

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS  
INSTITUTO DE FÍSICA

# Ordem Topológica e Transições de Fases Quânticas em Cadeias de Spins Interagentes.

LUAN FELIPE SANTOS MARTINS VERÍSSIMO

Maceió - Brasil  
Abril - 2023

LUAN FELIPE SANTOS MARTINS VERÍSSIMO

# Ordem Topológica e Transições de Fases Quânticas em Cadeias de Spins Interagentes.

Tese apresentada no Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, como requisito necessário para a qualificação de Doutorado em Física.

Orientador:  
Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

Maceió - Brasil  
Abril - 2023

**Catálogo na Fonte**  
**Universidade Federal de Alagoas**  
**Biblioteca Central**  
**Divisão de Tratamento Técnico**

Bibliotecário: Marcelino de Carvalho Freitas Neto – CRB-4 - 1767

L732a Veríssimo, Luan Felipe Santos Martins.

Ordem topológica e transições de fases quânticas em cadeias de spins interagentes / Luan Felipe Santos Martins Veríssimo. – 2023.

[162] f. : il.

Orientador: Marcelo Leite Lyra.

Tese (doutorado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2023.

Bibliografia: f. 125-138.

Apêndices: f. 139-[162].

1. Spin quântico. 2. Tensores 3. Topologia. 4. Fase quântica - Transição. 5. Dissipação. I. Título.

CDU: 537.611.2



**Universidade Federal de Alagoas**  
**Instituto de Física**  
Programa de Pós Graduação em Física

BR 104 km 14, Campus A.C. Simões  
Cidade Universitária  
Tabuleiro dos Martins  
57072-970 Maceió - AL, Brasil  
FONE : (82) 3214-1423

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE**  
**TESE DE DOUTORADO**

**“Ordem Topológica e Transições de Fases Quânticas em Cadeias de Spins**  
**Interagentes”**

**por**

**Luan Felipe Santos Martins Veríssimo**

A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (orientador e presidente da banca), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Maria Socorro Seixas Pereira, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas; Rodrigo Gonçalves Pereira, da Universidade Federal do Rio Grande do Norte; Rene Rodrigues Montenegro Filho, da Universidade Federal de Pernambuco e Adauto José Ferreira de Souza, da Universidade Federal Rural de Pernambuco, consideram o candidato **aprovado com conceito “A”**.

Maceió, 11 de abril de 2023.

Documento assinado digitalmente

**gov.br**

MARCELO LEITE LYRA  
Data: 27/04/2023 17:37:18-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

Documento assinado digitalmente

**gov.br**

MARIA SOCORRO SEIXAS PEREIRA  
Data: 27/04/2023 17:28:04-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof<sup>ª</sup>. Dr<sup>ª</sup>. Maria Socorro Seixas Pereira

*Rodrigo Gonçalves Pereira*

Prof. Dr. Rodrigo Gonçalves Pereira

Documento assinado digitalmente

**gov.br**

RENE RODRIGUES MONTENEGRO FILHO  
Data: 13/04/2023 03:04:27-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Rene Rodrigues Montenegro Filho

Documento assinado digitalmente

**gov.br**

ADAUTO JOSE FERREIRA DE SOUZA  
Data: 14/04/2023 09:36:21-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Dr. Adauto José Ferreira de Souza

Dedico essa Tese à minhas avós Gerusa e

Maria Luiza(*in memoriam*).

Ainda, dedico à minha companheira de vida Thatiane Veríssimo.

“Caminhante não há caminho, se faz caminho ao caminhar...”

*Poema Cantares - Antônio Machado*

# AGRADECIMENTOS

Inicialmente eu gostaria de agradecer a minha família que sempre me apoiou e torceu por mim desde o primeiro momento em que decidi seguir minha carreira como físico. Em especial agradeço a minha referência de vida e avó Gerusa Santos, âncora maior da família, por todo amor e confiança que depositaste em mim durante todo esse tempo. Sem a senhora nada disso seria possível. Nunca conseguirei retribuir tudo que fizestes por mim, muito obrigado.

À minha companheira Thatiane Veríssimo, minha maior inspiração acadêmica e meu porto seguro. Sem você nada seria possível, obrigado meu amor !

Aos meus amigos irmãos Adriano, Thalys, Danilo, Welton, Afrânio, Felipe, Alexandre, Renan por todos os momentos de alegria e de dor que passamos juntos por todos esses anos. Muito obrigado por tudo!

À turma oficial da sala 10, Fabi, Cibelle, Carol, Jamerson pela convivência que tivemos no dia-a-dia de Doutorado, aplacada frontalmente pela pandemia. Só ficaram as boas lembranças, obrigado !

Ao Prof. Marcelo Lyra pela oportunidade dada desde a graduação em trabalhar com temas interessantes na área do magnetismo. Para além de todas as discussões em sala de aula e aprendizado como um grupo de pesquisa, agradeço sobretudo pela oportunidade. Muitas vezes é só disso que um aluno precisa.

Ao Prof. Román Orús pela oportunidade única de trabalhar em seu grupo de pesquisa no Departamento Internacional de Física de Donostia(DIPC) durante o meu período de doutorado sanduíche na Espanha. Um período muito importante para minha formação e de aprendizado em todos os aspectos.

Aos professores Nicolas Lafflorencie, Geza Giedke e colegas Jonathan d'Emidio e Pablo Bermejo por todas as boas discussões sobre física durante as muitas sessões de cafés no DIPC.

Aos meus colegas de Donosti Arturo, Atzi, Camila, Anar, Dani, Simantika, JJ, Vinicius e Jozef por todos os momentos compartilhados. Aprendi muito com cada um de vocês, obrigado !

Ao Prof. Jozef Strečka pela paciência em ensinar e a disponibilidade que teve no meu início do mestrado. Desde então se tornou um grande colaborador e referência acadêmica, obrigado!

À Prof. Maria Socorro por toda prestatividade, receptividade e boas conversas. Também pelas boas discussões nas reuniões do grupo de magnetismo e os momentos de descontração dentro e fora de sala de aula.

À todos os professores do instituto de física que contribuíram para a minha formação. Destaco aqui a professora Solange e o professor Fidelis sempre boas conversas e conselhos sinceros.

Aos professores do grupo de pesquisa de magnetismo do departamento de física de Lavras, Onofre, Sergio, Moisés e Jordana por toda relação de anos com o grupo da UFAL, sempre trazendo boas ideias e excelentes discussões.

Aos professores René Montenegro e Rodrigo Pereira pelas eventuais discussões sobre matéria condensada em diversas oportunidades diferentes. Aprendi muito com vocês e com as referências indicadas, obrigado !

À Capes, CNPq e FAPEAL pelo apoio financeiro.

# Resumo

Neste trabalho, investigamos ordens topológicas e transições de fases quânticas em modelos de spins interagentes distintos utilizando métodos numéricos derivados da teoria de redes de tensores. Introduzimos o método de escala tangencial de tamanho finito, onde demonstramos a sua validade na caracterização de transições de fases topológicas entre as fases de Haldane e *Large-D* em uma cadeia de Heisenberg anisotrópica de spin  $S = 1$ . Os nossos resultados foram validados por previsões teóricas do expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu$  obtidos a partir de uma teoria de campos efetiva  $\sigma$  não linear. Em seguida, investigamos as fases quânticas e transições de fases topológicas para uma classe de modelos ferrimagnéticos tetrâmeros ( $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$ ) com interações de Heisenberg isotrópicas e alternadas. Investigamos primeiro o caso  $S_1 = \frac{1}{2}$  e  $S_2 = \frac{5}{2}$  onde obtivemos o diagrama de fases do modelo e investigamos as fases quânticas a partir de curvas de magnetização distintas. Caracterizamos ainda o ponto crítico do digrama de fases utilizando o método de escala tangencial de tamanho finito, onde temos uma transição de fases topológica de expoente crítico  $\nu = \frac{2}{3}$ . Em seguida, investigamos a universalidade de transições de fases topológica para uma classe de cadeias ferrimagnéticas ( $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$ ) com  $S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$  onde demonstramos que os pontos críticos a campo nulo que surgem nessa classe de modelos é universal e pertencem a class de universalidade  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten com  $\nu = \frac{2}{3}$ . Dessa forma investigamos outra cadeia ferrimagnética tetrâmera com  $S_1 = 1$  e  $S_2 = \frac{3}{2}$ , onde obtivemos um rico diagrama de fases do modelo apresentando sucessivas transições de fases topológicas a campo nulo. Investivamos essas transições novamente implementando o método de escala tangencial de tamanho finito, onde demonstramos que essas transições também são universais e pertencentes a classe  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten com  $\nu = \frac{2}{3}$ . Por fim, estudamos efeitos de dissipação sob o ordenamento topológico protegido por simetria. Para tal, investigamos a dinâmica dissipativa do modelo de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki em uma dimensão a partir da equação mestra de Lindblad. Mostramos que para dissipação que preserva a simetria de reversão-temporal o ordenamento topológico se mantém sob dinâmica dissipativa mesmo para valores altos de acoplamento entre o sistema físico e o ambiente. Entretanto, para dissipações que quebram a simetria de reversão-temporal vimos que a dinâmica dissipativa destrói o ordenamento topológico.

