Introdução			
	1.1	Sistem	as Mesoscópicos	2
	1.2	Dinâm	ica Quântica	3
	1.3	Proble	na Específico	6
2	Propriedades Estáticas do Modelo			
	2.1	Mapea	mento em um Sistema de Férmions Livres	9
	2.2	Estado	Fundamental	15
	2.3	Estudo	das Funções g_{kn} e h_{kn}	17
	2.4	Relaçã	o de Dispersão e Gap	19
3	Din	âmica (de Excitações Espacialmente Não-Homogêneas	24
	3.1	Grande	za de Interesse	24
	3.2	Revisã	o do Caso Periódico nos Operadores Fermiônicos	26
		3.2.1	Reconstruções Parciais	29
		3.2.2	Pontos Estacionários Degenerados	33
		3.2.3	Ajustes com Lei de Potência	35
	3.3	Condiç	ões de Contorno nas Variáveis de Spin	40
		3.3.1	Casos de Resolução Analítica	40
		3.3.2	Casos de Resolução Numérica	47

CONTEÚDO

4	Conclusões	61
A	Cálculo das Médias $<\eta_p^lpha\eta_q^\mu>$	64
в	Método da Fase Estacionária para Funções Reais	66
Bi	Bibliografia	

ix

Lista de Figuras

1.1	Ilustração da Impureza de Contorno na Cadeia de Spins	6
2.1	Espectro de autovalores $\lambda_k = \omega_k^2$ na presença de uma impureza. Quando $g < -1$, surge um gap Δ_a indicando que um estado se separou da banda k. Como o estado	
	é ligado, seu autovalor de energia é negativo de modo que $\omega_k = -\sqrt{\lambda_k}$	14
2.2	Coeficiente g_{kn} em função do sítio n para o caso periódico ($g = 1.0$) e parâmetros	
	${\cal N}=100$ e $h=0.2.$ No caso periódico, há estados duplamente degenerados, o que	
	implica dois comportamentos distintos de g_{kn} para o mesmo autovalor de energia.	
	Para os autovalores $\omega_k = 1.783, 2.049$ graficamos apenas um dos estados, uma vez	
	que são praticamente idênticos. Os coeficientes h_{kn} são todos nulos	17
2.3	Coeficientes g_{kn} e h_{kn} em função do sítio n com parâmetros $N = 100, g = -1.5$ e	
	h=0.2.Quatro autovalores foram escolhidos, sendo o último referente ao estado	
	ligado	18
2.4	Relação de dispersão ω_k em função do número de ond a k/π para campos transversos	
	h=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0. O gap é nulo para $h=1.$	19
2.5	Extrapolação dos valores de σ e α em função do parâmetro $g.$ Os resultados ex atos	
	estão indicados por círculos e os numéricos por barras de erro. As curvas A, B e C	
	correspondem a valores de campo magnético transverso $h=0.3, 0.5, 0.7,$ respectiva-	
	mente. Figura retirada da referência [10].	20
2.6	A) Cadeia de Ising em zig-zag no ferromagneto $CoNb_2O_6$. B) Diagrama de fase da	
	cadeia de Ising em campo transverso. Figura retirada da referência [17]	22
2.7	A) Ilustração do "flip" de um spin através do espalhamento de nêutrons. (B-E)	
	Intensidade de espalhamento para quatro valores de campo magnético transverso	
	como função da energia e do vetor ${\bf L},$ que é a diferença vetorial entre os momentos	
	inicial e final do nêutron espalhado (em unidades de $2\pi/c$)	23

LISTA DE FIGURAS

$\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} \in \langle S_Q^z \rangle_t^{(-)} vs.$ t (em unidades arbitrárias) para $h = 0.6, Q = 2\pi/3$ e valores	
de $N = 6, 12, 36, 60$. Para $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ podemos dizer que há relaxação com $N = 36$. Por	
outro lado, para $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ a relaxação se estabelece com $N = 60. \ldots \ldots \ldots$	30
Tempos de reconstrução t_r^{\pm} (em unidades arbitrárias) em função do número de onda	
Q para valores de campo transverso $h = 0.2, 0.6$.	31
Tempos de reconstrução t_r^{\pm} (em unidades arbitrárias) em função do campo transverso	
h para o número de onda $Q = 0.8\pi$	32
$\langle S^z_Q angle^{(+)}_t$ vs. t (em unidades arbitrárias) para h = 0.6, Q = 2 $\pi/3$ e valores de	
$N = 12, 36, 60. \dots \dots$	32
Função Ω^+ e sua primeira derivada vs. k/π para valores de campo transverso $h=$	
0.2, 0.6. Há regiões nas quais Ω^+ é praticamente constante.	34
$\frac{d^n \Omega^+}{dk^n}$ vs. k para $N = 1000, h = 0.2$ e $Q = Q_c = 0.8718\pi$	35
$\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs. t (unidades arbitrárias) para uma cadeia com $N = 1000$ sítios e campo	
transverso h = 0.2. (à esquerda) Evolução temporal até a primeira reconstrução	
parcial. (à direita) Seleção de máximos locais para a envoltória	36
Expoente ν_Q^+ para dois campos transversos: $h = 0.2, 0.6. \ldots \ldots \ldots \ldots$	37
Expoente ν_Q^+ em função do campo transverso h para o número de onda $Q = 0.8\pi$.	37
Expoente ν_Q^- em função do campo transverso h para o número de onda $Q=0.8\pi$.	38
Valores de ν^{\pm} em função do inverso do tamanho da cadeia	38
Valores de ν dominantes para o caso Ising com campo transverso arbitrário $r.~{\rm As}$	
diferentes regiões de Q e r são definidas pelas curvas $Q = Q_c(r)$. Figura adaptada	
da referência [7]	39
$\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N = 6, h = 0.6$ e $Q = 2\pi/3$	
para os casos periódico (P) e antiperiódico (AP) nas variáveis de spin.	42
$\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N = 12, 36$ e 60, $h = 0.6$ e	
$Q=2\pi/3$ para os casos periódico (P) e antiperiódico (AP) nas variáveis de spin	43
$\langle S^z_Q\rangle^{(+)}_t vs. t$ (em unidades arbitrárias) para $N=60$ e $N=61.$ Os valores de Q são	
$2\pi/3$ e 41 $\pi/61,$ respectivamente. A relaxação coincide até a primeira reconstrução	
parcial do sistema de menor N	44
Função Ω^+ e sua primeira derivada vs. k/π para valores de campo transverso $h=$	
0.2, 0.6	45
$\frac{d^n \Omega^+}{dk^n}$ vs. k para $h = 0.2$ e $Q = Q_c = 0.8718\pi$. Degenerescência tripla.	45
Expoente ν_Q^+ para campos $h = 0.2, 0.6.$	46
Expoentes ν_Q^+ e ν_Q^- vs. <i>h</i> para o número de onda $Q = 0.8\pi$	46
$\langle S_j^z \rangle_t$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N=24,h=0.2,g=-1.5$ e $SV=1.$	49
	$ \begin{array}{l} \langle S_Q^z \rangle _{z}^{(+)} \mathrm{e} \ \langle S_Q^z \rangle _{z}^{(-)} \mathrm{vs.} \ \mathrm{t} \ (\mathrm{em} \ \mathrm{unidades} \ \mathrm{arbitr} \dot{\mathrm{ariss}}) \ \mathrm{para} \ h = 0.6, \ Q = 2\pi/3 \ \mathrm{e} \ \mathrm{valores} \ \mathrm{de} \ N = 6, 12, 36, 60. \ \mathrm{Para} \ \langle S_Q^z \rangle _{z}^{(+)} \mathrm{podemos} \ \mathrm{dizer} \ \mathrm{que} \ \mathrm{h} \dot{\mathrm{arelax}} (\ddot{\mathrm{axo}} \ \mathrm{con} \ N = 36. \ \mathrm{Por} \ \mathrm{outro} \ \mathrm{lado}, \ \mathrm{para} \ \langle S_Q^z \rangle _{z}^{(+)} \mathrm{lados} \ \mathrm{arelax} (\ddot{\mathrm{axo}} \ \mathrm{se} \ \mathrm{estabelece} \ \mathrm{con} \ N = 60. \ \ldots \ \ldots \ \mathrm{Tempos} \ \mathrm{de} \ \mathrm{reconstrução} \ t_{x}^{\pm} \ (\mathrm{em} \ \mathrm{unidades} \ \mathrm{arbitr} \dot{\mathrm{ariss}}) \ \mathrm{em} \ \mathrm{função} \ \mathrm{do} \ \mathrm{campo \ transverso} \ h = 0.2, 0.6. \ \ldots \ \ldots \ \mathrm{Tempos} \ \mathrm{de} \ \mathrm{reconstrução} \ t_{x}^{\pm} \ (\mathrm{em} \ \mathrm{unidades} \ \mathrm{arbitr} \dot{\mathrm{ariss}}) \ \mathrm{em} \ \mathrm{função} \ \mathrm{do} \ \mathrm{campo \ transverso} \ h \ \mathrm{para} \ \mathrm{n} \ \mathrm{unidades} \ \mathrm{arbitr} \dot{\mathrm{ariss}}) \ \mathrm{em} \ \mathrm{função} \ \mathrm{do} \ \mathrm{campo \ transverso} \ h \ \mathrm{para} \ \mathrm{n} \ \mathrm{unidades} \ \mathrm{arbitr} \dot{\mathrm{ariss}}) \ \mathrm{para} \ h = 0.6, \ Q = 2\pi/3 \ \mathrm{e} \ \mathrm{valores} \ \mathrm{de} \ N = 12, 36, 60. \ \ldots \ \mathrm{em} \ \mathrm{unidades} \ \mathrm{arbitr} \dot{\mathrm{ariss}}) \ \mathrm{para} \ h = 0.6, \ Q = 2\pi/3 \ \mathrm{e} \ \mathrm{valores} \ \mathrm{de} \ N = 12, 36, 60. \ \ldots \ \mathrm{em} \ \mathrm{unidades} \ \mathrm{arbitr} \dot{\mathrm{ariss}} \ \mathrm{para} \ \mathrm{n} \ \mathrm{unidades} \ \mathrm{arbitr} \dot{\mathrm{ariss}} \ \mathrm{para} \ h = 0.6, \ Q = 2\pi/3 \ \mathrm{e} \ \mathrm{valores} \ \mathrm{de} \ N = 12, 36, 60. \ \ldots \ \mathrm{ex} \ k/\pi \ \mathrm{para} \ \mathrm{valores} \ \mathrm{de} \ \mathrm{campo \ transverso} \ h = 0.2, 0.6. \ \mathrm{Ha} \ \mathrm{regiões} \ \mathrm{nas} \ $

xi

3.21	Tempo t_i (unidades arbitrárias) no qual o sítio sente a influência da impureza em	
	uma cadeia com $N = 24$	50
3.22	$\langle S_j^z \rangle_t vs. t$ para $N=24$ e dois valores de campo transverso ($h=0.2,0.6$). A	
	influência da flutuação quântica reflete-se na maior rapidez com que o valor médio	
	da magnetização é transportado.	51
3.23	$\langle S_j^z \rangle_t$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N=24,~g=-1.5,$ pacote inicial cujo	
	sítio virado (SV) está em j = 12 e dois sítios analisados: um distante $(j$ = 6) do	
	sítio virado e outro vizinho $(j = 11)$ ao sítio virado	51
3.24	$\langle S_j^z \rangle_t$ vs. t par a $h=0.2$ e $g=-1.5$ e dois valores para o número de sítios: $N=24$	
	e $N = 100.$	52
3.25	$\Re\left[\frac{\langle S_Q^2 \rangle_t}{\langle S_Q^2 \rangle_0}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N = 6, g = -1.5, h = 0.2$ e $SV = 1.$	
	Os valores de Q são dados pela eq. (3.6) .	54
3.26	$\Re[\frac{\langle S_Q^{2} \rangle_t}{\langle S_Q^{2} \rangle_0}]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para diversos valores de N e parâmetros	
	$g = -1.5, h = 0.2, Q = \pi/3 e SV = 1.$	55
3.27	$\Re\left[\frac{\langle S_Q^{\circ} \rangle_t}{\langle S_Q^{\circ} \rangle_0}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N = 160, g = -1.5, h = 0.2, SV = 1$	
	e valores de Q diferentes.	56
3.28	$\Re\left[\frac{\langle S_Q^{\prime} \rangle_t}{\langle S_Q^{\prime} \rangle_0}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N = 160, g = -1.5, h = 0.2, SV = 80$	
	e valores de Q diferentes.	57
3.29	$\Re\left[\frac{\langle S_{Q} \rangle_{t}}{\langle S_{Q}^{z} \rangle_{0}}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N = 160, g = -3.0, h = 0.2, SV = 1$	
	e valores de Q diferentes.	58
3.30	$\Re\left[\frac{\langle S_{\tilde{Q}} \rangle_t}{\langle S_{\tilde{Q}}^2 \rangle_0}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N = 161, g = -1.5, h = 0.2, SV = 1$	
	e valores de Q diferentes.	60

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho, analisar-se-á através de cálculos analíticos e numéricos o efeito de uma impureza na relaxação da magnetização de uma cadeia finita de spins 1/2. As interações entre os sítios serão modeladas por um Hamiltoniano de troca e a impureza será introduzida como uma ligação diferente na cadeia, o que pode ser pensado como uma condição de contorno arbitrária em um anel de spins. O sistema considerado é isolado e a evolução temporal do sistema decorrerá unicamente de efeitos quânticos.

A principal motivação deste trabalho consiste no surgimento de processos de relaxação muito lentos, dados por uma lei de potência no tempo, quando o estado inicial é gerado por excitações não homogêneas em cadeias magnéticas modeladas pelo Hamiltoniano XY quântico. Dessa forma, os objetivos iniciais do estudo subsequente consistem em identificar se estes processos lentos estão presentes na cadeia com impureza, buscar outros processos lentos de relaxação e analisar, em função do tamanho da cadeia, o efeito da impureza.

Nesta Introdução, apresentaremos primeiramente uma visão geral sobre o problema, discutindo a física de sistemas mesoscópicos e suas potenciais aplicações. Em seguida, ressaltaremos algumas características importantes da dinâmica de processos fora do equilíbrio. Por fim, abordaremos o problema específico ao qual esta dissertação remete. Posteriormente, no Capítulo 2, apresentaremos as propriedades estáticas do modelo utilizado para descrever a cadeia com impureza, a saber, o modelo de Ising com campo transverso e condições de contorno arbitrárias. No Capítulo 3, discutiremos o método para o tratamento da dinâmica, bem como os passos percorridos nos cálculos analítico e numérico da grandeza de interesse. Além disso, discutiremos os resultados obtidos a respeito da relaxação da cadeia. Por fim, no Capítulo 4 apresentaremos as conclusões do trabalho.

1.1 Sistemas Mesoscópicos

A física de sistemas mesoscópicos¹ e de nanoestruturas tem adquirido importância fundamental devido a potenciais aplicações em microeletrônica. Neste âmbito, tamanhos menores implicam rendimento e velocidade de processamento maiores e, além disso, possibilitam altas densidades tanto de integração em circuitos quanto de armazenamento de informação em dispositivos.

Desde o ponto de vista básico, as propriedades desses sistemas são fascinantes e cobrem uma vasta área de novos e interessantes fenômenos, os quais não aparecem no estudo usual das propriedades de volume (bulk). Na escala de nanômetros, as propriedades de transporte em condutores exibem uma variedade de fênomenos quânticos. Os elétrons podem propagar-se em um condutor sem sofrer espalhamento (regime balístico) e a fase da função de onda pode manter sua coerência numa escala da ordem do tamanho do sistema, dando lugar aos típicos fenômenos de interferência quântica [2].

Estes sistemas são ideais para sondar efeitos puramente quânticos, tais como a quantização da condutância, o tunelamento de elétrons individuais ou pares de elétrons (em supercondutores), o emaranhamento de estados quânticos, entre outros. Nesta categoria incluem-se diversos dispositivos correntemente usados em microeletrônica, tais como junções de tunelamento, junções Josephson, pontos quânticos, nanocontatos e nanofios. Sistemas magnéticos de baixa dimensão que relaxam lentamente, na forma de nanofios magnéticos ou de grandes moléculas magnéticas em magnetos moleculares, são potenciais candidatos para a fabricação de memórias magnéticas de altíssimas densidades, fato que poderia aumentar de maneira substancial a capacidade de armazenamento da informação acima de $Terabits/pol^2$.

Além dessas potenciais aplicações, vários desses sistemas têm sido propostos para a construção de um computador quântico (*hardware*), o que requer que a coerência quântica seja mantida na escala de nanômetros por tempos muito maiores que os empregados na manipulação de bits (*qubits*). Notamos também que a eficiência da computação quântica depende de maneira crucial da produção e da manipulação de estados emaranhados (*software*). Um controle fino sobre tais estados possibilita a implementação do poderio total do paralelismo quântico.

Um ingrediente chave da computação quântica é a obtenção da evolução em tempo real dos estados quânticos inicialmente preparados no processo. Diversos procedimentos têm sido propostos na literatura, tais como a integração da equação de Schrödinger [3] e a simulação numérica da dinâmica quântica [4]. No presente projeto, procuramos explorar algumas das propriedades mencionadas acima, desenvolvendo pesquisas atuais nessa área, bem como suas possíveis extensões.

¹Termo cunhado por Van Kampen em 1981. A física mesoscópica trata fenômenos dispostos em uma escala de tamanho intermediária entre o macroscópico e o microscópico. Sistemas mesoscópicos são também geralmente utilizados como sinônimo de sistemas nanométricos. Uma boa introdução sobre o assunto é encontrada em [1].

Notamos que, em geral, trabalhamos com estados intrinsecamente emaranhados. Esta é uma propriedade fundamental dos Hamiltonianos de muitos corpos utilizados. Diversas medidas poderão ser utilizadas para sondar o grau de emaranhamento [5]. As junções Josephson de ultra-baixa capacitância apresentam grande potencial para aplicações em *softwares* quânticos, uma vez que a lógica de seus dispositivos é particularmente apropriada para esse fim. As junções Josephson simulam um spin mesoscópico encravado em nanoestruturas presentes nos materiais e possuem graus de liberdade (dois estados ou um *qubit*) para efetuar as possíveis combinações. Estes últimos podem ser manipulados por potenciais de tunelamento, barreiras e campos magnéticos [6]. Para efetuar a computação quântica com esses dispositivos precisamos acoplar diferentes unidades em arranjos, dos quais o mais simples é unidimensional. Esse sistema simula de maneira perfeita uma cadeia de spins, para spin $\frac{1}{2}$, sendo esta uma realização mesoscópica dos modelos quânticos microscópicos mencionados acima.