**Palavras-chave:** 1. Modelos de spins quânticos. 2. Redes de Tensores 3. Ordem topológica 4. Transição de fases quânticas 5. Dissipação

# Abstract

In this work, we investigate topological orders and quantum phase transitions in distinct interacting spin models using numerical methods. We introduce the finite-size tangential scaling method, where we demonstrate its validation in the characterization of topological phase transitions between Haldane and *Large-D* phases in an anisotropic Heisenberg chain of spin  $S = 1$ . Our results were validated by theoretical theories of the critical exponent of the comprehension length  $\nu$  originated from a non-linear effective field theory  $\sigma$ . Next, we investigate the quantum phases and topological phase transitions for a class of tetramer ferrimagnetic models ( $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$ ) with sophisticated isotropic and alternating Heisenberg Heisenberg. We first investigate the case  $S_1 = \frac{1}{2}$  and  $S_2 = \frac{5}{2}$  where we obtain the phase diagram of the model and investigate the quantum phases from different magnetization curves. We characterize a critical point of the phase diagram using the finite-size tangential scaling method, where we have a topological phase transition of critical exponent  $\nu = \frac{2}{3}$ . Next, we investigate the universality of topological phase transitions for a class of ferrimagnetic chains ( $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$ ) with  $S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$  where we demonstrate that the zero-field critical points that arise in this class of models are universal and property the universality class  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten with  $\nu = \frac{2}{3}$ . Finally, we investigated another tetramer ferrimagnetic chain with  $S_1 = 1$  and  $S_2 = \frac{3}{2}$ , where we obtained a rich phase diagram of the model showing successive transitions of topological phases at zero fields. We investigate these transitions again implementing the finite size tangential scaling method, where we demonstrate that these transitions are also inherent and belong to the  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten class with  $\nu = \frac{2}{3}$ . Finally, we study global dissipation effects under the symmetry-protected topological ordering. To this end, we investigated the dissipative dynamics of the Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki model in one dimension from the Lindblad master equation. We show that for dissipation that preserves the time-reversal symmetry the topological ordering remains under dissipative dynamics even for high values of coupling between the physical system and the environment. However, for dissipations that break the time-reversal symmetry, we saw that the dissipative dynamics destroy the topological ordering.

**Keywords:** 1. Quantum spin models. 2. Tensor networks 3. Topological order  
4. Quantum phase transitions 5. Dissipation

# Sumário

Folha de rosto . . . . .	i
Dedicatória . . . . .	iv
Epígrafe . . . . .	v
Agradecimentos . . . . .	vi
Resumo . . . . .	viii
Abstract . . . . .	ix
Sumário . . . . .	x
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Apresentação Geral do Trabalho . . . . .	3
<b>2 Fundamentação Teórica</b>	<b>5</b>
2.1 Magnetismo Quântico . . . . .	6
2.1.1 Modelo de Heisenberg . . . . .	7
2.1.2 Ferrimagnetismo . . . . .	14
2.2 Fenômenos de Haldane no modelo de Heisenberg . . . . .	17
2.2.1 A conjectura de Haldane para o modelo de Heisenberg . . . . .	18
2.2.2 O modelo de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki . . . . .	19
2.2.3 Caracterização da fase de Haldane . . . . .	21
2.3 Emaranhamento Quântico . . . . .	25
2.3.1 Emaranhamento e Sistemas Quânticos de Muitos Corpos . . . . .	25
<b>3 Métodos de redes de tensores para sistemas quânticos de muitos corpos</b>	<b>30</b>
3.1 Introdução . . . . .	30
3.2 Teoria de Redes de Tensores . . . . .	32
3.2.1 Estados de produto de matrizes . . . . .	35
3.2.2 Forma Canônica . . . . .	36
3.2.3 Estados de produto de matriz invariantes sob translação . . . . .	38
3.3 Métodos Numéricos . . . . .	39
3.3.1 O método <i>Time-Evolving Block Decimation</i> . . . . .	39
3.3.2 O método <i>Density Matrix Renormalization Group</i> . . . . .	44
<b>4 Transições de Fases Topológicas no Modelo de Haldane Anisotrópico</b>	<b>49</b>
4.1 O modelo de Haldane anisotrópico . . . . .	49
4.2 Obtenção de diagrama de fases e linhas críticas . . . . .	53

4.3	Teoria $\sigma$ não linear para transições Gaussianas . . . . .	55
4.4	O método de escala tangencial de tamanho finito . . . . .	57
4.5	Conclusões e Perspectivas . . . . .	67
<b>5</b>	<b>Transições de Fases Topológicas em Cadeias Ferrimagnéticas Tetrâmeras.</b>	<b>68</b>
5.1	Introdução . . . . .	68
5.2	Ordenamento magnético e transição de fase topológica em uma cadeia Ferrimagnética tetrâmera $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$ . . . . .	71
5.2.1	O modelo de cadeia tetrâmera $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$ . . . . .	72
5.2.2	Diagrama de fases e curvas de Magnetização . . . . .	73
5.2.3	Caracterização da transição de fase topológica . . . . .	82
5.3	Universalidade das Transições de fases em cadeias Ferrimagnéticas Tetrâmera $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$ . . . . .	87
5.3.1	Diagrama de fases e curvas de Magnetização . . . . .	88
5.3.2	Transições de Fases Topológica . . . . .	92
5.4	Fases Topológicas Não Triviais e Sucessivas Transições em Cadeias Ferrimagnéticas Tetrâmera $1 - 1 - \frac{3}{2} - \frac{3}{2}$ . . . . .	96
5.4.1	Diagrama de fases e curvas de Magnetização . . . . .	97
5.4.2	Caracterização das transições de fases topológicas . . . . .	105
5.5	Conclusões e Perspectivas . . . . .	108
<b>6</b>	<b>Ordem Topológica Protegida por Simetria induzidas por Dissipação.</b>	<b>110</b>
6.1	Introdução . . . . .	110
6.2	Métodos de Redes de Tensores para Sistemas Dissipativos . . . . .	112
6.3	O modelo AKLT sob dissipação . . . . .	116
6.4	Conclusões e Perspectivas . . . . .	121
<b>7</b>	<b>Considerações Finais e Perspectivas</b>	<b>122</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>125</b>
<b>A</b>	<b>Lista de Artigos Publicados e Submetidos</b>	<b>139</b>
<b>B</b>	<b>Artigos Publicados da Tese</b>	<b>141</b>

# Capítulo 1

## Introdução

O papel fundamental da física é buscar descrever as leis que governam o nosso universo, em especial aquelas que ditam o comportamento da matéria. De fato a humanidade busca controlar e entender os processos físicos na matéria há muitos anos, seja no domínio do fogo até as primeiras descobertas do magnetismo e suas aplicações em navegação com construção de bússolas rudimentares [1]. Nos dias atuais há um grande interesse na comunidade científica por estudar por propriedades importantes em novos materiais com grande potencial de aplicações em novas tecnologias. Porém desde o advento da mecânica quântica estudar a matéria a partir de uma descrição puramente quântica é uma tarefa muito complicada e excitante, uma vez que novos fenômenos físicos e fases de matéria surgem exatamente a partir da descrição quântica das partículas que formam o material e suas interação. Um dos maiores físicos na área de matéria condensada, Paul W. Anderson apontou muito bem em seu artigo famoso [2] "*More is Different*" como a descrição puramente quântica da matéria para além de aproximações de campo médio, tratando então o problema quântico de muitos corpos, poderia abrir as portas para uma gama de novos fenômenos físicos na matéria. De fato, nos dias atuais se fala muito sobre *Quantum Matter* [3] como uma extensão da matéria condensada com foco de investigar fenômenos emergentes em sistemas de partículas quânticas interagentes. Nesse cenário fases topológicas da matéria vem se destacando na área de física dos materiais por seu grande potencial de aplicações em novas tecnologias e principalmente computação quântica topológica [4-6], esta última surge como uma das propostas promissoras de funcionamento de um computador quântico nos dias atuais. Fases topológicas da matéria são intrigantes por apresentarem propriedades que desafiam as bases teóricas e conceitos muito bem estabelecidos; a idéia de parâmetro de ordem e quebra espontânea de simetria, base da teoria de Landau-Ginzburg para descrever as fases da matéria não caracteriza adequadamente as fases topológicas, uma vez que essas novas fases quânticas não são descritas por parâmetros de ordem locais. Além disso, é possível duas fases topológicas se conectarem adiabaticamente sem transições de fase ou quebra espontânea de simetria [7-9], o que ataca frontalmente a teoria mencionada. Em especial fases topológicas são descritas por estados fundamentais robustos a perturbações externas [10], modos de borda com condução perfeita em isolantes topológicos bidimensionais [11, 12], excitações descritas por

quasi-partículas que apresentam uma estatística não usual com potencial em aplicações em computação quântica [5], supercondutores topológicos e efeito Hall quântico [13]. A importância desse novo ramo da área de física dos materiais foi reconhecida no nobel em física de 2016 onde grandes nomes da área de física teórica como Thouless, Haldane e Kosterlitz foram agraciados com o prêmio maior da academia científica reafirmando a importância da área no âmbito teórico e experimental.

O magnetismo quântico é uma área da matéria condensada muito rica uma vez que trata de entender o ordenamento dos elétrons dos materiais a partir de uma teoria quântica de muitos corpos implicando uma gama de fenômenos emergentes interessantes onde destaque fases exóticas da matéria e suas transições de fases quânticas [14–17]. Muitos dos modelos investigados da área também apresentam ordenamento topológico [18–20] e são amplamente investigados pela comunidade científica [21–28]. Tratar de modelos teóricos que descrevam materiais topológicos em geral é uma tarefa desafiadora, uma vez que muitos desses modelos não apresentarem técnicas analíticas exatas que nos permitam acessar o seu estado fundamental. Vale mencionar alguns modelos importantes que podem ser estudados exatamente como o modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) [8, 29] que representa a estrutura eletrônica de uma classe de isolantes topológicos não interagentes. O modelo também tem estudos experimentais por sua relação com o polímero poliacetileno [30]. O modelo de Kitaev [4] em uma rede *honeycomb* bidimensional também pode ser resolvido exatamente introduzindo operador de Majorana, onde o sistema apresenta um rico diagrama de fases [31]. Em sistemas quânticos de spins interagentes o modelo de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki representa um ponto exatamente solúvel no espaço de parâmetros do modelo de spins  $S = 1$  Heisenberg bilinear biquadrático [32, 33], sendo o primeiro modelo a confirmar as conjecturas de Haldane para a cadeia de spin  $S = 1$  de Heisenberg e no entendimento mais abrangente de fases topológicas protegidas por simetria [18]. Porém de maneira geral tratar de isolantes topológicos interagentes não é uma tarefa fácil por não apresentar de maneira geral soluções analíticas para a grande maioria dos modelos investigados, sendo necessário partir para técnicas numéricas avançadas que nos permita acessar o estado fundamental do modelo de interesse. De fato, métodos como Monte Carlo quântico [34], teoria do funcional de densidade [35, 36] e mais recentemente métodos advindos da teoria de redes de tensores [37–42] como os métodos *Time-Evolving Block Decimation* [43, 44], *Density Matrix Renormalization Group* [45, 46] e *Projected Entangled Pair States* [47, 48] são fundamentais para aprofundar o entendimento desses modelos complexos e permitir tecer previsões teóricas de fenômenos quânticos emergentes na matéria [7, 8]. Em especial para modelos teóricos de uma dimensão podemos também utilizar de métodos de teoria de campos aplicados a matéria condensada [49–52] de baixas energias para nos ajudar em um entendimento melhor dos fenômenos de interesse. Nesse trabalho vamos dispor de métodos numéricos e técnicas advindas da teoria de campos para investigar fenômenos topológicos em modelos quânticos de spins interagentes, onde nos inserimos no estudo de fases topológicas da matéria em modelos de spins interagentes.

## 1.1 Apresentação Geral do Trabalho

O objetivo desse trabalho é investigar o ordenamento e transições de fases topológicas em modelos quânticos de spins interagentes utilizando de um método numéricos modernos derivados da teoria de rede de tensores. Para tal utilizamos os pacotes numéricos ALPS e iTensor escritos em Python e Julia respectivamente para a implementação do método *Density Matrix Renormalization Group*. Para o estudo de sistemas quânticos abertos, implementamos em Python o método *Time-Evolving Block Decimation* adaptado para resolver a dinâmica dissipativa descrita pela equação mestra de Lindblad. Este último trabalho foi fruto do meu período de doutorado sanduíche em visita ao grupo do prof. Dr. Román Orús no departamento internacional de física de Donostia localizado em San Sebastian, Espanha.

O trabalho está organizado da seguinte maneira :

No Capítulo dois introduzimos conceitos importantes de magnetismo quântico, partindo do modelo de Heisenberg e os ordenamentos magnéticos. Em seguida discutimos os trabalhos de Haldane no estudo das propriedades de Heisenberg spins  $S = 1$  e suas implicações em fases topológicas não triviais. Por fim introduzimos o conceito de emaranhamento quântico, entropias de emaranhamento e as suas principais propriedades.

No Capítulo três introduzimos o problema de simular sistemas quânticos de muitos corpos, onde especificamente para sistemas quânticos em uma dimensão o método de grupo de renormalização da matrix densidade é um dos mais efetivos. Descrevemos as idéias básicas do método como também os algoritmos para sistemas finitos e infinitos.

No Capítulo quatro introduzimos um método simples e bastante efetivo que nos permite caracterizar transições de fases quânticas entre fases que apresentam gap energético. O método denominado análise de escala tangencial de tamanho finito foi introduzido em um trabalho recente [53], onde estudamos as propriedades críticas do modelo de Heisenberg XXZ com anisotropia de campo cristalino. Para tal utilizamos o método numérico *density matrix renormalization group*(DMRG) a partir do pacote numérico *ALPS* [54], onde obtivemos as fases quânticas do modelo construindo assim o diagrama de fases no espaço de parâmetros de interesse. Demonstramos a validade desse método investigando a linha crítica do modelo que apresenta uma transição de fases topológica e comparamos os nossos resultados com previsões de um modelo efetivo de teoria de campos.

No capítulo cinco aplicamos o método de escala tangencial de tamanho finito no estudo de transições de fases topológica em uma cadeia ferrimagnética tetrâmetro  $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$  com interações de Heisenberg isotrópicas e alternadas. Para tal, utilizamos dessa vez o pacote iTensor [55] que nos fornece um código otimizado do método DMRG no formalismo de redes de tensores. Investigamos a classe desse modelo, primeiro para o caso  $S_1 = \frac{1}{2}$  e  $S_2 = \frac{5}{2}$  pois essa cadeia tem uma forte inspiração experimental em um material real. Investigamos o diagrama de fases e as curvas de magnetização do modelo e verificamos um ponto crítico onde uma transição de fase topológica ocorre. Demonstramos utilizando o método que introduzimos que esta é uma transição da classe de universalidade SU(2)

Wess-Zumino-Witten. Em seguida, investigamos a classe de modelos  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$  com  $S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$  onde verificamos que todos esses modelos apresentam a mesma transição de fases topológica, mostrando a independência do tipo de transição com a natureza do spin  $S$ . Por fim, investigamos outro modelo tetrâmico  $1 - 1 - \frac{3}{2} - \frac{3}{2}$  que apresenta transições de fases topológicas sucessivas. Estudamos o diagrama de fases do modelo assim como as curvas de magnetização e demonstramos que tais transições sucessivas também pertencem a class de universalidade de  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten.

No capítulo seis investigamos o efeito de dissipação em fases topológicas simetricamente protegidas. Para tal, implementamos o método *Time-Evolving Block Decimation* para uma cadeia infinita adaptado para dinâmicas Markovianas [56], onde resolvemos a equação mestra de Lindblad para o modelo de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) sob dissipação global. Demonstramos que para dissipações não-simétricas em relação a simetria de reversão temporal, o ordenamento topológico não se mantém estável. Considerando dissipações globais simétricas em relação a simetria de reversão temporal obtivemos um ordenamento topológico induzidos por dissipação. Nossos argumentos são baseados em medidas de parâmetro de ordem *string*, pureza e o espectro de Schmidt para a matriz densidade mista do modelo. Vale ressaltar que os nossos resultados demonstram que assim como o espectro de emaranhamento apresenta o padrão de degenerescência para a matriz densidade de uma fase topológica não trivial em um estado puro, obtivemos o mesmo padrão para o espectro de Schmidt de uma matriz densidade de uma estado misto

Por fim no Capítulo sete sintetizamos os resultados que obtivemos nesse trabalho e projetamos perspectivas futuras.

## Capítulo 2

# Fundamentação Teórica

O magnetismo na matéria é um dos fenômenos físicos mais interessantes e intrigantes no qual o homem tem contato diretamente desde muito antes de qualquer revolução industrial e tecnológica, sendo utilizado pela humanidade desde as primeiras aplicações em bússolas rudimentares [57, 58] até aplicações modernas que vão de trens de altas velocidades que operam sob levitação magnética [59], materiais topológicos [11, 12] e computação quântica topológica [5, 6]. Em perspectiva, as primeiras tentativas sucedidas para o entendimento dos fenômenos magnéticos nos materiais partir de conceitos advindos da teoria do eletromagnetismo clássico, introduzindo a ideia de campos magnéticos produzidos por correntes elétricas que se propagam no material dando origem aos dipólos magnéticos através dos conceitos de correntes circulares [1]. Entretanto, o magnetismo espontâneo na matéria não é possível ser explicado a partir da teoria do eletromagnetismo clássico [1, 58]. De fato, este é um efeito emergente derivado das interações entre os constituintes atômicos que compõe a matéria, sendo devidamente explicado somente a partir da descrição quântica das interações eletrônicas e suas implicações. É possível mostrar a partir do teorema Bohr-van Leeuwen [57] que a teoria clássica não explica o ordenamento magnético espontâneo da matéria uma vez que as interações entre os dipolos magnéticos é muito fraca para justificar a existência de materiais ferromagnéticos com elevada temperatura de Curie [60, 61].