Outro conceito importante quando tratamos de sistemas mesoscópicos é o de universalidade, isto é, o fato de diversas quantidades mensuráveis não dependerem de detalhes microscópicos do sistema. Neste contexto, podemos estudar fenômenos críticos e transições de fase em sistemas nos quais há imperfeições.

1.2 Dinâmica Quântica

Um sistema quântico evolui naturalmente no tempo se o Hamiltoniano que o descreve envolver mais de uma componente do operador de spin. Este fato decorre do Princípio da Incerteza², o qual se reflete na relação de comutação:

$$[S^{j}, S^{k}] = i\hbar\epsilon_{jkl}S^{l} \qquad \qquad j, k, l = x, y, z \tag{1.1}$$

Quando $k \neq j$, as componentes $S^j \in S^k$ não comutam e, consequentemente, um autoestado de S^j não será autoestado de S^k . Logo, um termo do Hamiltoniano que envolver S^j fará evoluir o autoestado de S^k e vice-versa. No caso do Hamiltoniano de Ising quântico, a não comutatividade é inserida através de um campo magnético transverso. Dessa forma, este campo magnético pode ser visto como uma medida das flutuações quânticas no sistema, as quais são responsáveis pelo transporte do valor médio da magnetização entre os sítios.

²Sejam dois observáveis A e B. Definindo os operadores $\Delta A \equiv A - \langle A \rangle$ e $\Delta B \equiv B - \langle B \rangle$, denominamos incerteza os valores esperados $\langle (\Delta A)^2 \rangle$ e $\langle (\Delta B)^2 \rangle$ em relação a um determinado estado. A relação de incerteza determina que para qualquer estado vale a inequação $\langle (\Delta A)^2 \rangle < (\Delta B)^2 \rangle \ge \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle |^2$. Fisicamente, se A e B não comutam haverá incerteza em medidas simultâneas dos observavéis em um sistema.

O fato de o sistema não estar em contato com variáveis de um banho implica uma evolução temporal inequivocamente determinada ou pela equação de Schrödinger ou pela equação de Liouville. Sob estas circunstâncias, não esperamos que o sistema se aproxime do equilíbrio independentemente do estado inicial visto que a equação de Schrödinger promove transições apenas para autoestados que estejam na superposição inicial.

Este direcionamento ao equilíbrio a partir de um estado inicial arbitrário é justamente o sentido de relaxação utilizado nesta dissertação. No entanto, mesmo a definição de equilíbrio não é única porque depende da quantidade sendo analisada. Neste trabalho, analisaremos a evolução temporal dos valores médios das componentes de Fourier da magnetização $\langle S_Q^z \rangle_t$, sendo Q o número de onda que caracteriza cada componente. Dessa forma, devemos obter uma definição de equilíbrio a partir destes valores médios.

Quando o Hamiltoniano possui simetria de translação, a magnetização de equilíbrio é espacialmente homogênea. Consequentemente, as diversas componentes de Fourier tendem a zero, exceto a componente do modo homogêneo Q = 0, a qual depende do estado inicial e do Hamiltoniano. No entanto, tratamos sistemas com impureza, para os quais as operações de simetrias de translação são drasticamente reduzidas. Logo, no estado de equilíbrio espera-se que a magnetização não seja mais homogênea e que as componentes de Fourier tendam para um valor não nulo, o qual dependerá dos parâmetros do Hamiltoniano e do número de onda da decomposição.

Nos sistemas infinitos analisados em [7, 8] através do Método da Fase Estacionária (vide breve explicação contextualizada no Apêndice B) o equilíbrio é atingido assintoticamente para o limite de tempos infinitos e é caracterizado por uma magnetização espacialmente homogênea, dado que no limite termodinâmico as condições de contorno são irrelevantes. Nesses trabalhos anteriores, os números de onda k do problema são determinados através de condições de contorno periódicas nos operadores fermiônicos. No Capítulo 3, serão comparados os resultados obtidos nesta dissertação para sistemas finitos com os resultados obtidos em [7] no limite de Ising. Apontaremos as diferenças e semelhanças entre os sistemas finito e infinito.

Consideraremos que o direcionamento para o equilíbrio é realizado apenas por interações internas e flutuações quânticas. Assim, desprezaremos as interações externas, salvo duas possibilidades: primeiro, interações que possam ser descritas efetivamente através de parâmetros internos, como efeitos de campo cristalino por exemplo; em segundo lugar, interações que originam o estado inicial e são desligadas logo após a excitação do sistema.

Dado um pacote inicial arbitrário, à medida que o sistema evolui os autoestados presentes no pacote também evoluem de maneira diversa e, em geral, sofrem defasagem entre si. Dessa forma, o estado de equilíbrio continua sendo uma combinação linear de autoestados, porém com fases diferentes, o que gera interferência destrutiva no valor médio da magnetização. Devido a esta arbitrariedade do pacote inicial, faz-se necessário obter todo o espectro de excitações e não apenas aquele na vizinhança do estado fundamental. Isto representa uma limitação séria para cálculos computacionais. Além disso, mesmo se conhecermos o espectro completo de autovalores e autovetores — o que, a princípio, permite obter todas as grandezas físicas — o entendimento das propriedades do sistema não é evidente e imediata.

No que concerne às propriedades de equilíbrio, o entendimento do sistema advém do cálculo de quantidades como calor específico, susceptibilidade magnética e funções correlação spin-spin independentes do tempo, por exemplo. Por outro lado, quando se trata de propriedades dinâmicas, uma quantidade usualmente calculada é a função correlação spin-spin dependente do tempo (FCDT):

$$\langle S_{j}^{\gamma}(t)S_{k}^{\gamma}\rangle = \langle \exp(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)S_{j}^{\gamma}(t)\exp(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t)S_{k}^{\gamma}(t)\rangle$$
(1.2)

onde $\gamma = x, y, z$ é o índice das componentes de spin e $\langle ... \rangle$ é a média em equilíbrio térmico.

Este cálculo fornece a descrição de fenômenos como: ressonância nuclear magnética — através do tempo de relaxação spin-spin; espalhamento de nêutrons — através da seção de choque; dependência temporal de momentos magnéticos locais — através da susceptibilidade dinâmica; difusão de spin etc. Entretanto, apesar da gama de aplicações, as FCDT não fornecem uma descrição direta da dinâmica de não equilíbrio e sua aplicação está ligada a situações próximas ao estado de equilíbro, nas quais a teoria de resposta linear é válida.

Dessa forma, recorremos a um segundo método para investigar a dinâmica de não equilíbrio, a saber, o cálculo da evolução temporal de médias estatísticas da transformada de Fourier da magnetização em estados arbitrários:

$$\langle S_Q^z \rangle_t \equiv Tr[\rho(t)S_Q^z] \tag{1.3}$$

onde Q é o número de onda das componentes de Fourier, $\rho(t)$ é a matriz densidade que satisfaz a equação de Liouville e S_Q^z é a transformada de Fourier da magnetização. Discutiremos com maiores detalhes este método na seção 3.1.

Um ponto interessante a se notar é o fato de que muitos trabalhos na literatura assumem a premissa, implicita ou explicitamente, de que os processos dinâmicos ocorrem a partir de estados iniciais espacialmente uniformes. Por outro lado, o estudo de excitações espacialmente não uniformes é interessante tanto experimentalmente — uma vez que podem ser obtidas através da aplicação de campos magnéticos altamente não homogêneos ou ondas acústicas — quanto do ponto de vista teórico, uma vez que é possível obter resultados exatos a respeito da dinâmica e elucidar os processos de relaxação em sistemas mais complexos.

1.3 Problema Específico

A proposta inicial deste trabalho consiste em estudar a dinâmica quântica em cadeias de spins 1/2 na presença de impurezas ou defeitos.

Escolheu-se um sistema de baixa dimensão e com menor spin possível com o intuito de maximizar o efeito das flutuações quânticas. Consideramos a situação na qual os spins da cadeia estejam localizados e a impureza seja intersticial, isto é, esteja localizada próximo a dois sítios da rede. Esta impureza altera a interação de troca entre estes sítios através de uma interação de supertroca³, como mostrado pictoricamente na Fig.1.1. Dessa forma, o defeito na cadeia pode ser representado por uma condição de contorno arbitrária em um anel de spins.



Figura 1.1: Ilustração da Impureza de Contorno na Cadeia de Spins.

A dinâmica do sistema será analisada a partir de estados iniciais caracterizados por uma magnetização espacialmente não homogênea, ou seja, estados iniciais gerados por forte perturbações externas. Após retirarmos o sistema do equilíbrio, a excitação é removida e o sistema evolui naturalmente. É importante notar que o estado inicial não possui qualquer relação com o estado de equilíbrio.

Alguns modelos de cadeias de spin com uma impureza possuem solução exata. Eles incluem a família de modelos XY com campo transverso (spin 1/2). Em particular, o modelo de Ising quântico com campo transverso foi resolvido em [10] através da transformação de Jordan-Wigner. Sistemas quânticos com Hamiltonianos que possuem análogos clássicos são interessantes uma vez que ambos exibem a mesma criticalidade, isto é, o mesmo comportamento das grandezas do sistema próximas ao ponto crítico do modelo. O modelo de Ising unidimensional quântico, por exemplo, pode ser mapeado no modelo de Ising bidimensional clássico, cuja transição de fase é movida por flutuações térmicas.

 $^{{}^{3}}$ A interação de supertroca é definida em [9] como uma interação eletrônica entre duas entidades moleculares mediada por uma ou mais moléculas/íons diferentes.

Neste trabalho, centrar-nos-emos no estudo do modelo de Ising quântico. O Hamiltoniano efetivo de spin descreve a interação Coulombiana eletrostática entre os elétrons/íons. A interação de troca entre os spins surge da imposição de antissimetria sobre a função de onda de um sistema de férmions. Consideraremos constantes de troca ferromagnéticas e entre primeiros vizinhos. Notamos que o Hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, não há presença de fônons e o sistema é não dissipativo, visto que tratamos uma cadeia isolada.

Os Hamiltonianos unidimensionais são mais facilmente diagonalizáveis que os de dimensão superior, porém somente para casos particulares de condições de contorno pode-se obter soluções inteiramente analíticas e exatas. O Hamiltoniano de Ising quântico pode ser tratado através da transformação de Jordan-Wigner, a qual mapeia o sistema de spin 1/2 em um sistema de férmions sem spin. Dessa forma, obtendo-se o espectro podemos montar as equações que determinam a evolução temporal de um estado arbitrário.

A dinâmica do estado na cadeia pode também ser ilustrada através da dependência temporal da magnetização da cadeia. Este é um parâmetro macroscópico que poderá ser medido experimentalmente. Porém, na prática é mais simples obter a evolução temporal das componentes de Fourier da magnetização e verificar a relaxação lenta ou rápida em função do número de onda.

A motivação para a inserção da impureza advém primordialmente de três fatores: primeiro, a síntese experimental de cadeias de spin esbarra na possibilidade de que pequenos defeitos na cadeia apareçam, como, por exemplo, a participação de um átomo de oxigênio em uma ligação, criando uma interação de supertroca antiferromagnética; em segundo lugar, estudos anteriores revelam uma mudança abrupta do comportamento do parâmetro de ordem gap (isto é, a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental) para condições de contorno antiperiódicas. A bem conhecida convergência exponencial para zero transforma-se em uma convergência com lei de potência [10]; por fim, sabemos que cálculos numéricos para a cadeia de Heisenberg (modelo XXZ) mostram que particulares estados quânticos preparados na vizinhaça de impurezas em cadeias de spin mostram uma relaxação anômala, a qual pode ser relacionada a um efeito de emaranhamento do estado quântico com a impureza [11]. Tal fenômeno não é observado se os estados são preparados longe da impureza.

Além dos fatores que incentivaram o tratamento de impurezas, a escolha de cadeias de spin 1/2 é motivada também por estudos anteriores nos quais Berim, Cabrera e colaboradores, trabalhando com cadeias magnéticas modeladas pelo modelo XY quântico no limite de tempos longos, descobriram estados de superposição muito especiais que se preservam por tempos muito longos [8, 12, 13]. Na prática, tais estados podem ser construídos como excitações não-homogêneas da cadeia e são representados por uma matriz densidade inicial ρ_0 dada por um funcional de apenas uma componente de spin. Podemos entender a evolução temporal destes estados de superposição especiais através da decomposição da excitação inicial em sua série de Fourier. Observamos que as diferentes componentes relaxam de maneira diversa e, como regra geral, a maioria dos componentes interferem destrutivamente entre si. A relaxação é então dominada pela contribuição de pontos de fase estacionária, na vizinhança dos quais a interferência é construtiva. Este fenômeno conduz a uma relaxação muito lenta da magnetização, dada por uma lei de potência no tempo do tipo $(t/\tau_Q)^{-\nu_Q}$, onde τ_Q e ν_Q são dois parâmetros dependentes do número de onda Q. O parâmetro τ_Q está ligado ao tempo de relaxação do sistema e o expoente ν_Q está ligado à velocidade do processo de relaxação — quanto menor o expoente, mais lentamente o sistema evolui para o estado de equilíbrio.

A presença de pontos estacionários degenerados nestes sistemas implica a existência de criticalidade⁴ no expoente ν_Q em relação ao número de onda Q. Para certos valores críticos Q_c , dependentes dos parâmetros do Hamiltoniano, há um retardamento da relaxação — similar à fenômenos que ocorrem próximos a transições de fase—tal que o tempo de relaxação τ_Q diverge e o expoente ν_Q da lei de potência muda descontinuamente. Conjecturou-se que este comportamento crítico decorre da presença de gap no modelo. Neste trabalho, verificaremos se estes processos lentos estão presentes na cadeia com impureza.

Vale a pena ressaltar a diferença entre esta criticalidade referente à dinâmica do sistema e a criticalidade dos modelos de spin, como o de Ising com campo transverso. A primeira está relacionada a pontos estacionários degenerados e a processos mais lentos de relaxação do sistema fora do equilíbrio. A segunda está relacionada ao comportamento estático do sistema no estado fundamental.

⁴Sabemos que, a rigor, definem-se fenômenos críticos apenas para sistemas infinitos. No entanto, neste trabalho procuraremos marcas da criticalidade nos sistemas finitos e utilizaremos o termo criticalidade, apesar do abuso de linguagem.

Capítulo 2

Propriedades Estáticas do Modelo

Neste capítulo serão desenvolvidos os processos analítico e numérico de diagonalização do Hamiltoniano de Ising quântico com campo transverso e uma impureza. Em ambos os casos utilizaremos a transformação de Jordan-Wigner para realizar o mapeamento de um sistema de spin 1/2 para um sistema de quase partículas 'livres', as quais representam as excitações acima do estado fundamental. Discutiremos também a estrutura do estado fundamental para os casos de condições de contorno periódicas e antiperiódicas. Por fim, analisaremos a relação de dispersão e o gap no modelo.

2.1 Mapeamento em um Sistema de Férmions Livres

A cadeia de spins com impureza será tratada através do Hamiltoniano de Ising com campo transverso e condição de contorno arbitrária:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{n}^{N-1} \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x - \Gamma \sum_{n=1}^N \sigma_n^z - J_0 \sigma_N^x \sigma_1^x$$
(2.1)

onde J > 0 é a energia de troca ferromagnética, $\sigma_n^{x,z}$ são os operadores de Pauli, Γ é o campo magnético transverso e J_0 é a energia de troca entre os sítios das extremidades (ligação da impureza).

O primeiro termo descreve a interação de troca ferromagnética entre primeiros vizinhos. Supomos que a função de onda de um spin no sítio n apenas se sobrepõe às funções de onda de seus vizinhos mais próximos. O segundo termo descreve a interação do campo magnético com a componente z do spin de todos os sítios. O último termo descreve a interação entre o último sítio e o primeiro. Como notado na seção 1.2, devido à presença de mais de uma componente do spin no Hamiltoniano haverá naturalmente dinâmica no sistema e o campo magnético transverso será responsável pelas flutuações quânticas. Este parâmetro é também responsável pela transição de fase quântica observada no modelo, a qual será discutida na seção 2.4.

Convencionamos $\hbar = 1$ em todos os cálculos deste trabalho e definimos as grandezas adimensionais:

$$g \equiv \frac{J_0}{J} \qquad h \equiv \frac{\Gamma}{J} \tag{2.2}$$

Dessa forma, a definição de g engloba a condição de contorno. Para g = 0 temos bordas livres, para g = 1 temos o caso periódico (todos acoplamentos homogêneos) e para g = -1 temos o caso antiperiódico, o que equivale a uma impureza antiferromagnética.

O problema da diagonalização no modelo de Ising com campo transverso consiste originalmente em uma matriz de dimensão 2^N no espaço dos spins, visto que cada um dos N sítios da cadeia pode assumir dois estados ($\sigma_j = \pm 1$). Como o campo transverso acopla estados do tipo produto direto, resolver o problema neste espaço seria custoso computacionalmente e reduziria o número de sítios drasticamente.

Para contornar este obstáculo é possível transformar o sistema original em um sistema sem spin, o que reduz a dimensão da matriz a ser diagonalizada para N. Este passo é realizado através da transformação de Jordan-Wigner [14], que mapeia o sistema de N férmions de spin 1/2 em um sistema de N férmions 'livres' sem spin em termos dos operadores escada (σ^+, σ^-):

$$C_n = L_n \sigma_n^- \tag{2.3a}$$

$$C_n^{\dagger} = L_n \sigma_n^+ \tag{2.3b}$$

onde $L_n \equiv \exp[\pm i\pi \sum_j^{n-1} \sigma_j^+ \sigma_j^-] = \exp[\pm i\pi \sum_j^{n-1} C_j^\dagger C_j].$

Podemos associar o número total de férmions ao spin total da cadeia:

$$\mathcal{N}_{c} = \sum_{n=1}^{N} C_{n}^{\dagger} C_{n} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} (\sigma_{n}^{z} + 1)$$
(2.4)

Utilizando a transformação (2.3) e as relações de anticomutação fermiônicas, o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = Nh - 2h \sum_{n} C_{n}^{\dagger} C_{n} - \sum_{m((2.5)$$

onde H.c. é o hermitiano conjugado.