O estudo de modelos físicos que descrevam materiais magnéticos é um dos problemas mais antigos da teoria do estado sólido [62–64] dada a sua importância para o entendimento das leis que governam as interações e ordenamentos da matéria. De fato estes trabalhos pioneiros deram talvez os primeiros passos para o entendimento que temos atualmente sobre o funcionamento da matéria a partir de uma descrição quântica dos seus componentes e suas interações, dando origem a o que chamamos de *quantum matter* [3] a área da física que une conceitos de diferentes frentes de pesquisa como matéria condensada [18, 60, 65–67], teoria de campos [49–52, 68], transição de fases [14, 16, 69], fases topológicas [7–9], informação quântica [70–72] dentre outras áreas da física. Nesse capítulo vamos introduzir conceitos fundamentais para o entendimento de sistemas magnéticos fortemente correlacionados a partir das perspectivas das áreas acima mencionadas. Na primeira parte vamos introduzir o magnetismo quântico e discutir as propriedades gerais

do modelo de Heisenberg e alguns ordenamentos magnéticos da matéria. Na segunda parte vamos discutir os fenômenos de Haldane em cadeias de Heisenberg e as fases topológicas em cadeias de spins. Por último vamos definir o que é emaranhamento quântico e suas relações com fases quânticas da matéria e implicações.

## 2.1 Magnetismo Quântico

O desenvolvimento da teoria quântica acompanhou o surgimento as primeiras teorias do estado sólido na busca do entendimento do ordenamento na matéria. Nesse cenário estudos como o de John Hubbard [73] introduziram um modelo que incorporava o princípio de Pauli para a aproximação *tight-binding*, onde a função de onda dos elétrons são majoritariamente localizadas em cada sítio da cadeia com uma pequena superposição entre os átomos vizinhos permitindo o elétron se mover entre eles. Esse modelo considera então um termo de energia cinética  $-t$  que controla o *hopping* dos elétrons e um termo de energia potencial  $U$  relacionado a interação de repulsão Coulombiana respeitando cada estado de spin. Dessa forma utilizando do formalismo de segunda quantização o hamiltoniano de Hubbard pode ser escrito da seguinte maneira [73, 74]

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \quad (2.1)$$

com  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) representa o operador de criação (aniquilação) fermiônico no sítio  $i$  de estado de spin  $\sigma$ ,  $t$  o parâmetro de hopping do elétron,  $U$  a energia de ligação dos elétrons de spins opostos no sítio  $i$  e  $\mu$  o potencial químico. Temos ainda  $n_{\sigma i} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  o operador número fermiônico que tem como autovalor a densidade eletrônica no dado sítio  $i$ . Considerando o regime de *half-filling* teremos apenas 1 elétron por sítio no sistema que estamos investigando. Para interações Coulombianas fortes, a repulsão eletrônica tende a manter os elétrons fixados em seus sítios de modo que não há condução elétrica nesse regime, este denominado isolante de Mott. No limite de fortes interações  $\frac{U}{t} \gg 1$  no regime de isolante de Mott obtemos um hamiltoniano efetivo para spins  $s = \frac{1}{2}$  dado por [60, 65]

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.2)$$

onde  $J \sim \frac{t^2}{U}$  e o operador de spin  $\vec{S}$  pode ser escrito em função dos operadores fermiônicos de criação e aniquilação a partir da relação [65]

$$S_i^\alpha = \sum_{\sigma, \sigma'=1}^2 \frac{\hbar}{2} c_{i\sigma}^\dagger \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha c_{i\sigma}, \quad \alpha = x, y, z$$

com  $S$  a componente  $\alpha$  do operador de spin e  $\tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$  a matriz de Pauli. O hamiltoniano representado pela equação (2.2) descreve como se dá a interação entre spins localizados e denominado modelo de Heisenberg. Apesar de sua simplicidade em sua estrutura, este modelo apresenta solução exata para um grupo limitado de casos [64] sendo a sua

solução para casos mais gerais passa através de modelos efetivos advindos de teoria de campos [50, 75] ou métodos numéricos [34–36]. O modelo de Heisenberg será objeto de estudo central nessa tese, onde vamos discutir suas propriedades mais gerais nas próximas sessões.

### 2.1.1 Modelo de Heisenberg

Considere um conjunto de spins representados por operadores quânticos de spin  $\mathbf{S}_i$  localizados nos sítios de um rede quadrada bipartida, ou seja, uma rede composta por duas sub-redes tal que cada spin em uma sub-rede interage apenas com o spin vizinho mais próximo na outra sub-rede da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (2.3)$$

com  $\langle i, j \rangle$  denota a soma apenas nos primeiros vizinhos. Neste caso os operadores de spins apresentam a álgebra  $SU(2)$  com as seguintes relações de comutação

$$[S^i, S^j] = i\hbar\delta_{ij}\epsilon_{ijk}S^k$$

com um espaço de Hilbert de dimensão  $\mathcal{C}^{2s+1}$  onde  $s$  é a magnitude do spin dado por  $\mathbf{S}^2 = s(s+1)\mathbb{1}$ . Para um conjunto de spins o espaço de Hilbert do sistema escala exponencialmente com o número de spins  $N$  da rede e é construído a partir do produto tensor  $(\mathcal{C}^{2s+1})^{\otimes N}$  o que torna lidar numericamente com sistemas quânticos de spins um problema complexo no qual os métodos de diagonalização exata são bem limitados [34, 36]. Uma forma de verificar que o modelo de Heisenberg é  $SU(2)$  simétrico é avaliando o operador spin total

$$\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{S}_i$$

uma vez que este comuta com o hamiltoniano (2.3). O modelo de Heisenberg pode representar um material magnético com ordenamento ferromagnético ( $J < 0$ ) onde os spins estão alinhados paralelamente ou o ordenamento antiferromagnético ( $J > 0$ ) com spins ordenando-se antiparalelamente. Uma forma de pensar o estado fundamental para esse modelo é considerar a função de onda  $|\Psi\rangle = \bigotimes_i |s, \eta_i m\rangle$  onde  $\eta_i = +1$  para o caso ferromagnético e  $\eta_i = (-1)^i$  para o caso antiferromagnético com as seguintes relações

$$\begin{aligned} S_i^z |s, \eta_i m\rangle_i &= \eta_i m |s, m\rangle_i \\ \mathbf{S}_i^2 |s, \eta_i m\rangle_i &= s(s+1) |s, \eta_i m\rangle_i \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dessa forma podemos pensar que os autoestados dos dois ordenamentos estão definidos seguindo as relações acima. De fato, no caso ferromagnético o estado clássico com todos os spins alinhados é autovetor do hamiltoniano de Heisenberg. O caso antiferromagnético é mais complexo, pois o estado onde os spins estão perfeitamente antiparalelos,

também denominado fase de Néel, não é autovetor do hamiltoniano (2.3). Uma forma de demonstrar esse fato é introduzindo os operadores de levantamento  $S^+$  e abaixamento  $S^-$  dados por

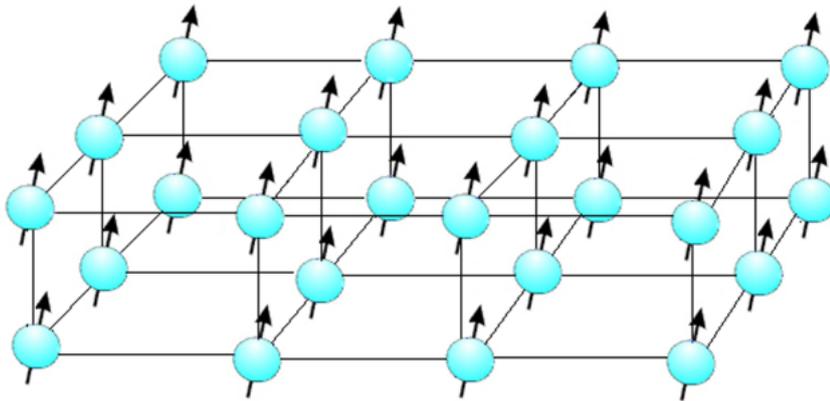
$$S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y \quad (2.5)$$

onde podemos reescrever o hamiltoniano como

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z \right] \quad (2.6)$$

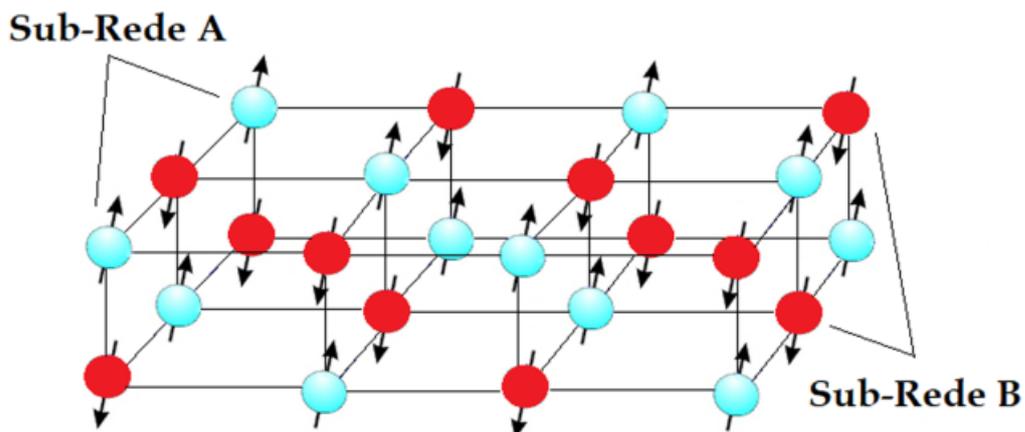
é fácil ver que atuando o hamiltoniano de heisenberg na forma acima nos estados  $|\Psi\rangle$  para o caso ferromagnético obtemos o autoestado esperado enquanto no caso antiferromagnético isso não ocorre. De fato, o estado clássico de Néel não é autovetor do hamiltoniano de Heisenberg e o ordenamento antiferromagnético não pode ser explicado classicamente.

Figura 2.1: Representação do ordenamento ferromagnético em uma rede cúbica de spins.



Fonte: L.M. Holanda et al, 2020

Figura 2.2: Representação do ordenamento antiferromagnético em uma rede cúbica de spins.



Fonte: L.M. Holanda et al, 2020

Uma estratégia para tentarmos entender como se dá o ordenamento antiferromagnético é partindo do estado clássico de Néel e considerar oscilações quânticas entorno desse estado. Como temos um estado clássico, podemos ainda tomar o limite  $s \rightarrow \infty$  em nossas considerações. Assim sendo, vamos introduzir os bósons de Holstein-Primakoff onde podemos expressar os nossos operadores de spin como [60, 65] :

$$\begin{aligned} S_i^+ &= (2s)^{\frac{1}{2}} \left( 1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2s} \right)^{\frac{1}{2}} a_i \\ S_i^- &= (2s)^{\frac{1}{2}} a_i^\dagger \left( 1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2s} \right)^{\frac{1}{2}} \\ S_i^z &= s - a_i^\dagger a_i \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde  $i$  representa um índice geral para subredes adjacentes. Seja então  $i$  e  $j$  índices para duas subredes adjacentes, temos  $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j}$  além de os operadores  $S^+$  e  $S^-$  escritos em função dos bósons de Holstein-Primakoff atuam de maneira distinta no estado de Néel a depender de qual subrede o sítio pertence. Vamos considerar nesse limite semiclassico que o número de bósons criados em torno do estado de Néel é pequeno, de modo que o operador número bosônico  $n_i = a_i^\dagger a_i \ll s$ . Dessa forma podemos expandir o termo de raiz quadrada em potências de  $\frac{1}{s}$  dados por

$$\left( 1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2s} \right)^{\frac{1}{2}} = 1 - \frac{1}{2} \frac{a_i^\dagger a_i}{2s} - \frac{1}{8} \left( \frac{a_i^\dagger a_i}{2s} \right)^2 + \dots \quad (2.8)$$

mantendo somente os termos lineares em  $n_i$  (aproximação linear) uma vez que estamos considerando um numero pequeno de bósons excitados e suas interações podem ser descartadas, reescrevemos os nosso operadores de spin como

$$\begin{aligned} S_i^- &\approx \sqrt{2s} a_i^\dagger \\ S_i^+ &\approx \sqrt{2s} a_i \end{aligned} \quad (2.9)$$

de modo que podemos reescrever o nosso hamiltoniano de heisenberg como

$$\mathcal{H} \approx \frac{-Jzs^2N}{2} + \frac{Js}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left( a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger + a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j \right) \quad (2.10)$$

onde  $z$  é o número de coordenação da rede e  $N$  o total de sítios. Podemos a partir da transformada de fourrier para os operadores bosônicos escrevê-los no espaço dos momentos a partir da relação

$$a_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} a_j$$

de modo que podemos reescrever o hamiltoniano no espaço dos momentos

$$\mathcal{H} \approx \frac{-Jzs^2N}{2} + Jsz \sum_{\mathbf{k}} \left[ a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2} (a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{-\mathbf{k}}^\dagger) \right] \quad (2.11)$$

onde  $\gamma_{\mathbf{k}} = \gamma_{-\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  com  $\mathbf{r}$  o vetor que conecta um sítio  $i$  da rede com o seu primeiro vizinho e  $\mathbf{k}$  o vetor cúbico da zona de Brillouin com  $|\mathbf{k}| \leq \pi$ . Nesse ponto podemos diagonalizar o hamiltoniano a partir de uma rotação no espaço dos momentos a partir da transformação de Bogoliubov

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}} &= \cosh(\theta_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}} - \sinh(\theta_{\mathbf{k}}) a_{-\mathbf{k}}^\dagger \\ \alpha_{-\mathbf{k}}^\dagger &= -\sinh(\theta_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}} + \cosh(\theta_{\mathbf{k}}) a_{-\mathbf{k}}^\dagger \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde teremos  $\tanh(2\theta_{\mathbf{k}}) = -\gamma_{\mathbf{k}}$ . Assim diagonalizamos o hamiltoniano (2.11) em termos dos novos operadores de ondas de spin  $\alpha_{\mathbf{k}}$ :

$$\mathcal{H} \approx \frac{-JzN}{2} s(s+1) + \sum_{\mathbf{k}} \left( \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) \omega_{\mathbf{k}} \quad (2.13)$$

onde teremos  $\omega_{\mathbf{k}} = Jsz\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}$ . Note que nessa aproximação semiclássica a correção na energia da fase quântica antiferromagnética em relação a energia do estado clássico de Néel implica [65]

$$\Delta E = \frac{-Jzs}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\omega_{\mathbf{k}} - 1) \leq 0$$

Outra quantidade importante para avaliarmos é a magnetização  $m$  definida com a diferença entre as magnetizações das subredes da fase quântica antiferromagnética

$$m^s = \frac{1}{N} \left( \sum_i S_i^z - \sum_j S_j^z \right) \quad (2.14)$$

a correção para essa quantidade é dada pelo valor esperado de

$$\Delta m^s = \langle m^s - s \rangle = -\frac{1}{N} \langle \sum_i a_i^\dagger a_i \rangle = -\frac{1}{N} \langle \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle \quad (2.15)$$

que avaliada no estado fundamental antiferromagnético na aproximação semiclássica teremos

$$\Delta m^s = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{1}{\sqrt{1-\gamma_{\mathbf{k}}^2}} - 1 \right) \quad (2.16)$$

A correção na magnetização dada pela equação (2.16) é pequena para dimensões  $d > 1$ , enquanto para  $d = 1$  esta apresenta uma divergência no infravermelho para  $\omega_{\mathbf{k}} \approx 0$ . Isso significa que mesmo considerando flutuações quânticas em torno do estado de Néel, a teoria de ondas de spins não prevê um estado fundamental antiferromagnético que apresenta ordem de longo alcance. Na verdade esse resultado está de acordo com o teorema de Mermin-Wagner [76] que prevê a impossibilidade de quebra espontânea de uma simetria contínua em modelos quânticos unidimensionais a temperatura finita. Em outras palavras, um estado fundamental com ordenamento magnético de longo alcance é populado por uma grande quantidade de bósons para qualquer temperatura finita  $t$  em um modelo unidimensional, destruindo assim um possível ordenamento quântico. É importante mencionar que teorema de Mermin-Wagner é demonstrado para temperaturas finitas, de modo sistemas quânticos a temperaturas nulas podem apresentar transições de fases quânticas devidos a flutuações quânticas sem a restrição imposta pelo teorema.