A presença do número total de férmions através do operador sinal $P \equiv \exp(i\pi \mathcal{N}_c)$ faz com que o problema seja dependente da paridade, exceto para o caso em que g = 0 (extremidades livres). Notamos que o operador sinal comuta com o Hamiltoniano (2.5), o que implica a conservação da paridade. Apesar de termos como $C^{\dagger}C^{\dagger}$ violarem a conservação do número de férmions, a forma quadrática de (2.6) nos operadores fermiônicos garante a integrabilidade do modelo. Outros modelos mais gerais para cadeias de spin 1/2 não são tratáveis através desta abordagem. Um exemplo disto é o modelo de Heisenberg, o qual possui termos do tipo $\sigma_n^z \sigma_{n+1}^z$, ou seja, férmions interagentes.

Para encontrar o espectro do sistema devemos expressar os operadores $\{C_n, C_n^{\dagger}\}$ em termos de operadores $\{\eta_k, \eta_k^{\dagger}\}$ que diagonalizam o Hamiltoniano. Com este intuito, primeiramente o escrevemos em sua forma bilinear canônica:

$$\mathcal{H} = Nh + \sum_{m,n} [C_m^{\dagger} A_{mn} C_n + \frac{1}{2} (C_m^{\dagger} B_{mn} C_n^{\dagger} + H.c.)]$$
(2.6)

onde A_{mn} é a matriz simétrica:

$$A_{mn} = \begin{pmatrix} -2h & -1 & 0 & \dots & 0 & gexp(i\pi\mathcal{N}_c) \\ -1 & -2h & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & -2h & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots \\ \vdots & & & & & -1 \\ gexp(i\pi\mathcal{N}_c) & 0 & \dots & \dots & -1 & -2h \end{pmatrix}$$
(2.7)

e B_{mn} é a matriz anti-Hermitiana:

$$B_{mn} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & \dots & \dots & -gexp(i\pi\mathcal{N}_c) \\ 1 & 0 & -1 & \dots & & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & -1 & \dots & & \vdots \\ \vdots & & \dots & 1 & \dots & & & \vdots \\ \vdots & & & 0 & -1 \\ gexp(i\pi\mathcal{N}_c) & \dots & \dots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(2.8)

Em ambas as matrizes a impureza é inserida através de termos não diagonais. Esta é uma forma de introduzirmos desordem no sistema, a qual é chamada convenientemente de desordem não diagonal.

Para diagonalizar $\mathcal H$ tentamos a transformação linear canônica:

$$\eta_k \equiv \sum_n (g_{kn}C_n + h_{kn}C_n^{\dagger}) \tag{2.9a}$$

$$\eta_k^{\dagger} \equiv \sum_n (g_{kn}C_n^{\dagger} + h_{kn}C_n) \tag{2.9b}$$

onde os coeficientes $g \in h$ são reais.

O problema é melhor descrito em termos das funções:

$$\phi_n^k \equiv g_{kn} + h_{kn} \tag{2.10a}$$

$$\psi_n^k \equiv g_{kn} - h_{kn} \tag{2.10b}$$

Logo, o espectro é encontrado solucionando o sistema:

$$\omega_k \phi^{(k)} = \psi^{(k)} (A + B) \tag{2.11a}$$

$$\omega_k \psi^{(k)} = \phi^{(k)} (A - B) \tag{2.11b}$$

Para $\omega_k \neq 0$ obtemos equivalentemente o problema de autovalores-autove
tores:

$$\omega_k^2 \phi^{(k)} = \phi^{(k)} (A - B) (A + B)$$
(2.12a)

$$\omega_k^2 \psi^{(k)} = \psi^{(k)} (A+B)(A-B)$$
(2.12b)

Então definimos as matrizes simétricas $G \equiv (A - B)(A + B)$ e $G' \equiv (A + B)(A - B)$:

$$G = \begin{pmatrix} 4h^2 + 4g^2 & 4h & 0 & \cdots & -4hgexp(i\pi\mathcal{N}_c) \\ 4h & 4h^2 + 4 & 4h & \cdots & 0 \\ 0 & 4h & 4h^2 + 4 & 4h & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$
(2.13a)

$$\left(\begin{array}{cccc} \vdots & & 4h \\ -4hgexp(i\pi\mathcal{N}_c) & 0 & \cdots & 0 & 4h & 4h^2 + 4 \end{array}\right)$$

(2.13b)

Dessa forma, reduzimos o problema a diagonalizar estas duas matrizes. Notamos que para $g = \pm 1$ as duas matrizes são iguais e, consequentemente, os coeficientes h_{kn} serão nulos.

Os novos operadores (2.9) preservam as relações de anticomutação fermiônicas e reduzem o Hamiltoniano à forma quadrática fermiônica:

$$\mathcal{H} = \sum_{k} \omega_k (\eta_k^{\dagger} \eta_k - \frac{1}{2})$$
(2.14)

com energia de excitação ω_k .

As condições de contorno determinam os modos k permitidos através da equação secular:

$$(g^2 - 1)\left[\frac{\sin(kN)}{\sin k} + g(1 - P)\cos k\right] +$$
(2.15)

$$h[g^2 \frac{\sin[k(N-1)]}{\sin k} - \frac{\sin[k(N-1)]}{\sin k} - 2gP] = 0$$

onde $P \equiv \exp(i\pi N_c)$ é o operador sinal e os autovalores são dados por:

$$\lambda_k = \omega_k^2 = 4(1 + 2h\cos k + h^2) \tag{2.16}$$

Para condições de contorno arbitrárias, esta equação deve ser resolvida numericamente. Porém, há três casos nos quais a solução pode ser obtida em forma fechada, a saber, condições de contorno livres (L), periódicas (P) e antiperiódicas (AP). Os dois últimos casos implicam $g = \pm 1$ e reduzem a eq.(2.15) às expressões:

$$\cos(kN) = -g\exp(i\pi\mathcal{N}_c) \tag{2.17a}$$

$$\sin(kN) = 0 \tag{2.17b}$$

Se o número de sítios N for par obtemos os valores de k:

$$k_P = \pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, ..., \pm \frac{(N-1)\pi}{N}.$$
 (2.18a)

$$k_{AP} = 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, ..., \pm \frac{(N-2)\pi}{N}.$$
 (2.18b)

Equivalentemente, se ${\cal N}$ for ímpar temos que:

$$k_P = 0, \pm \frac{2\pi}{N}, \pm \frac{4\pi}{N}, ..., \pm \frac{(N-1)\pi}{N}.$$
 (2.19a)

$$k_{AP} = \pm \frac{\pi}{N}, \pm \frac{3\pi}{N}, ..., \pm \frac{(N-2)\pi}{N}, \pi.$$
 (2.19b)

Um fato muito interessante que surge no espectro para $g \neq \pm 1$ é a existência de um autovalor de energia para o qual não há k correspondente na equação secular, ou seja, há um modo que se separa da banda k. Através da verificação de que os autoestados correspondentes a estes autovalores são localizados¹, inferimos que o estado é ligado e possui energia negativa, isto é, $\omega_k = -\sqrt{\lambda_k}$. Apenas a diagonalização numérica de G e G' revela este fato.

Dessa forma, os estados ligados implicam o surgimento de pequenos gaps na banda de energia: Δ_a , entre o estado de mais alta energia e os demais estados e Δ_b , entre o estado de mais baixa energia e os demais. A Fig. 2.1 mostra os casos em que cada um dos gaps surge. No caso de maior interesse para este trabalho, isto é, g < -1, há somente Δ_a .

$$\omega_k^2 \qquad \qquad \qquad \Delta_a \neq 0 \text{ se } g < -1 \text{ ou } g > 1$$

Figura 2.1: Espectro de autovalores $\lambda_k = \omega_k^2$ na presença de uma impureza. Quando g < -1, surge um gap Δ_a indicando que um estado se separou da banda k. Como o estado é ligado, seu autovalor de energia é negativo de modo que $\omega_k = -\sqrt{\lambda_k}$.

Devemos ressaltar também que os cálculos numéricos confirmaram a ortogonalidade da transformação (2.9). Com isso, a matriz dos coeficientes transformação inversa é simplesmente a transposta da transformação original e, consequentemente, podemos escrever:

$$C_n = \sum_k (g_{kn}\eta_k + h_{kn}\eta_k^{\dagger})$$
(2.20a)

$$C_n^{\dagger} = \sum_k (g_{kn}\eta_k^{\dagger} + h_{kn}\eta_k)$$
(2.20b)

Portanto, os coeficientes $g_{kn} e h_{kn}$ são responsáveis pela transformação dos operadores fermiônicos $\{C_n, C_n^{\dagger}\}$ prescritos pela transformação de Jordan-Wigner nos operadores fermiônicos $\{\eta_k, \eta_k^{\dagger}\}$ que tornam o problema diagonal. Assim, torna-se interessante estudar o comportamento de g_{kn} e h_{kn} , o que pode ser feito através dos autoestados obtidos através da diagonalização numérica. Este assunto será discutido na seção 2.3.

¹Autoestados localizados correspondem a vetores cujas entradas são, em sua maioria, nulas. Há apenas uma pequena faixa (localizada) de valores não nulos.

2.2 Estado Fundamental

Quando as condições de contorno são periódicas, antiperiódicas ou de bordas livres (g = 1, -1, 0, respectivamente) podemos diagonalizar analiticamente o Hamiltoniano (2.5) introduzindo duas transformações: de Fourier e de Bogoliubov.

A transformada de Fourier, também utilizada na diagonalização de modelos *tight-binding*, leva o problema para o espaço dos momentos:

$$C_n = \frac{1}{N} \sum_k e^{ikn} b_k \tag{2.21a}$$

$$C_n^{\dagger} = \frac{1}{N} \sum_k e^{-ikn} b_k^{\dagger} \tag{2.21b}$$

onde o operador b_k destrói uma onda de spin com momento k no espaço recíproco e os valores permitidos para o número de onda k são determinados através das condições de contorno — vide eqs. (2.18) e (2.19).

Com isso desacoplamos parcialmente o problema, restando apenas um acoplamento de modos do tipo (k, -k) para $-\pi \le k < \pi$.

A diagonalização completa é então encontrada com a transformação de Bogoliubov:

$$b_{-k} = (\cos\theta_k) \eta_{-k} + i(\sin\theta_k) \eta_k^{\dagger}$$
(2.22a)

$$b_k^{\dagger} = (\cos\theta_k) \eta_k^{\dagger} + i(\sin\theta_k) \eta_{-k}$$
(2.22b)

onde o ângulo θ_k é obtido através da equação:

$$\tan(2\theta_k) = \frac{\sin k}{h + \cos k} \tag{2.23}$$

Como um produto da transformação (2.22) encontramos a energia de excitação, a qual é definida positiva:

$$\omega_k = 2(1 + 2h\cos k + h^2)^{1/2} \ge 0 \tag{2.24}$$

Os operadores fermiônicos $\{\eta, \eta^{\dagger}\}$ da eq. (2.22) são os mesmos definidos na eq. (2.9). Estas duas definições e o Hamiltoniano diagonal (2.14) implicam um estado fundamental duplamente ocupado por pares (k, -k), exceto quando os modos k = 0, π são permitidos.

Dessa forma, a estrutura do estado fundamental |EF >é muito semelhante à estrutura do estado fundamental supercondutor da teoria BCS².

Expressamos |EF> como um produto tensorial de estados da forma:

$$\left[\cos\theta_{k} - i(\sin\theta_{k})b_{k}b_{k}^{\dagger}\right]\left|0\right\rangle \tag{2.25}$$

onde $|0\rangle$ denota o vácuo dos férmions e representa o estado fundamental.

Como $\omega_k \ge 0$, o estado | 0 > também é vácuo para as excitações de partícula definidas através dos operadores η , isto é, nenhum estado de partícula η está ocupado.

Logo, temos que a relação $\eta_k | 0 >= 0$ é satisfeita para todo k e, consequentemente:

$$\eta_k | EF \rangle = 0 \qquad \qquad \forall k \tag{2.26}$$

A energia do estado fundamental será então dada por:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k \tag{2.27}$$

Por outro lado, os estados excitados são criados ocupando os estados de partícula única e podem ser classificados através do número total de estados ocupados.

Como o operador η muda em uma unidade o número de férmions temos que:

$$\exp(i\pi\mathcal{N}_c)\eta_k\exp(i\pi\mathcal{N}_c) = -\eta_k \tag{2.28}$$

Aplicando esta condição à eq.(2.26) pode-se observar que o estado fundamental possui paridade bem definida:

$$\exp(i\pi\mathcal{N}_c)|EF\rangle = \pm |EF\rangle \tag{2.29}$$

Notamos que, para os casos de condições periódicas e antiperiódicas, há estados excitados com paridade diferente da paridade de seus estados fundamentais. Tais estados são definidos em relação a um estado fundamental 'virtual' cuja paridade é menos a paridade do estado fundamental.

 $^{^{2}}$ Em meados da década de 1950, Bardeen, Cooper e Schrieffer desenvolveram a primeira teoria microscópica para descrever a supercondutividade (tipo I).

A idéia central consiste na formação de pares de elétrons (chamados pares de Cooper) próximos ao nível de Fermi, os quais surgem devido à interação com a rede cristalina (fônons).

2.3 Estudo das Funções g_{kn} e h_{kn}

Nesta seção estudaremos o comportamento dos coeficientes g_{kn} e h_{kn} , os quais dependem de dois índices: k, referente aos autovalores, e n, referente aos sítios da cadeia.

Esperamos que para os casos $g = \pm 1$, o comportamento seja oscilatório (como indicam as transformações de Fourier e de Bogoliubov). Entretando, para g < -1 esperamos um comportamento distinto, de modo que a presença da impureza seja identificada.

Para cada valor de k, ou seja, para cada autovalor da diagonalização, temos N valores para os coeficientes, onde N é o número de sítios. No caso de condições de contorno periódicas e antiperiódicas, há degenerescência dupla nos autovalores. A Fig. 2.2 mostra o coeficiente g_{kn} em função dos sítios da cadeia para alguns autovalores.



Figura 2.2: Coeficiente g_{kn} em função do sítio n para o caso periódico (g = 1.0) e parâmetros N = 100 e h = 0.2. No caso periódico, há estados duplamente degenerados, o que implica dois comportamentos distintos de g_{kn} para o mesmo autovalor de energia. Para os autovalores $\omega_k = 1.783, 2.049$ graficamos apenas um dos estados, uma vez que são praticamente idênticos. Os coeficientes h_{kn} são todos nulos.

Notamos que, em geral, não há sítios mais privilegiados que outros quanto ao valor do coeficiente, ou seja, os estados estão distribuídos homogeneamente, como era de se esperar para o caso periódico.

Entretanto, para os casos nos quais g < -1.0 há um comportamento diferente quando o estado é ligado (autovalor de energia negativo), a saber: os coeficientes g_{kn} e h_{kn} referentes a tal estado são nulos, salvo para os sítios próximos à impureza, como é mostrado na Fig. 2.3.



Figura 2.3: Coeficientes g_{kn} e h_{kn} em função do sítio n com parâmetros N = 100, g = -1.5 e h = 0.2. Quatro autovalores foram escolhidos, sendo o último referente ao estado ligado.

Este comportamento era esperado uma vez que para $g \neq 1$ surge o efeito de localização nos autoestados. Este efeito é causado pela presença da impureza e com ele surge um estado ligado separado por um *gap* do espectro contínuo de energia, como discutido na seção 2.1.

Os coeficientes g_{kn} e h_{kn} terão papel fundamental no cálculo da evolução temporal da magnetização, como veremos em breve na seção 3.3.2.

2.4 Relação de Dispersão e Gap

A relação de dispersão é dada por:

$$\omega_k = 2(1 + 2h\cos k + h^2)^{1/2} \tag{2.30}$$

onde definimos $\hbar \equiv 1$.

Ressaltamos que para o caso no qual $g \neq \pm 1$, há um estado que se separa da banda k dada pela relação de dispersão acima.

Para $k = \pi$ a energia de excitação (2.30) é mínima e dada por:

$$\omega_k = 2|h-1| \equiv \Delta \tag{2.31}$$

Nesta condição definimos o parâmetro de ordem gap (Δ), o qual se anula em $h = h_c = 1$ e denota o equivalente quântico do inverso do comprimento de correlação em sistemas clássicos. A Fig. 2.4 mostra as curvas de dispersão para o caso periódico e diferentes valores do campo magnético transverso. Notamos a existência do gap nas curvas sempre que $h \neq 1$.



Figura 2.4: Relação de dispersão ω_k em função do número de onda k/π para campos transversos h = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0. O gap é nulo para h = 1.

O modo particular $k = \pi$ é responsável pela transição de fase no limite termodinâmico. A fase na qual $h < h_c$ possui ordem de longo alcance enquanto a fase com $h > h_c$ é desordenada.

É importante ressaltar que a singularidade neste caso ocorre no estado fundamental do sistema e, consequentemente, a transição de fase quântica ocorre a temperatura nula. O gap representa a escala que caracteriza uma significante densidade espectral de flutuações em T = 0 para $h \neq h_c$. A transição de fase quântica (de segunda ordem) então ocorrerá no momento em que a escala de energia das flutuações acima do estado fundamental se anular [15]. Há uma interessante dependência do *gap* com a condição de contorno para este modelo quando o sistema é finito. Quando as condições de contorno são antiperiódicas, a bem conhecida convergência exponencial do *gap* para zero muda para uma lei de potência.

Neste contexto há efeitos de tamanho, isto é, há dependência com o número de sítios da cadeia N. Em [10] supôs-se uma dependência assintótica para grandes valores de N da forma:

$$\Delta(N) = AN^{-\alpha} \exp(-\sigma N) \tag{2.32}$$

onde as quantidades $\alpha \in \sigma$ podem geralmente depender de h e da condição de contorno através do parâmetro g.

A partir de extrapolações baseadas na teoria de escala de tamanho finito, obtiveram-se os resultados mostrados na Fig. 2.5.



Figura 2.5: Extrapolação dos valores de σ e α em função do parâmetro g. Os resultados exatos estão indicados por círculos e os numéricos por barras de erro. As curvas A, B e C correspondem a valores de campo magnético transverso h = 0.3, 0.5, 0.7, respectivamente. Figura retirada da referência [10].

Para o caso de bordas livres (g = 0), há comportamento assintótico exponencial no qual $\sigma(N)$ converge para o valor -ln $h \in \alpha(N)$ converge rapidamente para zero. Em geral, para condições de contorno arbitrárias, sujeitas ao vínculo $g \ge 0$, mantém-se este comportamento exponencial.

Por outro lado, para condições de contorno antiperiódicas (g = -1) os resultados numéricos mostraram um comportamento assintótico inteiramente diferente. A convergência exponencial é substituída por uma convergência através de uma lei de potência com $\alpha = 2$ e $\sigma = 0$. Outra visão bastante interessante sobre a transição de fase no modelo de Ising quântico é relatada na referência [16]. Neste artigo, Kogut relaciona a transição de fase no modelo de Ising bidimensional clássico à condensação de objetos topológicos chamados *kinks*.