Até então mencionamos o modelo de Heisenberg isotrópico, onde todas as interações de troca são idênticas para as três componentes de spin. Entretanto podemos considerar modelos em que anisotropias destroem a simetria global de rotação no modelo, como o modelo de Heisenberg  $XXZ$  unidimensional de hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{J_{xy}}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + J_z S_i^z S_{i+1}^z \right] \quad (2.17)$$

onde teremos a soma em  $i$  é referente a uma cadeia unidimensional com  $N$  spins. Note que agora temos duas interações de troca, a primeira relacionada as componentes de spins  $S^x$  e  $S^y$  escritas em função dos operadores  $S^+$  e  $S^-$  dada por  $J_{xy}$  e a segunda referente a interação entre as componentes  $S^z$  dada por  $J_z$ . Nesse caso teremos um diagrama de fases interessante representado pela figura [?] este computado a temperatura e campo magnético nulos. Vamos analisar o diagrama de fases do modelo utilizando a notação  $J_z/J_{xy} = \Delta$ . Vemos que um ordenamento ferromagnético se estabelece no modelo para  $\Delta < -1.0$  de modo que as interações ferromagnéticas entre as componentes  $S^z$  suprimem as flutuações quânticas e um ordenamento se estabelece. Para  $-1 < \Delta < 1$  teremos um regime de líquido de spins de Tomonaga-Luttinger [49], este no qual as flutuações quânticas impostas pelos termos  $S^+$  e  $S^-$  são dominantes e o sistema não apresenta ordenamento de longo alcance algum. De fato esse regime apresenta excitações não massivas e é efetivamente caracterizado mapeando o problema em uma teoria de campos efetiva de baixas energias a partir de técnicas de bosonização [50, 75]. Outra característica interessante é o crescimento contínuo da magnetização ao passo que aumentamos um campo magnético externo que acopla com os spins via interação de Zeeman, propriedades esta reflexo direto das excitações não massivas característica. Para  $\Delta > 1$  teremos uma fase antiferromagnética ordenada diferente da fase de clássica de Néel já mencionada anteriormente, com magnetização de subrede  $m^s$  dada pela equação (2.14) finita. Um ponto no diagrama de fases de extrema relevância é o caso  $\Delta = 1.0$  onde recuperamos a simetria  $SU(2)$  dada as interações isotrópicas. Partindo de resultados a partir do *ansatz* de Bethe e previsões de teoria de campos [77] algumas propriedades importantes do modelo no ponto isotrópico

podem ser obtidas, como por exemplo a função de correlação [77]

$$\langle \psi_0 | \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_0 | \psi_0 \rangle \propto (-1)^n \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{\ln(n)}^{3/2}}{n} \quad (2.18)$$

o que caracteriza, partindo da forma de Ornstein-Zernike [78], a função de correlação de uma fase crítica, neste caso incluso a correção logarítmica. A susceptibilidade magnética neste ponto também apresenta uma correção logarítmica com um comportamento singular com  $T \rightarrow 0$  dado por

$$\chi(T) = \frac{1}{\pi^2 J} \left( 1 + \frac{1}{2 \ln(T_0/T)} + \dots \right) \quad (2.19)$$

tal comportamento singular foi observado nos materiais  $Sr_2CuO_3$  e  $SrCuO_2$  [77]. Por fim, quando cruzamos o ponto isotrópico  $\Delta = 1$  no diagrama de fases 2.3 do modelo de Heisenberg anisotrópico teremos uma transição de fases quântica (temperatura zero) entre o regime de líquido de spins e a fase antiferromagnética onde abre um gap no espectro de energias do modelo. Tal transição pertence a classe de universalidade de Kosterlitz-Thouless [79, 80] com o comprimento de correção  $\xi$  divergindo exponencialmente

$$\xi \propto e^{\pi/\sqrt{\Delta-1}} \quad (2.20)$$

com  $\Delta$  o gap de Néel típico em fases antiferromagnéticas com ordenamento de longo alcance. É possível também identificar divergências nos fatores de estrutura transversais e longitudinais, quantidade física importante pois é de fácil acesso experimental [77]. Dessa forma o estado fundamental do modelo de Heisenberg isotrópico de spin  $s = \frac{1}{2}$  é crítico, logo não apresenta ordem magnética de longo alcance. Além disso o espectro de excitações do modelo nesse regime é não massivo, ou seja com gap energético nulo, o que implica um espectro contínuo de energias no limite termodinâmico [65].

A natureza do estado fundamental para o modelo de Heisenberg para spins semi-inteiros era uma questão aberta na comunidade científica uma vez que o importante teorema de Lieb-Schultz-Mattis [81] só é demonstrável para spins semi-inteiros. Foram os trabalhos pioneiros de Haldane [19, 20] que demonstram que na verdade o estado fundamental do modelo de Heisenberg isotrópico de spin  $S = 1$  teria uma natureza completamente distinta do caso  $s = \frac{1}{2}$ . Em seu trabalho o autor métodos de teoria de campos para mapear o modelo na rede em um modelo contínuo *sigma* não linear, onde ele prevê que o estado fundamental apresenta um gap energético finito no limite termodinâmico e estado fundamental desordenado. O gap de energia neste caso é proporcional a interação de troca  $J$  com  $\Delta E \propto 0.41J$  [82] que pode ser verificado em uma curva de magnetização do modelo em função do campo magnético. Vamos denominar esse novo regime quântico, estado fundamental do modelo de Heisenberg isotrópico para  $S = 1$ , de fase de Haldane em que o seu regime desordenado pode ser compreendido a partir da construção de fases *valence-bond-solid*, como o exemplo do modelo de Affleck-Lieb-Kennedy-Tasaki. Além

Figura 2.3: Diagrama de fases do modelo de Heisenberg anisotrópico XXZ a temperatura e campos magnéticos externos nulos.

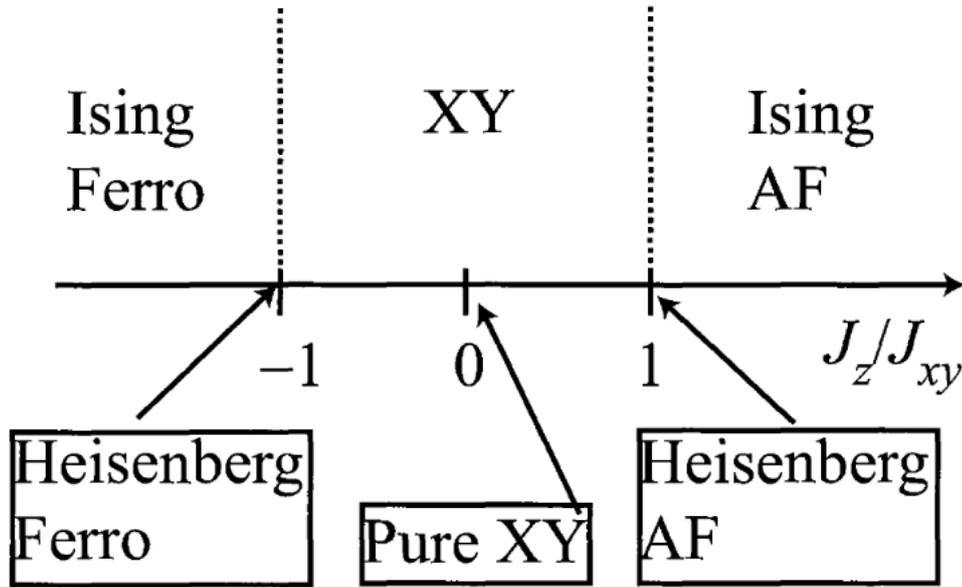
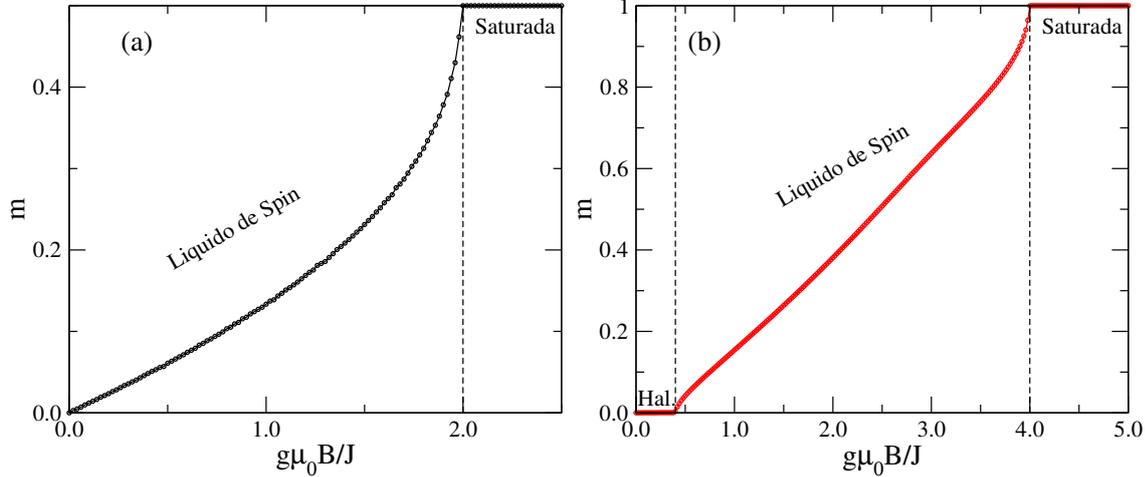


Figura 2.4: Fonte : Giamarchi, (2003) [49]

disso a fase de Haldane foi demonstrada verdadeira em trabalhos experimentais em compostos como  $CsNiCl_3$  [83] e  $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2ClO_4$  [84]. Para verificarmos a diferença entre as curvas de magnetização em função do campo magnético para o modelo de Heisenberg de spin  $s = \frac{1}{2}$  e  $S = 1$  construímos e figura 2.5 utilizando o método numérico *Density Matrix Renormalization Group* para uma cadeia de  $N = 100$  spins. Mais detalhes deste método serão discutidos no capítulo quatro. Temos então na figura 2.5 as curvas de magnetização reduzida em função do campo magnético para os modelos de Heisenberg isotrópico de spin  $s = \frac{1}{2}$  em (a) e  $S = 1$  em (b). Temos em (a) uma típica curva de magnetização em função do campo magnético, iniciando a campo nulo no regime de líquido de spins de Tomonaga-Luttinger onde a magnetização reduzida  $m$  do modelo cresce continuamente com o aumento do campo magnético até a fase saturada para campos  $g\mu_0 B/J \approx 2.0$ . Vemos em (b) um platô de magnetização na fase de Haldane que permanece até um valor campo magnético crítico  $B_c \approx \Delta E$ , transitando para o regime de líquido de spin que novamente cresce continuamente com o aumento do campo magnético até a fase saturada para campos  $g\mu_0 B/J \approx 4.0$ .