Sabemos que neste modelo a magnetização M comporta-se como um parâmetro de ordem local. Logo, ela é não nula a baixas temperaturas e anula-se continuamente à medida que a temperatura T aproxima-se da temperatura crítica T_c , permanecendo nula para temperaturas maiores. Dessa forma, a magnetização indica que na fase de baixas temperaturas há quebra espontânea da simetria global up-down do Hamiltoniano do sistema.

Por outro lado, é possível analisar a magnetização de um ponto de vista diferente através da autodualidade³ do modelo.

Através da transformação dual e da teoria de perturbação de primeira ordem encontramos que o operador:

$$\hat{O}_n \equiv \prod_{m < n} \sigma_1(n) \tag{2.33}$$

possui um valor esperado não nulo na fase de altas temperaturas do modelo original. Este operador é correntemente chamado de parâmetro de "desordem" e possui uma interpretação física interessante.

Aplicando o operador desordem a um estado completamente ordenado (todos os spins para cima, por exemplo), este operador fará com que todos os spins à esquerda do sítio n sejam virados (para baixo, neste caso), criando um *kink* ou parede de Bloch. Como a energia do estado *kink* está localizada nas vizinhanças do sítio n, podemos pensar neste estado como uma excitação de quase partícula.

O cálculo da massa dos *kinks* em potências de λ^{-1} é idêntico ao cálculo da massa dos estados de spin virado em potências de λ . Assim, o gap de massa $\Delta(\lambda) = 2|1 - \lambda|$ aplica-se ao *kink* na fase de baixas temperaturas.

Além disso, como sabemos que o valor esperado no vácuo do operador de desordem é não nulo em altas temperaturas, o estado fundamental desta fase é um "condensado de *kinks*".

 $E(\lambda) = \lambda E(\lambda^{-1})$ onde λ é o parâmetro que induz a transição de fase

³O mapeamento entre os comportamentos em altas e em baixas temperaturas no modelo de Ising é chamado transformação "dual". Neste caso, o Hamiltoniano obtido com os operadores duais μ_1, μ_3 possui a mesma forma do Hamiltoniano inicial com os operadores σ_1, σ_3 , expressando um simetria do modelo chamada "autodualidade". Esta propriedade revela que as propriedades em baixas e em altas temperaturas são mapeadas umas nas outras. Como implicação direta temos que os autovalores satisfazem:

Se considerarmos o gap de massa $\Delta(\lambda)$ e supormos que ele se anula em algum ponto (único), é necessário satisfazer $\lambda = \lambda^{-1}$, uma vez que se o gap é nulo para λ ele também o é para λ^{-1} . Logo, o ponto crítico será $\lambda_c = 1$, como encontramos anteriormente.

Recentemente, um estudo publicado na Science revelou experimentalmente que, de fato, exóticas simetrias podem emergir e governar o espectro de excitações em cadeias de spin de Ising próximas ao ponto crítico [17]. Um excelente sistema para a análise foi utilizado, a saber: o ferromagneto isolante quase 1D CoNb₂O₆. Neste ferromagneto, os íons magnéticos Co²⁺ estão arranjados em cadeias em zig-zag quase isoladas ao longo do eixo c, com forte eixo de anisotropia devido a efeitos de campo cristalino [Fig.2.6A].

O sistema CoNb_2O_6 ordena-se ferromagneticamente a temperaturas abaixo de $\text{T}_N = 2.95$ K e os momentos magnéticos apontam na direção local de Ising, contida no plano *ac* do cristal. Dessa forma, com a aplicação de um campo magnético externo ao longo do eixo *b* é possível induzir a transição de fase. Neste caso, o campo crítico é $\text{B}_C = 5.5$ T.

O diagrama de fase [Fig.2.6B] mostra a competição entre a interação de troca ferromagnética e o campo magnético transverso. Neste contexto, as excitações esperadas são (i) pares de kinks, cuja representação é $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow_z$... > abaixo de B_C e (ii) quase partículas de spin virado $\mid \rightarrow\rightarrow\leftarrow\rightarrow_x$... > acima de B_C. Notamos que os kinks interpolam-se entre dois estados fundamentais degenerados com magnetização espontânea ao longo de eixo +z e -z, respectivamente.



Figura 2.6: A) Cadeia de Ising em zig-zag no ferromagneto $CoNb_2O_6$. B) Diagrama de fase da cadeia de Ising em campo transverso. Figura retirada da referência [17].

Para criar as quase partículas, a cadeia de spins é excitada através de espalhamento inelástico de nêutrons do tipo spin-*flip* [Fig.2.7A]. Quando ($B < B_C$), cada nêutron vira um spin da cadeia, o que gera um par de paredes de domínio, ou *kinks*, que podem se propagar. Quando ($B < B_C$), o nêutron também virar um spin, porém esta excitação não pode se propagar uma vez que o sistema paramagnético possui apenas um único estado fundamental.

Após criar as quase partículas, analisou-se o espectro de energia em função do vetor de onda ao longo da cadeia L para campos magnéticos transversos próximos ao valor crítico [Fig. 2.7]. Para a fase ordenada (B<B_C) [Figs. 2.7B e C], o espectro é um contínuo, com contornos dispersivos e bastante espesso no centro da zona (L = 0). Este contínuo decorre do espalhamento por um par de kinks. À medida que se aumenta o campo magnético, este contínuo aumenta em largura de banda. Para a fase desordenada ($B>B_C$) [Fig. 2.7E], o espectro torna-se totalmente diferente e é dominado por um único modo bem definido, que é justamente a assinatura de uma fase paramagnética quântica. No ponto crítico [Fig. 2.7D], o sistema é governado por flutuações quânticas, ao invés de térmicas, e possui traços de ambos os espectros.

É interessante notar que no presente projeto estudaremos a evolução temporal de estados iniciais ferromagnéticos com um único spin virado, idênticos àqueles obtidos no experimento descrito acima.



Figura 2.7: A) Ilustração do "flip" de um spin através do espalhamento de nêutrons. (B-E) Intensidade de espalhamento para quatro valores de campo magnético transverso como função da energia e do vetor **L**, que é a diferença vetorial entre os momentos inicial e final do nêutron espalhado (em unidades de $2\pi/c$).

Antes de analisarmos a dinâmica do sistema com impureza, é interessante voltarmos às curvas de dispersão da Fig. 2.4. Observamos outra característica importante, a saber, a ausência de *nesting*, o qual é caracterizado por pontos de inflexão nos quais as derivadas primeiras possuam o mesmo valor e as derivadas segundas sejam nulas. Graficamente, o *nesting* pode surgir se dois trechos da curva de dispersão forem paralelos, o que não acontece na Fig. 2.4.

Nos processos de relaxação em cadeias XY de spin 1/2 há uma conexão entre a existência de nesting e gap no espectro do Hamiltoniano e o surgimento de modos críticos, cuja relaxação é mais lenta que outros modos. Conjecturou-se que este slowing down do processo de relaxação é universal para Hamiltonianos de sistemas de spin 1/2 unidimensionais nos quais estes fenômenos estão presentes. Testaremos esta conjectura para o sistema com uma impureza.

Capítulo 3

Dinâmica de Excitações Espacialmente Não-Homogêneas

Neste capítulo, estudaremos a evolução temporal das componentes de Fourier da magnetização em cadeias de spin 1/2 com uma impureza. Primeiramente, elucidaremos o método utilizado e a grandeza analisada. Em seguida, utilizando o espectro de autovalores e autovetores obtidos tanto analiticamente quanto numericamente no Capítulo 2, analisaremos como a magnetização da cadeia relaxa em função da condição de contorno e do número de sítios da cadeia. Primeiramente, revisaremos o caso em que o sistema possui condição de contorno periódica nos operadores fermiônicos e compararemos os resultados com aqueles obtidos anteriormente no grupo através do método da fase estacionária — limite de tempo e cadeia infinitos [7]. Em seguida, trataremos as condições de contorno nos operadores de spin, elencando as diferenças observadas entre as duas abordagens. Para condições periódica e antiperiódica nas variáveis de spin veremos que as relaxações, quando existem, coincidem até a primeira reconstrução parcial e são amortecidas por uma lei de potência. Por outro lado, para os casos de impureza arbitrária, cuja resolução deve ser numérica, observamos um amortecimento distinto, no qual as componentes de Fourier não se extinguem completamente.

3.1 Grandeza de Interesse

Como discutido na seção 1.2, o cálculo de funções correlação dependentes do tempo não é o método mais adequado para o estudo das propriedades dinâmicas de interesse neste trabalho. Dessa forma, devemos seguir outra abordagem que revele de forma direta informações a respeito da evolução temporal de não equilíbrio de um observável físico A, independentemente de quão longe o estado inicial esteja do estado de equilíbrio.
Com este intuito calcularemos médias do tipo:

$$\langle A \rangle_t = Tr[\rho(t)A] \tag{3.1}$$

onde $\rho(t)$ é a matriz densidade que satisfaz a equação de Liouville:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [\mathcal{H},\rho(t)] \tag{3.2}$$

Este tipo de cálculo fornece informações a respeito do comportamento global da cadeia e das criticalidades na relaxação. Poucos resultados exatos são conhecidos para os cálculos destas médias. Em especial, Berim e Kessel mostraram que soluções exatas podem ser obtidas no caso em que a matriz densidade é um funcional de apenas uma componente do operador de spin [18]:

$$\rho(0) = F(S^{\gamma}) \qquad \gamma = x, y, z \tag{3.3}$$

Esta condição pode ser preparada em sistemas reais a baixas temperaturas através de um campo magnético fortemente não-homogêneo na direção γ . É importante salientar que a hipótese (3.3) não restringe a forma da matriz densidade. Pelo contrário, ela é arbitrária em uma das coordenadas e pode descrever pacotes iniciais não homogêneos ao longo da cadeia. Esta hipótese é vantajosa para o cálculo analítico uma vez que os termos contidos nas médias que independam da coordenada escolhida são nulos.

Dessa forma, a quantidade de interesse a ser analisada neste trabalho é a componente z dependente do tempo da magnetização espacialmente não homogênea:

$$\langle S_Q^z \rangle_t \equiv Tr[\rho(t)S_Q^z] \tag{3.4}$$

onde $\rho(t)$ é a matriz densidade; Q é o número de onda que caracteriza a não homogeneidade espacial do estado inicial e S_Q^z é a transformada de Fourier da magnetização definida como:

$$S_Q^z(t) \equiv \sum_{n=1}^N S_n^z(t) \exp[iQn]$$
(3.5)

onde N é o número de sítios da cadeia, o parâmetro de rede foi convencionado a = 1 e os valores de Q são dados por:

$$Q = \frac{2\pi q'}{N} \qquad q' = -\frac{N}{2} + 1, ..., \frac{N}{2}$$
(3.6)

Devido à invariância do traço sob permutações cíclicas de seus argumentos temos a identidade:

$$\langle S_Q^z \rangle_t = \langle S_Q^z(t) \rangle_0 \equiv Tr[\rho(0)S_Q^z(t)]$$
(3.7)

a qual permite calcularmos a média com $\rho(0)$ ao invés de $\rho(t)$.

Para obter resultados exatos são necessários os seguintes passos:

- Diagonalizar o Hamiltoniano utilizando a representação de férmions através da transformação de Jordan-Wigner. Para os casos analíticos, utilizou-se também as transformações de Fourier e de Bogoliubov. No final, obtemos um sistema de férmions independentes sem spin;
- 2. Colocar S_Q^z em termos dos operadores fermiônicos $\{\eta, \eta^{\dagger}\}$ a fim de obter sua dependência temporal;
- 3. Tomar a média do resultado anterior, $S_Q^z(t)$, com a matriz densidade inicial dada pela eq.(3.3).

O primeiro passo foi descrito no Capítulo 2. Os dois últimos serão descritos nas próximas seções. Primeiramente, revisaremos o caso periódico nas variáveis fermiônicas (C-cíclico). Alguns cálculos detalhados são mostrados no apêndice A. Em seguida, tomaremos os casos de condições de contorno periódica e antiperiódica nas variáveis de spin. Por fim, analisaremos o caso de impureza arbitrária nas variáveis de spin.

3.2 Revisão do Caso com Condições de Contorno Periódicas nos Operadores Fermiônicos

A partir da definição da transformada de Fourier da magnetização, eq. (3.5), expressamo-la em função dos operadores $\{C_n, C_n^{\dagger}\}$:

$$S_Q^z(t) = \sum_{n=1}^{N} \left[C_n^{\dagger}(t) C_n(t) - \frac{1}{2} \right] e^{iQn}$$
(3.8)

Através da transformada de Fourier (2.21) tratamos a grandeza de interesse no espaço dos momentos:

$$S_{Q}^{z}(t) = \sum_{n=1}^{N} \left[\left(\sum_{k} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikn} b_{k}^{\dagger}(t) \right) \left(\sum_{k} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik'n} b_{k'}(t) \right) - \frac{1}{2} \right] \exp(iQn)$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \left[\sum_{k,k'} \frac{1}{N} e^{-i[k - (k' + Q)]n} b_{k}^{\dagger}(t) b_{k}(t) \right] - \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2} e^{iQn}$$

$$= \sum_{k} b_{k}^{\dagger}(t) b_{k-Q}(t) - \frac{N}{2} \delta_{Q,0}$$
(3.9)

Neste ponto, a primeira consideração a respeito da condição de contorno torna-se necessária. Estudos anteriores [7, 11, 12] fazem uso da invariância translacional sob os operadores $\{b_k, b_k^{\dagger}\}$ para facilitar os cálculos através da translação $k \to k + Q/2$. Isto implica condições de contorno periódicas sobre os operadores fermiônicos:

$$C_{N+1} = \sum_{k} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik(N+1)} b_k = C_1 = \sum_{k} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ik} b_k$$
(3.10)

É importante notar que neste caso específico de condições de contorno periódicas, tomar a periodicidade nos operadores de spin implica duas possibilidades para os operadores fermiônicos: cíclica (periódica) ou não cíclica. O caso tratado na literatura e revisado nesta seção corresponde ao caso cíclico. Na próxima seção generalizaremos o resultado para condições de contorno periódicas e antiperiódicas nas variáveis de spin.

Através da eq. (3.10) podemos obter os valores de k permitidos:

$$k = \frac{2\pi m}{N}$$
 $m = -\frac{N}{2} + 1, \cdots, \frac{N}{2}$ (3.11)

Lembramos que a limitação sobre o intervalo $-\pi < k \leq \pi$ advém da conservação do número de estados do sistema, 2^N , isto é, N sítios que podem estar ocupados ou desocupados.

Devido a tais condições de contorno em k é possível realizar a mudança de variáveis no somatório $k \rightarrow k + Q/2$:

$$S_Q^z(t) = \sum_k b_p^{\dagger}(t) b_q(t) - \frac{N}{2} \delta_{Q,0}$$
(3.12)

onde $p \equiv k + Q/2$ e $q \equiv k + Q/2$.

Para expressarmos $S_Q^z(t)$ em termos dos operadores que diagonalizam o Hamiltoniano, substituimos a transformação de Bogoliubov na eq.(3.12):

$$S_Q^z(t) = \sum_k \left[(\cos\theta_p \cos\theta_q) \eta_p^{\dagger}(t) \eta_q(t) - i(\cos\theta_p \sin\theta_q) \eta_{-p}^{\dagger}(t) \eta_{-q}^{\dagger}(t) + i(\sin\theta_p \cos\theta_q) \eta_{-p}(t) \eta_q(t) + (\sin\theta_p \sin\theta_q) \eta_{-p}(t) \eta_{-q}^{\dagger}(t) \right] - \frac{N}{2} \delta_{Q,0}$$

$$(3.13)$$

A dependência temporal dos operadores $\{\eta_k, \eta_k^{\dagger}\}$ é bem conhecida:

$$\eta_k(t) = \eta_k \mathrm{e}^{-i\omega_k t} \tag{3.14a}$$

$$\eta_k^{\dagger}(t) = \eta_k^{\dagger} \mathrm{e}^{i\omega_k t} \tag{3.14b}$$

Com a inserção desta dependência obtemos:

$$S_{Q}^{z}(t) = \sum_{k} \left[T_{1} e^{i\Omega^{-}t} \eta_{p}^{\dagger} \eta_{q} - T_{2} e^{i\Omega^{+}t} \eta_{-p}^{\dagger} \eta_{-q}^{\dagger} + T_{3} e^{-i\Omega^{+}t} \eta_{-p} \eta_{q} + T_{4} e^{-i\Omega^{-}t} \eta_{-p} \eta_{-q}^{\dagger} \right] - \frac{N}{2} \delta_{Q,0}$$
(3.15)

onde definimos

$$T_{1} \equiv \cos\theta_{p} \cos\theta_{q} \qquad T_{2} \equiv i \cos\theta_{p} \sin\theta_{q}$$

$$T_{3} \equiv i \sin\theta_{p} \cos\theta_{q} \qquad T_{4} \equiv \sin\theta_{p} \sin\theta_{q}$$

$$\Omega^{\pm} \equiv \omega_{p} \pm \omega_{q}$$
(3.16)

Como os valores permitidos de k
 possuem simetria $k \leftrightarrow -k$, podemos levar o somatório para
 k > 0. Notamos que:

$$T_{1}(-k) = T_{1}(k) \qquad T_{2}(-k) = -T_{3}(k)$$

$$T_{3}(-k) = -T_{2}(k) \qquad T_{4}(-k) = T_{4}(k)$$

$$\Omega^{\pm}(-k) = \pm \Omega^{\pm}(k)$$
(3.17)

Logo, a expressão de interesse é simplicada para:

$$S_{Q}^{z}(t) = \Upsilon(k=0) + \Upsilon(k=\pi) + \sum_{k>0} \left[(T_{1} - T_{4}) \left(e^{i\Omega^{-}t} \eta_{p}^{\dagger} \eta_{q} - e^{-i\Omega^{-}t} \eta_{-p} \eta_{-q}^{\dagger} \right) - (T_{2} + T_{3}) \left(e^{i\Omega^{+}t} \eta_{p}^{\dagger} \eta_{-q}^{\dagger} - e^{-i\Omega^{+}t} \eta_{-p} \eta_{q} \right) \right]$$
(3.18)

onde $\Upsilon(k=0)$ e $\Upsilon(k=\pi)$ são os termos referentes a $k=0,\pi$ do somatório (3.15). Se o número de sítios for muito grande, podemos desconsiderar estes termos. No entanto, tratamos de sistemas finitos e não desejamos tomar o limite termodinâmico. Portanto, estes termos serão mantidos.