Figura 2.5: Curvas de magnetização reduzida para cadeias de spins antiferromagnéticas unidimensionais para  $J = 1.0$ . Em (a) temos o caso de spin semi-inteiro  $s = \frac{1}{2}$  onde o espectro de excitação magnética é não massivo, levando à uma variação da magnetização contínua em função do aumento do campo magnético externo. Em (b) temos o caso para spin inteiro  $S = 1$ , onde vemos um platô de magnetização nulo referente à fase de Haldane(Hal) e gap energético  $\Delta_E \approx 0.4176$ . Essas curvas foram obtidas a partir do método de *density matrix renormalization group*, este que será abordado no capítulo seguinte.



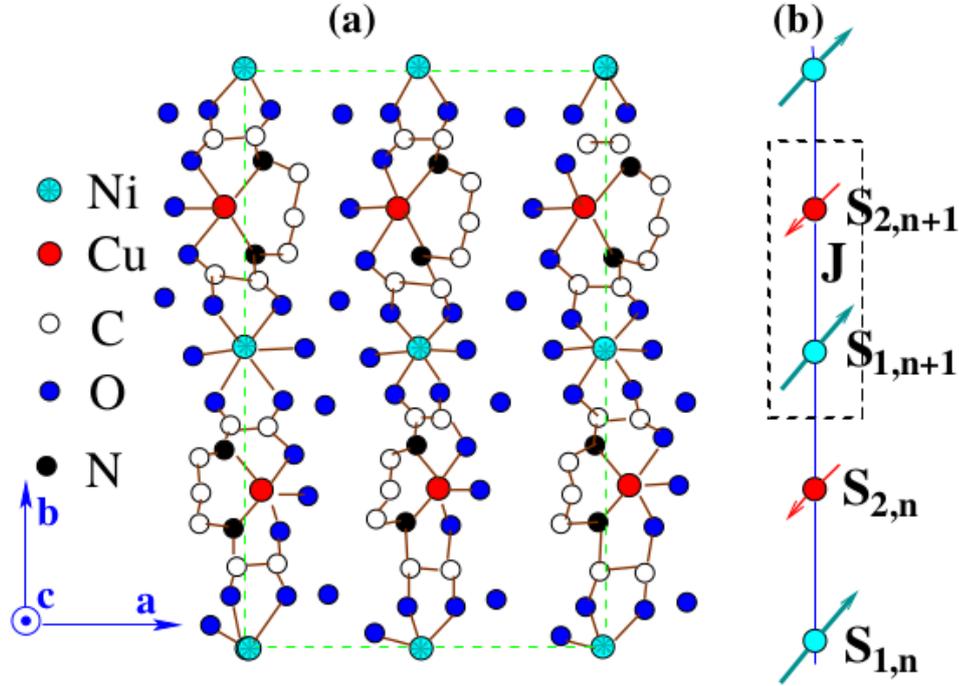
Fonte : Autor, (2023)

### 2.1.2 Ferrimagnetismo

Até o momento lidamos com cadeias antiferromagnéticas onde os spins  $s$  das subredes que compõe a estrutura cristalino do modelo são de mesma magnitude. Porém na natureza existem diversos compostos magnéticos que suas interações podem ser mapeadas em cadeias antiferromagnéticas de estrutura bipartida, onde a célula unitária é composta por dois ou mais spins ( $s, S$ ) de magnitudes diferentes e apresenta magnetização de subrede finita abaixo da temperatura crítica  $T_c$ . O ferrimagnetismo é tipo de ordenamento magnético que descreve materiais com este tipo de estrutura, sendo a grande maioria dos materiais magnéticos reais [85]. Citamos o composto magnético molecular bimetálico  $NiCu(pba)(H_2O)_3 \cdot 2H_2O$  [86] que contém dois íons metálicos por célula unitária distribuídos alternadamente ao longo da rede, ferrimagnetos inorgânicos e orgânicos de estruturas de célula unitária  $AB_2$  e  $ABC$  respectivamente [87] e compostos mais complexos como o polímero coordenado heterotrimetálico  $[Cu^{III}Mn^{III}(L^1)][Fe^{III}(bpb)(CN)_2] \cdot ClO_4 \cdot H_2O$  [88], e o composto da família do germanato  $Cu_2Fe_2Ge_4O_{13}$  [89–91] que apresenta uma estrutura de cadeias de dímeros dos íons  $Cu^{2+}$  e  $Fe^{3+}$  acopladas, dentre muitos outros<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Mais detalhes de aspectos teóricos e experimentais dos primeiros estudos sobre o ordenamento ferrimagnético pode ser encontrado em [85, 86]

Figura 2.6: Em (a) temos a estrutura de composto bimetálico *quasi-unidimensional*  $NiCu(pba)(H_2O)_3 \cdot 2H_2O$  de spins alternados  $S_{Ni} = 1$  e  $S_{Cu} = \frac{1}{2}$  ao longo do eixo. Em (b) temos o mapeamento em uma cadeia unidimensional antiferromagnética descrevendo o composto [86].



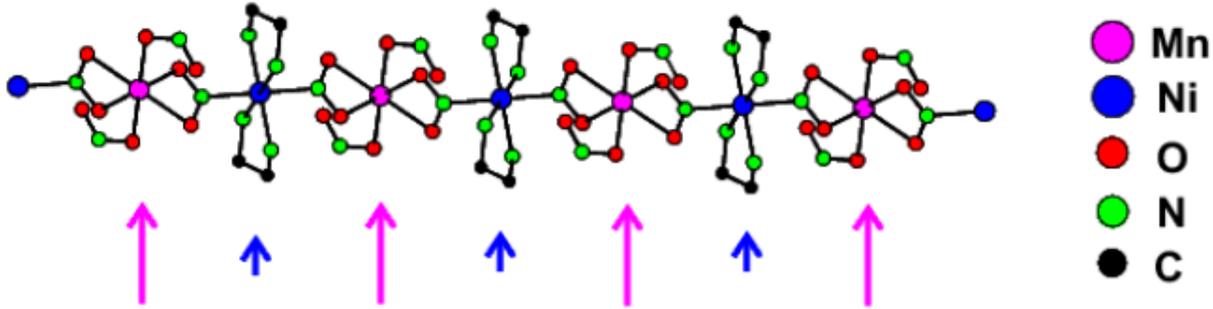
Fonte : Ivanov, (2009) [86]

Um modelo geral para estudar o fenômeno ferrimagnético é considerar as interações entre spins distintos a partir do hamiltoniano de Heisenberg :

$$\mathcal{H} = J \sum_i^{N_c} (S_{1,n} + S_{1,n+1}) \cdot S_{2,n} - \mu_B B \sum_{n=1}^{N_c} (g_1 S_{1,n}^Z + g_2 S_{2,n}^Z) \quad (2.21)$$

onde somamos sob todas as  $N_c$  células unitárias que compõem a cadeia ferrimagnética com spins  $S_{1,n}$  e  $S_{2,n}$  caracterizados pelos números quânticos  $S_1, S_2 (S_1 > S_2)$ . Temos ainda o termo de Zeeman os fatores giromagnéticos  $g_i$  referentes a cada um dos spins separadamente,  $\mu_B$  o magneton de Bohr e campo magnético  $B$  na direção Z. O estado fundamental do modelo acima depende fundamentalmente da forma em que se dão as interações dos spins  $S_1 - S_2$  são consideradas, com efeitos de anisotropias afetando fortemente o estado fundamental do modelo [94–97]. Além disso é possível investigar as propriedades do estado fundamental de cadeias ferrimagnéticas utilizando métodos de ondas de spins adequados [87, 98–100], ainda implementar uma teoria de ondas de spins modificada [101] que impõe uma correção no número de bósons excitados a temperatura finita e permite estudo de propriedades termodinâmicas em cadeias ferrimagnéticas em baixas temperaturas.

Figura 2.7: Estrutura de um segmento do composto  $MnNi(NO_2)_4(en)_2$  mostrando uma cadeia regularmente alternada de íons  $Mn$  e  $Ni$  de spins  $S = \frac{5}{2}$  e  $s = 1$  respectivamente [92]. Mais detalhes da estrutura do composto e propriedades magnéticas e termodinâmicas podem ser obtidas em [93].