Uma vez encontrada a dependência temporal de S_Q^z , completamos o último passo tomando a média com a matriz densidade inicial. Dessa forma, reduzimos o problema ao cálculo de quatro médias designadas por produtos de operadores fermiônicos que diagonalizam o Hamiltoniano:

$$\langle \eta_p^{\dagger} \eta_q \rangle_0, \ \langle \eta_{-p} \eta_{-q}^{\dagger} \rangle_0, \ \langle \eta_p^{\dagger} \eta_{-q}^{\dagger} \rangle_0, \ \langle \eta_{-p} \eta_q \rangle_0$$

$$(3.19)$$

Estes produtos estão associados a processos em que há transferência de momento Q. O cálculo detalhado está disposto no apêndice A.

Por fim, encontramos a forma fechada da evolução temporal da transformada de Fourier da magnetização para $\rho_0 = F(S^z)$:

$$\left\langle S_{Q}^{z}\right\rangle_{t} = \frac{1}{N} \left\langle S_{Q}^{z}\right\rangle_{0} \sum_{k=0}^{\pi - \frac{2\pi}{N}} \left\{ C_{k,Q} \cos \Omega^{-} t + (2 - C_{k,Q}) \cos \Omega^{+} t \right\}$$
(3.20)

onde

$$C_{k,Q} = 1 + \frac{4}{\omega_p \omega_q} \left(h^2 + 2h \cos k \cos \frac{Q}{2} + \cos 2k \right)$$
(3.21)

Podemos destacar alguns pontos interessantes nesta expressão. Em primeiro lugar, a dependência com o estado inicial ocorre apenas através de um fator de escala complexo $\langle S_Q^z \rangle_0$, o que nos diz que a dinâmica é bastante insensível ao pacote inicial.

Neste contexto, para facilitar nossa análise, é interessante escalar o problema e estudar separadamente as parcelas referentes a Ω^+ e Ω^- , ou seja:

$$\frac{\langle S_Q^z \rangle_t}{\langle S_Q^z \rangle_0} = \langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} + \langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$$
(3.22)

onde

$$\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{\pi - \frac{2\pi}{N}} (2 - C_{k,Q}) \cos \Omega^+ t$$
(3.23a)

$$\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)} = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{\pi - \frac{2\pi}{N}} C_{k,Q} \cos \Omega^- t$$
 (3.23b)

Outros pontos importantes sobre o comportamento destas expressões serão apresentados nas próximas subseções.

3.2.1 Reconstruções Parciais

A evolução temporal das componentes de Fourier $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} e \langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ da magnetização para sistemas finitos revela uma característica única destes sistemas, a saber, a reconstrução parcial do estado inicial. Como era de se esperar, quanto maior o número de sítios da cadeia, menor a intensidade da reconstrução. No limite $N \to \infty$ há infinitos graus de liberdade e o sistema relaxa sem reconstruir-se, uma vez que o estado inicial tende a percorrer todo o espaço de Hilbert do sistema. É importante notar que o estado inicial precisa ser arbitrário para que isto ocorra e esta condição é satisfeita por aqueles estados definidos por uma matriz densidade dependente apenas de uma componente do operador de spin. Na Fig. 3.1 estão dispostas as evoluções temporais para alguns valores de N. Elas são oscilatórias e para um número de sítios pequeno, reconstroem-se quase totalmente. Por outro lado, à medida que N aumenta, o sistema relaxa com um amortecimento dado por uma lei de potência no tempo.



Figura 3.1: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $h = 0.6, Q = 2\pi/3$ e valores de N = 6, 12, 36, 60. Para $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ podemos dizer que há relaxação com N = 36. Por outro lado, para $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ a relaxação se estabelece com N = 60.

O número necessário de sítios para que haja amortecimento das oscilações depende de Q, h e dos modos analisados. Os modos $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$, responsáveis por frequências de oscilação altas, relaxam para N = 36 para h = 0.6 e $Q = 2\pi/3$, Fig.3.1. Por outro lado, os modos $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$, responsáveis por frequências de oscilação mais baixas, relaxam apenas para N = 60. Esta relaxação não aparece de modo abrupto, ou seja, não há um número de sítios acima do qual o sistema relaxa e abaixo do qual não há qualquer relaxação. Porém há um número para o qual o sistema relaxa de modo que podemos fitar em bom acordo uma lei de potência na envoltória.

Notamos que em ambos os casos as oscilações ocorrem em torno de zero, o que reflete a simetria de translação do Hamiltoniano, como discutido na seção 1.2.

Podemos determinar um tempo t_r específico no qual ocorre a primeira reconstrução parcial do sistema. Esta reconstrução é a evidência de que o sistema é finito e, consequentemente, não relaxa verdadeiramente.

Observamos que o tempo de reconstrução varia linearmente com o número de sítios da cadeia:

$$t_r^{\pm}(N,Q,h) = f^{\pm}(Q,h)N$$
(3.24)

isto é interessante uma vez que esperaríamos uma dependência com o número de estados acessíveis ao sistema.

Além disso, há também uma dependência com os valores de Q e h. A Fig. 3.2 mostra o tempo de reconstrução para as parcelas $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ em função do número de onda Q para dois valores de campo magnético transverso h. Em geral, observamos que quanto maior Q maior t_r^+ e menor t_r^- . Veremos que neste caso, o aumento de t_r^+ pode ser relacionado ao aparecimento de modos críticos.



Figura 3.2: Tempos de reconstrução t_r^{\pm} (em unidades arbitrárias) em função do número de onda Q para valores de campo transverso h = 0.2, 0.6.

Por outro lado, a Fig. 3.3 mostra que este mesmo tempo de reconstrução diminui à medida que o campo transverso aumenta para um dado valor de Q fixo. Este fato pode ser entendido se lembrarmos que quanto maior o campo transverso maiores as flutuações quânticas e consequentemente menor a relaxação do sistema.



Figura 3.3: Tempos de reconstrução t_r^{\pm} (em unidades arbitrárias) em função do campo transverso h para o número de onda $Q = 0.8\pi$

Outro ponto importante é a coincidência das evoluções temporais $\langle S_Q^z \rangle_t$, $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ para valores de N diferentes e parâmetros Q e h idênticos. A Fig. 3.4 mostra $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ para N = 12, 36, 60. Notamos que há coincidência até a primeira reconstrução parcial do sistema de menor N. Este fato garante que os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ do sistema finito comportam-se identicamente aos modos do sistema infinito até a primeira reconstrução parcial.



Figura 3.4: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $h = 0.6, Q = 2\pi/3$ e valores de N = 12, 36, 60.

3.2.2 Pontos Estacionários Degenerados

A rigor sabemos que não há criticalidade nos sistemas finitos. Entretanto, podemos observar neles marcas da criticalidade que ocorre nos sistemas infinitos. A presença de funções oscilatórias nas expressões da evolução temporal da magnetização induz ao estudo de pontos estacionários degenerados, uma vez que a existência destes pontos está ligada ao surgimento de modos críticos na relaxação do sistema. Quando tratamos de cadeia infinitas no limite assintótico $t \to \infty$, por exemplo, podemos transformar as somas em integrais e estimá-las através do método na fase estacionária. Neste caso, os pontos estacionários de Ω^{\pm} e o grau de degenerescência influenciam fortemente o conhecimento da relaxação uma vez que a interferência destrutiva será dominante, exceto para regiões em torno de pontos nos quais a taxa de variação de Ω^{\pm} em relação a k for nula.

Dessa forma, definimos os pontos estacionários através da equação:

$$\frac{d\Omega^{\pm}}{dk} = 0 \tag{3.25}$$

onde Ω^{\pm} foi definido na eq. (3.16).

Graficamente, nas regiões em que há pontos estacionários degenerados das funções Ω^{\pm} na variável k, tais funções são aproximadamente constantes em um intervalo do domínio de k maior que nos pontos não degenerados.

Analiticamente há três soluções para a equação (3.25) com Ω^+ , a saber:

$$\begin{cases} k_1^+ = 0 & \text{não degenerado} \\ k_2^+ = \pi & \text{degenerado em } Q = Q_c \text{ até } 3^{\text{a}} \text{ ordem} \\ k_3^+ = \arccos(-\frac{1}{h}\cos Q/2) & h \le h_c \\ & \arctan(-\frac{1}{h}\cos Q/2) & h \ge h_c \end{cases}$$
(3.26)

onde h_c é o campo magnético transverso crítico do modelo de Ising com campo tranverso no sistema infinito, isto é, $h_c = 1$.

O ponto estacionário k_3^+ é definido apenas para $Q > Q_c$ e é degenerado apenas quando $Q = Q_c$, situação na qual torna-se igual ao ponto k_2^+ .

O ponto crítico é definido da seguinte forma:

$$Q_c = \begin{cases} 2 \arccos(h) & h \le h_c \\ 2 \arccos(1/h) & h \ge h_c \end{cases}$$
(3.27)

Para a parte Ω^- temos apenas um ponto estacionário:

$$k_1^- = \begin{cases} \operatorname{arccos}(-h\cos Q/2) & h \le h_c \\ \operatorname{arccos}(-\frac{1}{h}\cos Q/2) & h \ge h_c \end{cases}$$
(3.28)

o qual só é degenerado, infinitamente, para Q = 0.

A ausência de degenerescência nas funções Ω^- parece indicar que neste caso não há comportamento crítico. Além disso, estudos anteriores associaram a criticalidade em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ à presença de *nesting* na curva de dispersão [11]. Isto porque há uma alta 'densidade' de parcelas em $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ cujos períodos de oscilação são maiores que o tempo de reconstrução parcial. Estas parcelas de baixas frequências são diferenças entre energias muito próximas, as quais estão associadas a pares de autoestados sendo um autoestado situado em um dos vales da curva de dispersão e o outro autoestado situado em outro vale. Logo, esta alta 'densidade' no sistema finito indica a existência de *nesting* no sistema infinito.

Porém, como discutido na seção 2.4, no caso de Ising este fenômeno não ocorre. Sendo assim, analisaremos daqui por diante apenas a parcela $\langle S_O^z \rangle_t^{(+)}$.

Além dos cálculos analíticos realizou-se também uma análise de gráficos como o mostrado na Fig.3.5 buscando regiões em k da função Ω^+ praticamente constantes, nas quais há pontos estacionários degenerados. Com isso determinou-se o número de onda Q mais próximo da condição de degenerescência.

Para h = 0.2 a função Ω^+ possui valor praticamente constante em $k \approx \pi$ no intervalo $0.8\pi \leq Q \leq 0.9\pi$. Para h = 0.6 este intervalo ocorre para valores menores de Q, a saber, $0.5\pi \leq Q \leq 0.6\pi$. Este comportamento é uma indicação de que o Q_c é menor quanto maior o campo magnético transverso.



Figura 3.5: Função Ω^+ e sua primeira derivada *vs.* k/π para valores de campo transverso h = 0.2, 0.6. Há regiões nas quais Ω^+ é praticamente constante.

A eq. (3.27) nos informa o mesmo resultado. Substituindo os valores h = 0.2, 0.6 encontramos os pontos críticos $Q_c = 0.8718\pi$ e 0.5903π , respectivamente, como se esperava da análise gráfica. Estes pontos estacionários são degenerados quando as derivadas superiores também são nulas. Na parte inferior da Fig. 3.5 observa-se que a derivada primeira sempre se anula em $k = 0, \pi$, que são os pontos k_1^+ e k_2^+ encontrados analiticamente na eq. (3.26). Além disso, há um ponto estacionário, k_3^+ , dependente do valor de Q.

Nos pontos críticos Q_c do presente sistema obtemos degenerescência de ordem três, como ilustrado na Fig. 3.6.



Figura 3.6: $\frac{d^n \Omega^+}{dk^n}$ vs. k para N = 1000, h = 0.2 e $Q = Q_c = 0.8718\pi$.

Como a criticalidade está ligada a tais pontos, esperamos observar uma mudança na relaxação da magnetização nestes valores de Q críticos.

3.2.3 Ajustes com Lei de Potência

Procuraremos agora a marca da criticalidade no amortecimento das evoluções temporais dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ até a primeira reconstrução parcial. Partimos do pressuposto de que este amortecimento é dado por uma lei de potência no tempo do tipo:

$$y(t) = \left(\frac{t}{\tau_Q}\right)^{-\nu_Q} \tag{3.29}$$

onde há dois parâmetros livres $\tau_Q \in \nu_Q$.

A idéia para este ajuste advém do cálculo de integrais através do método da fase estacionária. Neste método, as evoluções temporais no limite assintótico $t \to \infty$ são decompostas em séries de funções oscilatórias e amortecidas por leis de potência:

$$\langle S_Q^z \rangle_{t \to \infty} \sim \sum_n K_{n^+} e^{i\Theta_n^+ t} (\frac{t}{\tau_n^+})^{-\nu_n^+} + \sum_n K_{n^-} e^{i\Theta_n^- t} (\frac{t}{\tau_n^-})^{-\nu_n^-}$$
(3.30)

onde o índice n especifica os pontos estacionários.

As envoltórias foram encontradas da seguinte forma: primeiramente as funções são calculadas discretamente no tempo com intervalos $\delta t = 0.1$; em seguida, são selecionados os máximos locais desta configuração; posteriormente, são selecionados os máximos dos máximos locais, até que se encontre um ajuste fino da envolvente monotonicamente decrescente através de mínimos quadrados. O procedimento descrito é ilustrado na Fig. 3.7.



Figura 3.7: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} vs. t$ (unidades arbitrárias) para uma cadeia com N = 1000 sítios e campo transverso h = 0.2. (à esquerda) Evolução temporal até a primeira reconstrução parcial. (à direita) Seleção de máximos locais para a envoltória.

Fica evidente a mudança na envoltória da relaxação. Através dos ajustes observamos que há uma mudança no expoente ν^+ de 3/2 para 1/2. Entretanto, não há um ponto especifíco no qual esta transição ocorra bruscamente. Pelo contrário, como mostrado na Fig. 3.8 há uma faixa de valores de Q na qual o expoente diminui de maneira mais suave¹, mostrando um efeito de tamanho finito.

¹Pode haver incerteza no expoente visto que alguns máximos utilizados podem ser escolhidos de forma aleatória.



Figura 3.8: Expoente ν_Q^+ para dois campos transversos: h = 0.2, 0.6.

Podemos também analisar a criticalidade em função do campo magnético transverso reduzido h. A Fig. 3.9 mostra que para um número de onda fixo² $Q = 0.8\pi$ o expoente ν^+ também sofre uma mudança de 3/2 para 1/2, como era esperado, visto que há uma dependência de Q_c com o campo transverso e vice-versa.

No entanto, para campos grandes este expoente volta a crescer. Este comportamento não era esperado, uma vez que não há pontos estacionários degenerados nas funções Ω^+ associados a estes parâmetros.



Figura 3.9: Expoente ν_Q^+ em função do campo transverso h para o número de onda $Q = 0.8\pi$.

²Fixamos um valor para que se possa observar a transição entre o expoente $\nu^+ = 3/2$ para campos transversos pequenos (pois $Q = 0.8\pi < Q_c$ nestes casos) e o expoente $\nu^+ = 1/2$ para campos transversos maiores.

Neste momento, é interessante voltarmos nossa atenção para a parcela $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$. Se a investigarmos em função do campo transverso h, encontraremos que há também uma mudança no comportamento do expoente ν_Q^- para $h \ge 1$. Dessa forma, o expoente ν_Q^+ , que possuía valor 1/2, passa a ter valor 3/2 e ν_Q^- , que possuía valor 3/2, passa a ter valor 1/2, como é mostrado na Fig. 3.10.



Figura 3.10: Expoente ν_Q^- em função do campo transverso h para o número de onda $Q=0.8\pi$

Exatamente no campo crítico $h_c = 1$, os expoentes ν_Q^+ e ν_Q^- convergem para um valor $\nu_Q \approx 1$. Para ter maior certeza a respeito destes expoentes, é necessário estudá-los sistematicamente em função do tamanho do sistema. A Fig. 3.11 mostra o comportamento de ν_Q^+ e ν_Q^- em função do inverso do tamanho da cadeia.



Figura 3.11: Valores de ν^{\pm} em função do inverso do tamanho da cadeia.

As barras de erro referem-se ao processo de ajuste da lei de potência. Nele, há alguns máximos escolhidos em detrimento de outros. Como tal escolha é arbitrária, há um erro associado a cada ajuste. De qualquer forma, percebemos que os expoentes tendem ao valor $\nu^{\pm} = 1$, o qual situa-se exatamente entre os dois valores dos expoentes em $h < h_c$ e $h > h_c$.

É importante ressaltar a diferença entre as duas mudanças que observamos no valor dos expoentes. Na primeira delas, ν_Q^+ muda de 3/2 para 1/2 e ν_Q^- permanece o mesmo, isto é, 3/2. Neste caso, a mudança indica um comportamento crítico, uma vez que está diretamente associada aos pontos estacionários degenerados das funções que são argumento dos termos oscilatórios (neste caso, Ω^{\pm}) de $\langle S_Q^z \rangle_t$.

Por outro lado, no segundo caso há uma inversão dos valores dos expoentes: ν_Q^+ muda de 1/2 para 3/2 e ν_Q^- muda de 3/2 para 1/2. Não associamos a este comportamento qualquer criticalidade uma vez que ele não está associado a pontos estacionários degenerados, mas apenas à predominância de cada parcela $(\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ ou $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)})$ em função do campo transverso h.

Torna-se interessante neste momento comparar os resultados obtidos nesta seção ao tratar uma cadeia finita com os resultados obtidos para a cadeia infinita através do método da fase estacionária para condições de contorno c-cíclicas nos operadores fermiônicos [7]. Para o último caso, o expoente dominante é graficado na Fig. 3.12 no plano h - Q. Notamos que o expoente ν_Q^+ sofre a mudança 3/2 para 1/2 nos valores de Q críticos e, para campos h > 1, o valor predominante é 1/2.



Figura 3.12: Valores de ν dominantes para o caso Ising com campo transverso arbitrário r. As diferentes regiões de Q e r são definidas pelas curvas $Q = Q_c(r)$. Figura adaptada da referência [7].

Dessa forma, os resultados estão em bom acordo, salvo para h = 1 quando o sistema finito mostra que os expoentes convergem para $\nu_Q \simeq 1$.

3.3 Condições de Contorno nas Variáveis de Spin

3.3.1 Casos de Resolução Analítica

Nas seções 2.1 e 2.2, notamos que quando as condições de contorno são dadas por $g = \pm 1$ – periódicas e antiperiódicas – podemos realizar uma abordagem analítica, semelhante à relatada na seção anterior.

Dessa forma, partimos novamente da transformada de Fourier da magnetização (3.5), colocamona em função dos operadores fermiônicos $\{C_n, C_n^{\dagger}\}$ e utilizamos a transformada de Fourier (2.21) para obter:

$$S_Q^z(t) = \sum_k \left[b_k^{\dagger}(t) \, b_q(t) \, \right] \, - \, \frac{N}{2} \delta_{Q,0} \qquad \qquad q \equiv k - Q \tag{3.31}$$

onde ressaltamos que os valores permitidos de k são determinados pelas condições de contorno nas variavéis de spin. Estes valores estão dispostos na seção 2.1.

Neste caso não faremos qualquer suposição a respeito de simetrias nos operadores fermiônicos, uma vez que tratamos de um caso no qual as condições de contorno são impostas no Hamiltoniano de spin. Veremos que, apesar desta diferença, a criticalidade desenvolve-se de forma idêntica em ambos os casos.

Substituindo a transformação de Bogoliubov (2.22) diretamente na equação anterior temos que:

$$S_Q^z = -\frac{N}{2}\delta_{Q,0} + \sum_k \left[(\cos\theta_k \cos\theta_q)\eta_k^{\dagger}(t)\eta_q(t) - i(\cos\theta_k \sin\theta_q)\eta_k^{\dagger}(t)\eta_{-q}^{\dagger}(t) + i(\sin\theta_k \cos\theta_q)\eta_{-k}(t)\eta_q(t) + (\sin\theta_{-k} \sin\theta_{-q})\eta_{-k}(t)\eta_{-q}^{\dagger}(t) \right]$$
(3.32)

O próximo passo consiste em inserir a dependência temporal, eq. (3.14), dos operadores fermiônicos $\{\eta^{\dagger}, \eta\}$:

$$S_Q^z = -\frac{N}{2}\delta_{Q,0} + \sum_k \left(T_1 e^{i\Omega^- t} \eta_k^{\dagger} \eta_q - T_2 e^{i\Omega^+ t} \eta_k^{\dagger} \eta_{-q}^{\dagger} + T_3 e^{-i\Omega^+ t} \eta_{-k} \eta_q + T_4 e^{-i\Omega^- t} \eta_{-k} \eta_{-q}^{\dagger} \right)$$
(3.33)

onde definimos: $T_1 = \cos\theta_k \cos\theta_q$ $T_2 = i\cos\theta_k \sin\theta_q$ $T_3 = i\sin\theta_k \cos\theta_q$ $T_4 = \sin\theta_k \sin\theta_q$ $\Omega^{\pm}(k, Q, h) \equiv \omega_k \pm \omega_q$

A ausência de simetria nos operadores fermiônicos reflete-se aqui na impossibilidade de transformarmos a soma em k > 0, apesar de ainda haver simetria $k \leftrightarrow -k$ nos modos permitidos. Considerando o estado inicial com a matriz densidade $\rho_0(S^z)$ obtemos, através de cálculos análogos aos anteriores, a expressão para a evolução temporal da transformada de Fourier da magnetização:

$$\left\langle S_Q^z \right\rangle_t = \frac{1}{N} \left\langle S_Q^z \right\rangle_0 \sum_k \left[F_{k,Q} \cos \Omega^- t + (1 - F_{k,Q}) \cos \Omega^+ t \right] + i \left[G_{k,Q}^+ \sin \Omega^- t - G_{k,Q}^- \sin \Omega^+ t \right]$$

$$(3.34)$$

onde a soma agora é realizada sobre todos os valores de k permitidos e os coeficientes são determinados por:

$$F_{k,Q} \equiv (T_1 - T_4)^2 = \frac{1}{2} + \frac{2}{\omega_k \omega_q} \left[h^2 + 2h\cos\left(k - \frac{Q}{2}\right)\cos\left(\frac{Q}{2}\right) + \cos\left(2k - Q\right) \right]$$
(3.35)

$$G_{k,Q}^{+} \equiv (T_1 + T_4)(T_1 - T_4) = \frac{\cos q + h}{\omega_q} + \frac{\cos k + h}{\omega_k}$$
(3.36)

$$G_{k,Q}^{-} \equiv (T_2 + T_3)(T_2 - T_3) = \frac{\cos q + h}{\omega_q} - \frac{\cos k + h}{\omega_k}$$
(3.37)

Notamos que $\langle S_Q^z \rangle_0$ desacopla-se do somatório e a dependência do estado inicial continua sendo através de um fator de escala complexo.

Logo, podemos escalar o problema e separar as partes real e imaginária:

$$Re\left[\frac{\left\langle S_Q^z\right\rangle_t}{\left\langle S_Q^z\right\rangle_0}\right] = \frac{1}{N}\sum_k \left[F_{k,Q}\cos\Omega^- t + (1 - F_{k,Q})\cos\Omega^+ t\right]$$
(3.38)

$$Im\left[\frac{\left\langle S_{Q}^{z}\right\rangle_{t}}{\left\langle S_{Q}^{z}\right\rangle_{0}}\right] = \frac{1}{N}\sum_{k}\left[\begin{array}{cc}G_{k,Q}^{+}\sin\Omega^{-}t & - & G_{k,Q}^{-}\sin\Omega^{+}t\end{array}\right]$$
(3.39)

Analisaremos daqui por diante a parcela real (3.38) por dois motivos: em primeiro lugar, temos que a parcela imaginária (3.39) é nula quando N é par; em segundo, para N ímpar esta parcela apresenta comportamento aleatório sem aparecimento de relaxação. O interesse deste trabalho consiste, entre outras coisas, em analisar o amortecimento por lei de potência das evoluções temporais da transformada de Fourier da magnetização. Uma vez escolhida a parcela a ser analisada procedemos de maneira semelhante ao que foi feito na seção anterior, separando as contribuições Ω^+ e Ω^- :

$$Re\left[\frac{\langle S_Q^z \rangle_t}{\langle S_Q^z \rangle_0}\right] = \langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} + \langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$$
(3.40)

onde

$$(S_Q^z)_t^{(+)} = \frac{1}{N} \sum_k (1 - F_{k,Q}) \cos \Omega^+ t$$
 (3.41a)

$$(S_Q^z)_t^{(-)} = \frac{1}{N} \sum_k F_{k,Q} \cos \Omega^- t$$
 (3.41b)

Evoluções Temporais

A evolução temporal dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} e \langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$, dispostos nas Eqs.(3.41), possui alguns pontos relevantes. Em primeiro lugar, quando o número de sítios é pequeno e ainda não há sinais de relaxação, as evoluções para condições de contorno periódicas (P) ou antiperiódicas (AP) são diferentes, como mostrado na Fig. 3.13.



Figura 3.13: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs. t (em unidades arbitrárias) para N = 6, h = 0.6 e $Q = 2\pi/3$ para os casos periódico (P) e antiperiódico (AP) nas variáveis de spin.

Porém, ao aumentarmos o número de sítios, a relaxação, quando existe, coincide para os dois casos, como mostrado na Fig.3.14. Apesar de mudarmos a forma como determinanmos a condição de contorno, o sistema relaxa da mesma forma.



Figura 3.14: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ e $\langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ vs. t (em unidades arbitrárias) para $N = 12, 36 e 60, h = 0.6 e Q = 2\pi/3$ para os casos periódico (P) e antiperiódico (AP) nas variáveis de spin.

Para os parâmetros h, N, Q escolhidos na Fig. 3.14 os modos $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} e \langle S_Q^z \rangle_t^{(-)}$ são idênticos àqueles do sistema com condições de contorno periódicas nas variáveis fermiônicas até a primeira reconstrução parcial. Este comportamente é geral para qualquer conjunto de parâmetros.

Além disso, o amortecimento por lei de potência para N ímpar é idêntico ao amortecimento para N par, isto é, não há dependência da paridade, como mostra a Fig. 3.15. Notamos que $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)}$ possui um tempo de reconstrução maior para N = 61 uma vez que se trata de uma cadeia maior. Devido à diferença de paridade há uma pequena diferença no valor de Q permitido, vide equação (3.6).



Figura 3.15: $\langle S_Q^z \rangle_t^{(+)} vs.$ t (em unidades arbitrárias) para N = 60 e N = 61. Os valores de Q são $2\pi/3$ e $41\pi/61$, respectivamente. A relaxação coincide até a primeira reconstrução parcial do sistema de menor N.

Dessa forma, a criticalidade neste caso é independente tanto da condição de contorno quanto da paridade.

Pontos Estacionários Degenerados

Seguindo novamente a definição de ponto estacionário das funções Ω^{\pm} na variável k, eq. (3.25), buscamos as regiões de degenerescência dessas funções, nas quais o número de onda Q atinge algum valor crítico.

Através da resolução analítica podemos obter dois dos quatro pontos estacionários:

$$\begin{cases} k_1^+ = Q/2 & \text{não degenerado} \\ k_2^+ = -\pi + Q/2 & \text{não degenerado} \end{cases}$$
(3.42)

Os pontos k_3^+ e k_4^+ são definidos apenas para $Q \ge Q_c$. É interessante notar que o valor de Qcrítico é novamente dado pela equação (3.27). Podemos observar os pontos k_3^+ e k_4^+ nas derivadas de Ω^+ , mostradas na Fig. 3.16, para valores de Q maiores que Q_c . Estes pontos são não degenerados, exceto no ponto crítico, quando igualam-se ao ponto k_2^+ e há degenerescência tripla, Fig. 3.17.



Figura 3.16: Função Ω^+ e sua primeira derivada vs. k/π para valores de campo transverso h = 0.2, 0.6.

Novamente a função Ω^- não possui pontos estacionários degenerados.



Figura 3.17: $\frac{d^n\Omega^+}{dk^n}$ vs. k para h=0.2 e $Q=Q_c=0.8718\pi.$ Degenerescência tripla.

Ajustes com Lei de Potência

Da seção anterior sabemos que haverá uma criticalidade para o mesmo valor de Q_c do sistema periódico nas variáveis fermiônicas. Para confirmar esta criticalidade analisamos os expoentes ν^+ e ν^- tanto em função de Q, Fig. 3.18, quanto em função de h, Fig. 3.19.



Figura 3.18: Expoente ν_Q^+ para campos h = 0.2, 0.6.

Observamos que o expoente ν^- é fixo no valor 3/2 para os casos ilustrados acima. No entanto, para h > 1.0, os expoentes trocam de valor e ficamos com $\nu^- = 1/2$ e $\nu^+ = 3/2$.



Figura 3.19: Expoentes ν_Q^+ e ν_Q^- vs. h para o número de onda $Q = 0.8\pi$.

Portanto, tendo como base os resultados desta seção, podemos afirmar que o sistema com condições de contorno periódicas e antiperiódicas nas variáveis de spin comporta-se, com respeito à relaxação e à criticalidade, da mesma maneira que o sistema com condições de contorno periódicas nas variáveis fermiônicas.

3.3.2 Casos de Resolução Numérica

Nesta seção desenvolveremos os cálculos e discutiremos os resultados para o caso em que as condições de contorno são dadas por g < -1. Vale ressaltar que esta região foi escolhida tendo em vista que, na prática, átomos de oxigênio próximos a cadeias atômicas podem gerar acoplamentos antiferromagnéticos através da interação de supertroca.

Como a resolução neste caso é numérica, primeiramente calculamos a magnetização $S_j^z(t)$ em cada sítio j:

$$S_j^z(t) = C_j^{\dagger}(t)C_j(t) - 1/2$$
(3.43)

Em seguida tomaremos a média com a matriz densidade inicial, $\langle S_j^z \rangle_t$, e por fim calcularemos a transformada de Fourier da magnetização. Esta abordagem fornecerá maior entendimento a respeito do que acontece localmente e como o efeito da impureza se espalha pela cadeia.

Dessa forma, substituindo a transformação inversa (2.20), a qual mapeia os operadores de Jordan-Wigner diretamente nos operadores que diagonalizam o Hamiltoniano, obtemos:

$$S_{j}^{z}(t) = \sum_{k,k'} \left[\left(g_{kj}g_{k'j} \right) \eta_{k}^{\dagger}(t) \eta_{k'}(t) + \left(g_{kj}h_{k'j} \right) \eta_{k}^{\dagger}(t) \eta_{k'}^{\dagger}(t) + \left(h_{kj}g_{k'j} \right) \eta_{k}(t) \eta_{k'}(t) + \left(h_{kj}h_{k'j} \right) \eta_{k}(t) \eta_{k'}^{\dagger}(t) \right] - 1/2$$

$$(3.44)$$

onde os índices k, k' referem-se aos autovalores e autovetores da diagonalização numérica descrita na seção 2.1.

Agora inserimos a dependência temporal dos operadores fermiônicos e definimos:

$$T_{1} \equiv g_{kj}g_{k'j} \qquad T_{2} \equiv g_{kj}h_{k'j}$$

$$T_{3} \equiv h_{kj}g_{k'j} \qquad T_{4} \equiv h_{kj}h_{k'j}$$

$$\Omega^{\pm} \equiv \omega_{k} \pm \omega_{k'}$$
(3.45)

Com isso, temos a expressão para a média da magnetização:

$$\langle S_j^z(t) \rangle_0 = \sum_{k,k'} \left(T_1 e^{i\Omega^- t} \langle \eta_k^{\dagger} \eta_{k'} \rangle_0 + T_2 e^{i\Omega^+ t} \langle \eta_k^{\dagger} \eta_{k'}^{\dagger} \rangle_0 + T_3 e^{-i\Omega^+ t} \langle \eta_k \eta_{k'} \rangle_0 + T_4 e^{-i\Omega^- t} \langle \eta_k \eta_{k'}^{\dagger} \rangle_0 \right) - 1/2$$

$$(3.46)$$

As médias podem ser facilmente obtidas através do método ilustrado no apêndice A. Com isso, após algumas manipulações algébricas, podemos separar as partes real e imaginária da magnetização:

$$\Re[\langle S_j^z \rangle_t] = \sum_{k,k'} \cos\Omega^- t \left\{ \left[(T_1 + T_4) \sum_{j'} \frac{1}{2} (T_1 + T_4) \right] + \left[(T_1 - T_4) \sum_{j'} \langle S_j^z \rangle_0 (T_1 - T_4) \right] \right\} + \\ \cos\Omega^+ t \left\{ \left[(T_2 + T_3) \sum_{j'} \frac{1}{2} (T_2 + T_3) \right] + \left[(T_2 - T_3) \sum_{j'} \langle S_j^z \rangle_0 (T_2 - T_3) \right] \right\} - \frac{1}{2}$$

$$(3.47)$$

$$\Im[\langle S_j^z \rangle_t] = \sum_{k,k'} \sin\Omega^- t \left\{ \left[\left(T_1 - T_4 \right) \sum_{j'} \frac{1}{2} (T_1 + T_4) \right] + \left[\left(T_1 + T_4 \right) \sum_{j'} \langle S_j^z \rangle_0 (T_1 - T_4) \right] \right\} + \\ \sin\Omega^+ t \left\{ \left[\left(T_2 - T_3 \right) \sum_{j'} \frac{1}{2} (T_2 + T_3) \right] + \left[\left(T_2 + T_3 \right) \sum_{j'} \langle S_j^z \rangle_0 (T_2 - T_3) \right] \right\}$$

$$(3.48)$$

Notamos que neste caso o estado inicial descrito por $\langle S_j^z \rangle_0$ não se desacopla dos somatórios, indicando uma dependência da magnetização com a escolha do pacote inicial. Entretanto, a magnetização é uma grandeza estritamente real independentemente do estado inicial e, para manter a consistência da abordagem apresentada, $\Im[\langle S_j^z \rangle_t]$ deve ser nula. Como era esperado, o esboço da função confirma este fato.

Antes de partimos para a análise da transformada de Fourier de $\Re[\langle S_j^z \rangle_t]$, realizaremos um estudo da própria magnetização em função do tamanho da cadeia e da impureza colocada, bem como a dependência com o estado inicial.

Magnetização

Iniciaremos a análise da magnetização através das evoluções temporais para g < -1.0 e estados iniciais nos quais um único sítio é virado, sendo tal sítio vizinho ou não à impureza. Primeiramente, utilizamos cadeias com um número de sítios pequeno, porém capaz de nos fornecer alguma informação sobre a influência da impureza.



Na Fig. 3.20 observamos evoluções temporais de $\langle S_j^z \rangle_t$ para alguns sítios de uma cadeia com N = 24 e o estado inicial no qual o spin virado (SV) pertence à ligação da impureza³.

Figura 3.20: $\langle S_j^z \rangle_t vs.$ t (em unidades arbitrárias) para N = 24, h = 0.2, g = -1.5 e SV = 1.

³O sítio em que há a ligação da impureza é denominado sítio 1. Logo, neste caso, o spin virado está situado no sítio 1 da cadeia.

Observamos que para os sítios participantes da ligação da impureza as oscilações da magnetização ocorrem em torno de zero. Entretanto, à medida que nos afastamos da impureza, por exemplo no sítio 6, as oscilações ocorrem em torno de um patamar positivo, uma vez que o estado inicial de tais spins é a configuração ferromagnética (\uparrow) e estão localizados no centro da cadeia.

Notamos também que a partir de um tempo específico t_i , o valor médio da magnetização sofre uma queda devido à influência da impureza. Em linhas gerais, o spin situado no centro da cadeia (sítio N/2) recebe a informação a respeito da impureza após um tempo maior, uma vez que a informação é transmitida através do transporte do valor médio da magnetização. Este fato é ilustrado na Fig. 3.21, a qual revela também que o tempo t_i não depende consideravelmente do valor de g.



Figura 3.21: Tempo t_i (unidades arbitrárias) no qual o sítio sente a influência da impureza em uma cadeia com N = 24.

O sistema apresenta também reconstruções parciais da magnetização, uma vez que tratamos de um sistema finito. Estas reconstruções tornam-se mais escassas e menos pronunciadas à medida que aumentamos o número de sítios, o que é esperado.

Outro ponto importante é o comportamento de $\langle S_j^z \rangle_t$ para valores maiores de h, ou seja, maiores flutuações quânticas. Uma vez que tais flutuações são responsáveis pelo transporte do valor médio da magnetização, esperamos que uma elevação de h diminua o tempo no qual os sítios da cadeia sentem o efeito da impureza. A Fig. 3.22 mostra esta diminuição para N = 24.

De modo geral, quanto maior h, mais desordenado é o comportamento da magnetização e maior o número de sítios necessários para observarmos processos de relaxação.



Figura 3.22: $\langle S_j^z \rangle_t vs.$ t para N = 24 e dois valores de campo transverso (h = 0.2, 0.6). A influência da flutuação quântica reflete-se na maior rapidez com que o valor médio da magnetização é transportado.

Antes de analisarmos $\langle S_j^z \rangle_t$ para maiores valores de N, veremos a influência da mudança do sítio virado no estado inicial. Até agora analisamos evoluções temporais para o sítio virado na ligação da impureza. Neste caso, sítios próximos a ela sofrem rapidamente a influência da mesma. À medida que nos afastamos da impureza, há primeiramente uma oscilação coerente em torno de um valor fixo e, após um determinado tempo t_i , o valor médio da magnetização sofre uma queda.

Quando modificamos o sítio virado do pacote inicial, a evolução temporal da magnetização sofre pequenas modificações para sítios próximos ao sítio virado. Nestes casos, $\langle S_j^z \rangle_t$ perde a coerência inicial (isto é, a primeira oscilação coerente) e oscila temporariamente ao redor de um patamar mais baixo, como mostra a Fig. 3.23. Para sítios mais afastados há também esta oscilação temporária, porém para tempos maiores.



Figura 3.23: $\langle S_j^z \rangle_t vs.$ t (em unidades arbitrárias) para N = 24, g = -1.5, pacote inicial cujo sítio virado (SV) está em j = 12 e dois sítios analisados: um distante (j = 6) do sítio virado e outro vizinho (j = 11) ao sítio virado.

Além disso, $\langle S_j^z \rangle_t$ não oscila mais em torno de zero para os sítios participantes da ligação da impureza. Somente quando o sítio virado participa desta ligação obtemos as oscilações em torno do patamar nulo. Para todas as outras situações $\langle S_j^z \rangle_t$ oscila em um mesmo patamar acima de zero.

É importante ressaltar que, apesar das mudanças citadas, $\langle S_j^z \rangle_t$ é bastante semelhante para todos os outros sítios da cadeia que não estejam próximos ao sítio virado. O tempo t_i também permanece o mesmo.

A partir deste momento resta-nos analisar os efeitos que o aumento do número de sítios causa na magnetização. Compararemos evoluções para o mesmo sítio em cadeias com valores de Ndiferentes. Consideraremos sítios com j menor ou igual à metade do número de sítios da menor cadeia em questão.

O primeiro efeito observado é o contínuo aumento do tempo requerido para a reconstrução no valor médio da magnetização, ou seja, o valor médio tende a permanecer fixo por um tempo maior em cadeias maiores.

A Fig. 3.24 mostra este comportamento, o qual reflete o fato de que quanto maior for um sistema menor a probabilidade de reaver sua configuração inicial. É também possível observar na Fig. 3.24 uma diminuição no patamar da primeira oscilação quando o número de sítios aumenta, indicando que no limite termodinâmico o patamar se anula, como observado nas seções anteriores para condições de contorno periódicas e antiperiódicas.



Figura 3.24: $\langle S_j^z \rangle_t vs. t$ para h = 0.2 e g = -1.5 e dois valores para o número de sítios: N = 24 e N = 100.

Um fato a ser ressaltado é que não há qualquer comportamento anômalo quando h = 1 (isto é, no ponto crítico do sistema no limite termodinâmico).

Transformada de Fourier da Magnetização

Uma vez que as propriedades críticas do sistema de interesse estão ligadas à transformada de Fourier da magnetização, calcularemos nesta seção esta grandeza, a qual é definida da seguinte forma:

$$\langle S_Q^z \rangle_t \equiv \sum_{j=1}^N e^{iQj} \langle S_j^z \rangle_t \tag{3.49}$$

Em seguida, analisaremos suas partes real e imaginária:

$$\Re[\langle S_Q^z \rangle_t] = \sum_{j=1}^N \cos(Qj) \langle S_j^z \rangle_t \tag{3.50}$$

$$\Im[\langle S_Q^z \rangle_t] = \sum_{j=1}^N \sin(Qj) \langle S_j^z \rangle_t \tag{3.51}$$

As expressões acima nos mostram que a parte real é simétrica em relação a Q e a parte imaginária é antissimétrica. Logo, precisamos somente analisar as evoluções para $Q \ge 0$.

Podemos escalar as grandezas para facilitar a análise:

$$\Re[\frac{\langle S_Q^z \rangle_t}{\langle S_Q^z \rangle_0}] = \frac{\Re[\langle S_Q^z \rangle_t] \Re[\langle S_Q^z \rangle_0] + \Im[\langle S_Q^z \rangle_t] \Im[\langle S_Q^z \rangle_0]}{\Re[\langle S_Q^z \rangle_0]^2 + \Re[\langle S_Q^z \rangle_0]^2} \equiv \langle S_Q^z \rangle_t^{\Re}$$
(3.52)

$$\Im[\frac{\langle S_Q^z \rangle_t}{\langle S_Q^z \rangle_0}] = \frac{\Im[\langle S_Q^z \rangle_t] \Re[\langle S_Q^z \rangle_0] - \Re[\langle S_Q^z \rangle_t] \Im[\langle S_Q^z \rangle_0]}{\Re[\langle S_Q^z \rangle_0]^2 + \Re[\langle S_Q^z \rangle_0]^2} \equiv \langle S_Q^z \rangle_t^{\Im}$$
(3.53)

Veremos se a hipótese de amortecimento por lei de potência é válida neste caso. Se sim, estudaremos os expoentes e os possíveis pontos críticos do sistema. Se não, tentaremos estabelecer o porquê de um novo comportamento.

Na Fig. 3.25 observamos as evoluções temporais para uma cadeia pequena com número de sítios N = 6. Primeiramente observamos que os modos não oscilam mais ao redor de zero, como ocorria nos casos periódico e antiperiódico. O patamar de oscilação corresponde a uma parcela constante da eq. (3.49) e não tende a zero no limite de tempos longos em cadeias grandes, ao contrário das criticalidades presentes no Hamiltoniano XY com campo transverso nas quais o patamar de oscilação vai a zero para $t \to \infty$.

Além disso, a Fig. 3.25 indica que este patamar é máximo para o número de onda Q = 0 (modo homogêneo), tende a diminuir para valores do número de onda maiores e se anula para $Q = \pi$.



Figura 3.25: $\Re\left[\frac{\langle S_{Q}^{2} \rangle_{t}}{\langle S_{Q}^{2} \rangle_{0}}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para N = 6, g = -1.5, h = 0.2 e SV = 1. Os valores de Q são dados pela eq.(3.6).

Este comportamento é um reflexo da falta de simetria de translação do Hamiltoniano e, consequentemente, da magnetização não uniforme do estado de equilíbrio.

Ao aumentarmos o número N de sítios da cadeia esperamos obter algum processo de relaxação. A Fig.3.26 mostra a evolução temporal para diversos valores de N e um mesmo conjunto de parâmetros $\{g, Q, h, SV\}$. É importante notar que as parcelas real e imaginária de $\langle S_Q^z \rangle_t / \langle S_Q^z \rangle_0$ oferecem resultados semelhantes. Dessa forma, enfatizaremos o estudo da parcela real, dada pela eq.(3.52).

Observa-se para N = 60 a emergência de processos de relaxação distintos daqueles analisados anteriormente, uma vez que os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ não se extinguem completamente. Estes processos não apresentam as criticalidades existentes nos modelos analisados anteriormente nas seções 3.2 e 3.3.1, ou seja, criticalidades nas quais os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ exibem comportamento crítico nas vizinhanças de um número de onda crítico Q_c . Nos casos com impureza, há uma faixa mais larga de valores de Qpara os quais os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ oscilam em torno de um valor médio não nulo.



Figura 3.26: $\Re\left[\frac{\langle S_Q^2 \rangle_t}{\langle S_Q^2 \rangle_0}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para diversos valores de N e parâmetros $g = -1.5, h = 0.2, Q = \pi/3$ e SV = 1.

Trabalhos anteriores mostraram que, no subespaço de uma onda de spin⁴, o modelo de Heisenberg XXZ com impureza resulta em processos de relaxação semelhantes aos encontrados nesta dissertação [11].

No modelo XXZ, se o estado inicial possuir spin virado em um sítio pertencente à ligação da impureza e se houver gap no espectro da banda de uma onda de spin também emergem processos nos quais $\langle S_Q^z \rangle_t$ oscila em torno de um patamar não nulo.

Porém, se a evolução ocorrer a partir de estados iniciais do tipo produto direto cujo único spin virado esteja em um sítio longe da impureza, emergem relaxações oscilatórias e amortecidas por uma lei de potência com expoente 1/2. Neste caso, todos os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ oscilam em torno de zero.

 $|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{ikj} |j\rangle$, onde $|j\rangle = |\uparrow\uparrow\cdots\uparrow(j:\downarrow)\uparrow\cdots\uparrow\rangle$

⁴Os estados de uma onda de spin são definidos por:

Tais estados caracterizam um subespaço de uma onda. Há dois subespaços deste tipo, porém em ambos as evoluções da magnetização são equivalentes quando não há campos externos.

Quando há uma impureza intersticial, todos os sítios da cadeia continuam com spin $\frac{1}{2}$ e continua sendo possível definir este subespaço.

No entanto, estes resultados se aplicam uma vez que o Hamiltoniano XXZ não possui campos externos aplicados e, consequentemente, mesmo na presença de impurezas, a evolução dos modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ no subespaço de uma onda de spin desacopla-se dos outros subespaços de S^z .

No presente trabalho, para estados iniciais com um único spin virado não observamos casos nos quais todos os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ oscilam em torno de zero. Além disso, para $Q = \pi$, quando o patamar de oscilação torna-se nulo, não podemos estabelecer uma envoltória descrita por lei de potência, como mostrado na Fig. 3.27.



Figura 3.27: $\Re[\frac{\langle S_Q^2 \rangle_t}{\langle S_Q^2 \rangle_0}]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para N = 160, g = -1.5, h = 0.2, SV = 1 e valores de Q diferentes.

O valor N = 160 é um número de sítios considerável para a análise da relaxação para pequenos campos. O aumento do campo transverso h, isto é, das flutuação quânticas, requer um aumento do número de sítios, como era de se esperar. Entretanto, é complicado aumentar N para um valor muito maior que N = 160, uma vez que isso demandaria um tempo computacional muito grande.

As evoluções da Fig.3.27 ilustram que o aumento do número de onda Q implica uma diminuição do patamar de oscilação. Concomitantemente, observamos também uma dimininuição da amplitude e um aumento da frequência das oscilações. Gradativamente, tais oscilações tendem a desfazer sua forma e, no patamar nulo ($Q = \pi$), não há uma lei que possa descrevê-las bem.

Outro ponto a ser notado refere-se ao fato de que a variação do sítio virado pode influenciar a relaxação do sistema devido a dependência do estado inicial. A Fig. 3.28 mostra as evoluções $\langle S_Q^z \rangle_t$ a partir de um estado inicial cujo sítio virado está no centro da cadeia.



Figura 3.28: $\Re[\frac{\langle S_Q^2 \rangle_t}{\langle S_Q^2 \rangle_0}]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para N = 160, g = -1.5, h = 0.2, SV = 80 e valores de Q diferentes.

Nota-se que para valores de q' ímpares $(q' = -\frac{N}{2} + 1, ..., \frac{N}{2}, \text{eq.}(3.6))$ o patamar de oscilação é negativo enquanto que para valores pares, o patamar de oscilação é positivo. Ambos iniciam-se com um valor em módulo máximo e aproximam-se de zero à medida que o número de onda aumenta.

Quando o patamar de oscilação se anula em $Q = \pi$ há uma interferência construtiva responsável pelo aumento da amplitude de oscilação quando o sítio virado está longe da impureza. Neste caso, a evolução temporal toma a forma de batimentos.

Resta-nos agora saber como os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ comportam-se em relação ao parâmetro g à medida que diminuimos seu valor. A Fig. 3.29 mostra o caso no qual g = -3.0. A forma das evoluções temporais neste caso é muito semelhante à forma das evoluções para g = -1.5, Fig. 3.27.



Figura 3.29: $\Re\left[\frac{\langle S_{Q}^{2}\rangle_{t}}{\langle S_{Q}^{2}\rangle_{0}}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para N = 160, g = -3.0, h = 0.2, SV = 1 e valores de Q diferentes.

Realizaram-se análises para diversos valores do parâmetro no intervalo $-5.0 \le g < -1.0$ e constatou-se que não há diferenças significativas entre as evoluções temporais. Entretanto, notamos que para valores de Q nos quais as oscilações não são bem definidas (por exemplo, para $Q \ge 0.5\pi$ na Fig.3.29) as evoluções oscilam com frequências menores quando temos g menores.

Este comportamento pode ser entendido se lembrarmos que o tempo t_i necessário para que a impureza seja sentida pelo resto da cadeia não depende de g.

Uma análise mais atenta nos mostra que estes processos de relaxação distintos estão intimamente ligados à estrutura do espectro de energia do Hamiltoniano. Para os casos de resolução analítica $(g = \pm 1)$, o espectro é totalmente determinado pela relação de dispersão (2.30). Os modos oscilam em torno de zero e apresentam evoluções oscilatórias e amortecidas por uma lei de potência no tempo, a qual por sua vez, apresenta criticalidade para certos números de onda Q_c .

Por outro lado, para os casos de resolução númerica $g \neq \pm 1$ (inclusive g = 0, isto é, extremidades livres), há o surgimento de um estado ligado que se separa da banda k. Isto implica processos de relaxação nos quais os modos oscilam em torno de um valor médio não nulo.

Apesar de o estado de impureza tornar-se mais fortemente ligado quando diminuimos g — isto é, apesar de a autoenergia do estado de impureza que se separa da banda k tornar-se ainda mais negativa — não há forte dependência da relaxação com este parâmetro.

É importante notar que até o presente momento nossa atenção deteve-se unicamente para os casos nos quais o número de sítios é par. Entretanto, sabemos que, para N ímpar o espectro de autovalores e autovetores é diferente. Quando $g = \pm 1$, as relaxações coincidem até a primeira reconstrução parcial e a evolução temporal independe da paridade. Neste momento, veremos que para os casos de impurezas arbitrárias, há semelhanças e diferenças na evolução temporal dos modos $\langle S_O^z \rangle_t$ quando o número de sítios da cadeia é ímpar.

Em primeiro lugar, os modos continuam oscilando ao redor de um patamar máximo quando o número de onda é Q = 0. Porém, eles não se anulam em $Q = \pi$, mas sim em um valor $Q < \pi$. Ao continuarmos aumentando o valor de Q, os modos voltam a oscilar em torno de um patamar não nulo e cujo valor aumenta com Q. Concomitantemente, a amplitude de oscilação também aumenta e alcança seu valor máximo para $Q = \pi$. A Fig. 3.30 ilustra este comportamento para uma cadeia com 161 sítios. Neste caso, o patamar de oscilação anula-se em $Q = 87\pi/161 \simeq 0.54\pi$.

Dessa forma, há influência da paridade nas evoluções temporais dos modos nos quais impureza tratada é arbitrária. Por outro lado, apesar das diferenças citadas, qualitativamente os processos de relaxação são mantidos, uma vez que o espectro continua apresentando um estado de energia ligado (e os autovalores deste estado ligado são os mesmos tanto para N = 160 quanto para N = 161).



Figura 3.30: $\Re\left[\frac{\langle S_Q^2 \rangle_t}{\langle S_Q^2 \rangle_0}\right]$ vs. t (em unidades arbitrárias) para N = 161, g = -1.5, h = 0.2, SV = 1 e valores de Q diferentes.

A paridade também influencia o comportamento das evoluções temporais quando o sítio virado no pacote inicial não participar da ligação da impureza. Se o número de sítios for ímpar, não teremos o mesmo comportamento que o ilustrado na Fig.3.28, isto é, não teremos mais modos alternadamente oscilando ao redor de valores positivos e negativos. Pelo contrário, à medida que aumentamos o valor de Q, os modos passam a oscilar ao redor de patamares sucessivamente mais baixos, porém sempre positivos. Para um valor $Q < \pi$ o patamar anula-se e permanece nulo por um intervalo maior que nos casos em que N é par. Em seguida, os modos passam a oscilar em torno de patamares não nulos novamente.
Capítulo 4

Conclusões

Nesta dissertação, realizou-se o estudo da dinâmica quântica de cadeias de spin na presença de uma impureza, a qual é modelada como uma condição de contorno diferente em um anel de spins. A grandeza de interesse analisada consistiu na evolução em tempo real (a menos de um fator de escala) do valor médio da transformada de Fourier da magnetização.

As discussões e conclusões serão distribuídas em três seções, a saber:

1. Revisão do caso periódico nas variáveis fermiônicas

Nesta primeira parte, as condições de contorno são periódicas nas variáveis de fermiônicas (caso C-cíclico). A diagonalização do Hamiltoniano foi realizada através das transformações de Jordan-Wigner, Fourier e Bogoliubov. Os autovalores obtidos implicam uma curva de dispersão sem *nesting.* As condições de contorno periódicas foram tomadas nos operadores fermiônicos. Assim, a evolução temporal das componentes de Fourier da magnetização foi obtida analiticamente a partir de uma matriz densidade inicial, a qual por sua vez é um funcional de apenas uma componente de spin. Este caso já foi resolvido na literatura [7] através do método da fase estacionária para o limite de cadeia e tempos infinitos. Nesta dissertação, analisamos uma cadeia finita e comparamos os resultados obtidos pelos dois métodos.

Observamos dois fatos marcantes nas evoluções temporais: em primeiro lugar, a relaxação é oscilatória e amortecida por um lei de potência no tempo $(t/\tau_Q)^{-\nu_Q}$; em segundo lugar, há criticalidade na lei de potência em função do número de onda Q e do campo transverso h.

Todos os modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ oscilam em torno de zero, indicando a simetria de translação do Hamiltoniano. Em nosso caso emergem também efeitos de tamanho finito, como as reconstruções parciais da magnetização e criticalidades não abruptas no expoente ν_Q . Para certos valores do número de onda (chamados críticos Q_c), o expoente ν_Q^+ muda de 3/2 para 1/2 e a relaxação torna-se mais lenta. Na vizinhança destes pontos, a função Ω^+ , presente no termo oscilatório de $\langle S_Q^z \rangle_t$, apresenta pontos estacionários degenerados, indicando a presença de interferências construtivas. Para h < 1, o valor do expoente ν_Q^- permanece sempre 3/2. Estes resultados estão em bom acordo com aqueles de [7].

No entanto, quando h = 1, ambos os expoentes convergem para $\nu_Q^{\pm} \approx 1$. Este comportamento não foi previsto pelo método da fase estacionária mas é observado em nossa extrapolação no limite $N \to \infty$.

Em seguida, para h > 1 o expoente ν_Q^- passa a ter valor 1/2 e o expoente ν_Q^+ passa a ter valor 3/2. Esta mudança não está ligada a pontos estacionários degenerados, mas somente à predominância de cada termo quando h > 1.

2. Casos periódico e antiperiódico nas variáveis de spin

Na segunda parte deste trabalho, tomamos as condições de contorno nas variáveis de spin no Hamiltoniano de Ising com campo transverso. Neste caso, é possível resolver analiticamente o problema (isto é, diagonalizar e encontrar a forma fechada de $\langle S_Q^z \rangle_t$) novamente através das transformações de Jordan-Wigner, de Fourier e de Bogoliubov. Neste caso, não consideramos qualquer hipótese a respeito dos operadores fermiônicos. Como no caso anterior, encontramos relaxações oscilatórias e amortecidas por leis de potência no tempo.

Além disso, as relaxações periódicas e antiperiódicas coincidem até a primeira reconstrução, indicando que a relaxação dos sistemas finitos com $g = \pm 1$ é idêntica à relaxação do sistema infinito até a primeira reconstrução parcial. Logo, as criticalidades observadas são iguais às do caso anterior e, apesar de haver mudanças na função Ω^+ , encontram-se os mesmos pontos estacionários degenerados. Lembramos que estes resultados são válidos para cadeias com número de sítios par e ímpar.

3. Casos de impurezas arbitrárias nas variáveis de spin

Na parte final desta dissertação, assumimos a presença de uma impureza arbitrária nas variáveis de spin, o que implica a necessidade de resolução numérica do problema. Utilizamos novamente a transformação de Jordan-Wigner. Na diagonalização, encontramos um estado ligado que se separa da banda k, isto é, da dispersão descrita pela relação usual encontrada nas diagonalizações das partes 1 e 2.

A existência deste estado ligado é bastante interessante e induz processos de relaxação distintos de uma lei de potência. Estes processos são caracterizados por modos $\langle S_Q^z \rangle_t$ que não se extinguem completamente, exceto para $Q = \pi$ (quando N é par) e para $Q < \pi$ (quando N é ímpar).

Além disso, observamos que a criticalidade deste sistema é diferente daquela analisada nos casos anteriores uma vez que não ocorre nas vizinhanças de um número de onda crítico. Pelo contrário, associa-se ao processo crítico uma larga faixa de valores Q para os quais obtemos evoluções temporais oscilando ao redor de patamares não nulos até a primeira reconstrução parcial da magnetização. Este valor não nulo indica que o equilíbrio é alcançado com uma magnetização espacialmente não homogênea, o que reflete a falta de simetria de translação do Hamiltoniano.

Os estados iniciais analisados são do tipo produto direto com um único spin virado, seja próximo ou distante da impureza. Para N par, os casos nos quais o spin virado está próximo à impureza possuem modos oscilando ao redor de um patamar não nulo, sendo máximo em Q = 0. Este patamar diminui à medida que o valor de Q aumenta. Por fim, em $Q = \pi$ o patamar é nulo.

Para os casos em que o spin está distante da impureza, há modos que oscilam em torno de um patamar não nulo positivo (q' par) e modos que oscilam em torno de um patamar não nulo negativo (q' par). Em ambos, quando $Q \to \pi$, o patamar aproxima-se de zero.

Outro fator importante é o campo magnético transverso h, o qual é responsável pelas flutuações quânticas. Para campos pequenos, há oscilações bem definidas e é possível analisar os processos de relaxação para um número de sítios relativamente pequeno. Entretanto, aumentando h, a relaxação torna-se mais caótica, causando uma diminuição do tempo em que o sistema se reconstrói. Neste caso, são necessários maiores valores de N para que ocorre a relaxação. Entretanto, é inviável aumentar o número de sítios para um valor muito maior que N = 160, pois assim o custo computacional seria muito grande.

Os resultados nos mostraram também que a relaxação não depende fortemente do valor de g quando temos g < -1.0. Em primeiro lugar, vimos que o tempo para que os outros sítios da cadeia sintam a influência da impureza independe de g. Além disso, a forma da relaxação observada no intervalo -1.0 < g < 5.0 é basicamente a mesma.

Portanto, a inserção de uma impureza na cadeia de spins é responsável por um estado ligado no espectro de enrgia e consequentemente por uma relaxação distinta daquela observada para o caso periódico.

4. Perspectivas Futuras

Sistemas de muitos corpos, como o estudado neste trabalho, em geral são intrinsecamente emaranhados. Dessa forma, pretendemos estudar o emaranhamento da cadeia com impureza e relacioná-lo com sua dinâmica. A grandeza de interesse neste caso será a entropia linear do sistema [20].

Apêndice A

Cálculo das Médias $<\eta_p^{\alpha}\eta_q^{\mu}>$

O procedimento padrão para o cálculo das médias (3.19) é escrever os termos novamente na representação { σ^+, σ^- }. As transformações inversas de Bogoliubov e de Fourier são dadas, respectivamente, por:

$$\eta_p^{\alpha} = \cos\theta_p b_p^{\alpha} - i\alpha \sin\theta_p b_{-p}^{-\alpha} \tag{A.1a}$$

$$b_p^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N} e^{i\alpha p j} C_j^{\alpha}$$
(A.1b)

onde $\alpha, \mu=\pm$ e adotamos a notação compacta $\eta^+=\eta^\dagger$ e $\eta^-=\eta.$

Com isso obtemos a expressão para o produto dos operadores fermiônicos que diagonalizam o Hamiltoniano:

$$\eta_p^{\alpha} \eta_q^{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{j,n}^{N} e^{i(\alpha p n + \mu q j)} \left[\cos \theta_p \cos \theta_q C_n^{\alpha} C_j^{\mu} - i \mu \cos \theta_p \sin \theta_q C_n^{\alpha} C_j^{-\mu} - i \alpha \sin \theta_p \cos \theta_q C_n^{-\alpha} C_j^{\mu} - \alpha \mu \sin \theta_p \sin \theta_q C_n^{-\alpha} C_j^{-\mu} \right]$$
(A.2)

Utilizando as definições 3.17 e a transformação de Jordan-Wigner expressamos o produto por:

$$\eta_{p}^{\alpha}\eta_{q}^{\mu} = \frac{1}{N}\sum_{j,n}^{N} e^{i(\alpha p n + \mu q j)} L_{n} \left[T_{1}\sigma_{n}^{\alpha}\sigma_{j}^{\mu} - \mu T_{2}\sigma_{n}^{\alpha}\sigma_{j}^{-\mu} - \alpha T_{3}\sigma_{n}^{-\alpha}\sigma_{j}^{\mu} - \alpha \mu T_{4}\sigma_{n}^{-\alpha}\sigma_{j}^{-\mu} \right] L_{j}$$
(A.3)

Podemos agora separar o somatório em três regiões: $j = n, j < n \in j > n$. Entretanto, pode-se provar [18] que em médias cuja matriz densidade inicial depende apenas de uma coordenada os termos dependentes de outras coordenadas são nulos.

Dessa forma, o único termo que sobrevive ao tomarmos a média com $\rho_0 = F(S^z)$ é aquele para j = n visto que será o único independente de $x \in y$. Neste trabalho tomaremos sempre $\rho_0 = F(S^z)$, assim como foi feito em trabalhos anteriores [11] do grupo. Para o caso de condições de contorno periódicas nas variáveis fermiônicas a dissertação [7] realiza um estudo analítico para $\rho_0 = F(S^{\alpha}), \alpha = x, y, z$ e as criticalidades observadas são semelhantes nos três casos.

Uma vez que j = n temos:

$$\eta_{p}^{\alpha}\eta_{q}^{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{j}^{N} e^{i(\alpha p + \mu q)j} \left[T_{1}\sigma_{j}^{\alpha}\sigma_{j}^{\mu} - \mu T_{2}\sigma_{j}^{\alpha}\sigma_{j}^{-\mu} - \alpha T_{3}\sigma_{j}^{-\alpha}\sigma_{j}^{\mu} - \alpha \mu T_{4}\sigma_{j}^{-\alpha}\sigma_{j}^{-\mu} \right]$$
(A.4)

Dispondo os valores para $\alpha \in \mu$ temos quatro médias:

$$<\eta_p^{\dagger}\eta_q>_0 = \frac{1}{2}\delta_{Q,0} + \frac{1}{N}(T_1 + T_4) < S_Q^z>_0$$
 (A.5)

$$<\eta_p^{\dagger}\eta_{-q}^{\dagger}>_0 = \frac{1}{N}(T_2 + T_3) < S_Q^z>_0$$
 (A.6)

$$<\eta_{-p}\eta_{-q}^{\dagger}>_{0} = \frac{1}{2}\delta_{Q,0} - \frac{1}{N}(T_{1} - T_{4}) < S_{Q}^{z}>_{0}$$
 (A.7)

$$<\eta_{-p}\eta_q>_0 = -\frac{1}{N}(T_2 + T_3) < S_Q^z>_0$$
 (A.8)

onde utilizamos a identidade $S_j^z = \sigma_j^+ \sigma_j - 1/2.$

Com estes resultados torna-se possível escrever $\langle S_Q^z \rangle_t$ em uma forma compacta, como é mostrado na seção 3.2. Para os casos de resolução numérica, retorna-se à representação $\{\sigma^+, \sigma^-\}$ diretamente através de uma transformação canônica. Neste caso, não são utilizadas as transformações inversas de Fourier e de Bogoliubov e as médias são obtidas mais rapidamente pelo processo análogo ao descrito anteriormente.

Apêndice B

Método da Fase Estacionária para Funções Reais

Se considerarmos uma cadeia infinita de spins $N \to \infty$, os somatórios das expressões de $\langle S_Q^z \rangle_t$ podem ser convertidos em integrais em k. Dessa forma, o problema consiste em resolver integrais do tipo:

$$J(t) = \int_0^\pi dk g(k) \exp[i\Omega(k)t]$$
(B.1)

onde a fase $\Omega(k)t$ é uma função real de uma variável real k. A função de amplitude g(k) pode ser complexa.

Se o tempo t é suficiente grande, a integral pode ser evaluada assintoticamente através do método da fase estacionária. A idéia central basea-se no fato de que, para $t \to \infty$, o termo $\exp[i\Omega(k)t]$ oscila muito rapidamente se comparado a g(k). Assim, vários cancelamentos ocorrem, exceto para vizinhos infinitesimais de pontos estacionários $k = k_e$ (para os quais $d\Omega(k_e)/dk = 0$) e dos pontos das extremidades $k = 0, \pi$.

Na prática, há complicações se estes pontos estão muito próximos ou próximos das extremidades. Neste apêndice ilustraremos apenas o caso mais simples, no qual há somente pontos estacionários isolados, tendo em vista que desejamos apenas termos dominantes. As deduções foram retiradas da ref. [19].

Mais especificamente consideraremos o caso em que o ponto estacionário isolado encontra-se no interior do intervalo de integração $0 < k_e < \pi$.

Expandimos $g(k) \in \Omega(k)$ em série de Taylor ao redor deste ponto e também $\exp\{i[\Omega(k) - \Omega(k_e) - \frac{1}{2}\Omega''(k_e)(k-k_e)^2]\}$. A integral fica:

$$J = \exp(it\Omega_{(0)}) \int_{-\infty}^{\infty} (g_0 + g_1 x + g_2 x^2 + ...) \{1 + it(\Omega_3 x^3 + \Omega_4 x^4 + ...) + [(it)^2/2!](\Omega_3 x^3 + \Omega_4 x^4 + ...)^2 + ...\} \exp(it\Omega_2 x^2) dx$$
(B.2)

onde $x = k - k_e$, $g_n = g^{(n)}(k_e)/n!$, $f_n = f^{(n)}(x_s)/n!$.

É permitido indroduzir limites de integrsação infinitos devido ao fato de que k_e é um ponto estacionário isolado, ou seja, está longe dos extremos e de outros pontos estacionários.

Agora integramos a equação (B.2) termo a termo. Por simetria, potências ímpares de x^n na função amplitude se anulam e devemos apenas considerar as contribuições de potências pares. Com isso reduzimos o cálculo a integrais do tipo:

$$J_{2n} = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} \exp(it\Omega_2 x^2) dt \tag{B.3}$$

Fazendo a mudança de variáveis $s = x \exp(\frac{1}{2} i a r g \Omega_2)$ obtemos:

$$J_{2n} = \exp[-i(n+\frac{1}{2})arg\Omega_2] \int_{-\infty}^{\infty} s^{2n} \exp(it|\Omega_2|s^2) ds$$
(B.4)

onde $0 \le \arg \Omega_2 < 2\pi$ e o caminho de integração está ao longo do eixo real. Esta integral converge se $\Re(s)\Im(s) > 0$. Então, utilizando o teorema de Cauchy e o lemma de Jordan:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} s^{2n} \exp(i\alpha s^2) ds = 2 \int_0^{\infty} s^{2n} \exp(i\alpha s^2) ds$$
(B.5)

onde $\alpha = t |\Omega_2| > 0.$

Finalmente, com a mudança de variáveis $u = -i\alpha s^2$ chegamos a uma forma integral conhecida:

$$I = \left(\frac{i}{\alpha}\right)^{n+\frac{1}{2}} \int_0^\infty u^{n-\frac{1}{2}} e^{-u} du = \left(\frac{i}{\alpha}\right)^{n+\frac{1}{2}} \Gamma(n+\frac{1}{2})$$
(B.6)

de modo que a integral (B.4) tem solução:

$$J_{2n} = \left(\frac{\pi}{t|\Omega_2|}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[i\left(\frac{\pi}{4} - \frac{arg\Omega_2}{2}\right)\right] \frac{i^n \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{\pi^{n+\frac{1}{2}} (t\Omega_2)^n} \tag{B.7}$$

onde $\Gamma(n+\frac{1}{2})$ é a função gamma.

O intuito agora é agrupar os termos da expressão (B.2) para obtermos uma expansão assintótica em termos de $(1/k)^n$. Da solução (B.7) temos que um termo em (B.2) com fator $t^m x^{2n}$ terá contribuição da ordem $t^{-1/2}t^{m-n}$. Assim, selecionamos os termos para os quais m-n é constante. Os três primeiros termos (m-n=0,-1,-2) implicam:

$$J \sim \left(\frac{\pi}{|\Omega_2|t}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[i\left(\Omega_0 t + \frac{\pi}{4} - \frac{arg\Omega_2}{2}\right)\right] (Q_0 + Q_2 + Q_4)$$
(B.8)

onde $Q_0 = g_0$

$$\begin{aligned} Q_2 &= \frac{i}{\Omega_2 t} \left(\frac{1}{2} g_2 - \frac{3}{4} \frac{(g_1 \Omega_3 + g_0 \Omega_4)}{\Omega_2} + \frac{15}{16} \frac{g_0 \Omega_3^2}{\Omega_2^2} \right) \\ Q_4 &= \frac{i}{(\Omega_2 t)^2} \left[-\frac{3}{4} g_4 + \frac{15}{8} \frac{A}{\Omega_2} - \frac{105}{32} \frac{B}{\Omega_2^2} + \frac{315}{64} \frac{C}{\Omega_2^3} - \frac{3465}{512} g_0 (\frac{\Omega_3}{\Omega_2})^4 \right] \\ A &= g_3 \Omega_3 + g_2 \Omega_4 + g_1 \Omega_5 + g_0 \Omega_6 \\ B &= g_2 \Omega_3^2 + 2g_1 \Omega_3 \Omega_4 + g_0 (\Omega_4^4 + 2\Omega_3 \Omega_5) \\ C &= g_1 \Omega_3^3 + 2g_0 \Omega_3^2 \Omega_4 \end{aligned}$$

Bibliografia

- [1] Y. Imry. Introduction to mesoscopic physics, volume 2nd Ed. OXFORD University Press, 2002.
- [2] R. Landauer, Y. Imry. Conductance viewed as transmission. *Reviews of Modern Physics*, 71, 1999.
- [3] T. Iitaka. Solving the time-dependente Schröedinger equation numerically. *Physical Review* E, 49(5), 1994.
- [4] S. R. White, A. E. Feiguin. Finite-temperature density matrix renormalization using an enlarged hilbert space. *Physical Review B*, 72(020404), 2005.
- [5] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki. Quantum entanglement. arXiv: quant-ph/0702225v2, 2007.
- [6] G. Schön, A. Shnirman, Y. Makhlin. Quantum-state engineering with Josephson-junction devices. *rmp*, 73:357–400, 2001.
- [7] D. Tygel. Tese de Mestrado. (Orientada por G.G. Cabrera), Julho de 2001.
- [8] G. G. Cabrera, G. O. Berim. Long time tails in the dynamics of the spatially inhomogeneous magnetization of dimerized isotropic xy chains for spin $s = \frac{1}{2}$. *Physica A*, 238:211, 1997.
- [9] Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, volume 2nd Ed. Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1997.
- [10] G.G Cabrera, R. Jullien. Role of boundary conditions in the finite-size Ising model. *Physical Review B*, 35(13), 1987.
- [11] J. G. Carvalho. Tese de Doutorado. (Orientada por G.G. Cabrera), Junho 2006.
- [12] S. Berim, G. G. Cabrera, G. O. Berim. Long-time tails and anomalous slowing down in the relaxation of spatially inhomogeneous excitations in quantum spin chains. *Physical Review B*, 66:094401, 2002.

- [13] D. Medeiros, G. G. Cabrera, J. G. Carvalho. Anomalous slow dynamics in quantum spin chains. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 272:886.
- [14] T. Schulz, D. Mattis, E. Lieb. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. Annals of Physics (N.Y.), 16(407), 1961.
- [15] S. Sachdev. Quantum phase transitions. Cambridge University Press, 1999.
- [16] J.B.Kogut. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. Reviews of Modern Physics, 51(4):659-713, 1979.
- [17] R. Coldea, et al. Quantum Criticality in an Ising Chain: Experimental Evidence for Emergent E8 Symmetry. Science, 327(177), 2010.
- [18] G.O.Berim, A.R.Kessel. Teor. Mat. Fiz., 58(388):388-397, 1984, in Russian.
- [19] J.J. Stamnes. Wave in Focal Regios. Adam Hilger, Bristol and Boston, 1986 Capítulo 8.
- [20] T. R. de Oliveira, M. C. de Oliveira, Rigolin, G. Operational classification and quantification of multipartite entagled states. *Physical Review A*, 74(022314), 2006.