Fonte : R. Feyerherm et al, (2001) [93]

## Estado Fundamental

Considere uma cadeia ferrimagnética isotrópica de estrutura bipartida e interações descritas pelo hamiltoniano de Heisenberg. O estado fundamental desse modelo é bem definido a partir do teorema de Lieb-Mattis [102], onde o estado de spin do modelo é definido maximizando o spin total  $S_T = |S_1 - S_2|N_c$  [60, 65], apresentando um ordenamento antiferromagnético de longo alcance. Assim, o ordenamento ferrimagnético segue uma regra de quantização onde a magnetização por célula unitária tem valores inteiros ou semi-inteiros a depender da composição e topologia da célula unitária. Lieb, Schultz e Mattis [81] propuseram um outro teorema importante que demonstra que cadeias de spins  $s$  fracionário com condições periódicas de contorno apresentam excitações não massivas, com um espectro de excitações proporcionais a  $O(\frac{1}{L})$ , logo contínuo no limite termodinâmico, ocorrendo excitações massivas (gap energético) apenas com a ocorrência de quebra espontânea de simetria de translação. Esse teorema falha para o caso de spins  $S$  inteiro e foi melhor compreendido com os trabalhos de Haldane [19] e Affleck [82], com a demonstração de que a fase de Haldane não apresenta quebra espontânea de simetria de translação, apesar da presença do gap de Haldane. O teorema de Lieb-Shultz-Mattis foi estendido para uma cadeia de spin arbitrário  $S$  e considerando um campo magnético finito por Oshikawa, Yamanaka e Affleck [103] onde, usando técnicas avançadas de bosonização abeliana, mostrou que ocorre um fenômeno de quantização fracionária da magnetização em função do campo magnético, semelhante ao efeito Hall quântico, levando a excitações com gap de energia e formação de platôs de magnetização sem a quebra espontânea da simetria de translação para a seguinte condição:

$$n|S - m| = \text{inteiro} \quad (2.22)$$

onde  $n$  é o número de sítios da célula unitária,  $S$  o valor máximo do operador de spin e  $m$  a magnetização topologicamente quantizada [103]. Os platôs de magnetização ocorrerão para os valores de magnetização  $m$  que obedecem a relação 2.22. Para uma cadeia ferrimagnética de topologia arbitrária, a condição 2.22 pode ser escrita como  $M_S - m = \text{inteiro}$ ,

com  $M_S$  a magnetização de saturação da célula unitária. A relação (2.22) nos permite identificar fases de platô de magnetização em diversos modelos de spins de interesse teórico e experimental uma vez que são fases com gap energético robustas a perturbações externas como campo magnéticos e são possíveis de serem realizadas a temperatura finita [97].

## 2.2 Fenômenos de Haldane no modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg talvez seja o mais estudado no âmbito de teoria quântica de muitos corpos, seja por aproximações de ondas de spins, métodos de bosonização ou métodos analíticos que resolvam exatamente o modelo. Por exemplo, o modelo de Heisenberg isotrópico antiferromagnético apresenta a tão celebrada solução de Bethe [64] para o caso de spins  $s = \frac{1}{2}$  onde é possível demonstrar algumas propriedades gerais do estado fundamental obtido exatamente  $|\psi_0\rangle$  e sobre os seus primeiros estados excitados. Temos primeiro que o estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  é único no limite termodinâmico e também para uma cadeia com  $N$  spins além de não apresentar ordenamento magnético de longo alcance. Não há quebra espontânea de simetria do grupo  $SO(3)$  em um grupo discreto  $Z_2$ , de modo que o ordenamento de Néel não se estabelece. Isso ocorre mesmo em temperatura zero, onde o teorema de Mermin-Wagner [76] não se estabelece, por causa das flutuações quânticas induzidas pelos termos de interação  $S^+$  e  $S^-$ . Segundo, o espectro de energia é contínuo no limite termodinâmico, enquanto para cadeias finitas temos que as energias dos estados excitados escalam com  $O(\frac{1}{N})$  com  $N$  o número de spins. Por fim a função de correlação do modelo decai lentamente seguindo uma lei de potência da seguinte forma :

$$\langle \psi_0 | S_i \cdot S_j | \psi_0 \rangle \propto \frac{(-1)^{i-j}}{|i-j|} \quad (2.23)$$

essas propriedades estão de acordo a descrição de teoria de campos efetiva para partículas não massivas [18] e do ponto de vista de teoria de transições de fase as funções de correlação que obedecem lei de potência descrevem um estado fundamental crítico [14] tal qual o modelo de Ising clássico em duas dimensões sob temperatura crítica  $T_c$ . Isso é interessante pois estamos tratando de um modelo quântico de spin sob temperatura zero que apresenta uma grandes flutuações quânticas que impedem o sistemas de apresentar ordenamento de longo alcance. Toda essa interessante física era curiosamente explorada bastante para o modelo de spins  $s = \frac{1}{2}$  de modo que a comunidade científica acreditava que a física dos modelos de spins independiam do spin  $S$  considerado. Entretanto, vimos anteriormente que as curvas de magnetização 2.5 para os modelos de Heisenberg de spins  $s = \frac{1}{2}$  e  $S = 1.0$  apresentam um comportamento distinto, sobretudo a evidente existência de um gap de energia para o modelo de spin inteiro. Isso é consequência direta da natureza distinta do ordenamento e excitações do modelo de spin inteiro inicialmente pelos trabalhos de Haldane [19, 20] e Affleck [82] que abriram o caminho para o entendimento do que são fases topológicas em modelos de spins e suas propriedades.

### 2.2.1 A conjectura de Haldane para o modelo de Heisenberg

Em 1983 dois trabalhos publicados por Haldane [19, 20] mostraram que as propriedades de cadeias de spins antiferromagnéticas de spins inteiros e semi-inteiros teriam propriedades fundamentais diferentes. Utilizando de uma teoria de campos efetiva de baixas energias Haldane apontou o que hoje é conhecida como suas famosas conjecturas; essencialmente modelos de spins descritos pelo hamiltoniano de Heisenberg no ponto isotrópico ( $J = 1$ ) considerando spins  $S$  semi-inteiros ( $S = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots$ ) apresentam uma física similar ao que já foi discutido anteriormente para o caso  $S = \frac{1}{2}$ , onde o estado fundamental é crítico (não-massivo), espectro de energias contínuo no limite termodinâmico e decaimento da função correlação com lei de potência. Considere agora o mesmo modelo no ponto isotrópico ( $J = 1$ ) dado pelo hamiltoniano de Heisenberg de spins  $S$  inteiros ( $S = 1, 2, 3, \dots$ ) teremos propriedades drasticamente diferentes :

- ( $i_b$ ) O estado fundamental do modelo é único e desordenado (massivo)
- ( $ii_b$ ) Existe um gap energético finito entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado mesmo no limite termodinâmico
- ( $iii_b$ ) A função de correlação decai exponencialmente

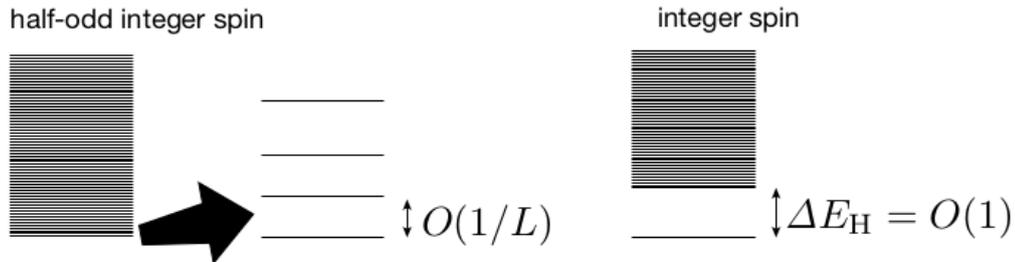
temos na conjectura ( $i_b$ ) novamente um estado fundamental único porém diferente do caso anterior temos uma fase desordenada que apresenta excitações massivas. Tal fase é denominada fase de Haldane, onde o desordenado aqui tem um sentido interessante pois como é de se esperar um estado desordenado não apresenta um ordenamento de spins de longo alcance e magnetização total zero. Entretanto vamos ver mais em frente que a fase de Haldane na verdade apresenta um ordenamento não usual que não pode ser capturado por nenhum parâmetro de ordem local. Veremos mais a frente que existe um ordenamento "oculto" dos spins nesse modelo capturado por parâmetros de ordens não locais do tipo *string* [104, 105]. A conjectura ( $ii_b$ ) expõe explicitamente a diferença das excitações elementares entre os dois modelos onde mesmo no limite termodinâmico temos um gap energético que se mantém finito. A descrição de teoria de campos para esse modelo feita por Haldane traz o modelo no limite contínuo onde este pode ser mapeado num modelo  $\sigma$  não linear [19, 20] de partículas massivas com funções de correlação com decaimento exponencial ( $iii_b$ ) [18, 65],

$$\langle \psi_0 | S_i \cdot S_j | \psi_0 \rangle \propto \frac{(-1)^{i-j}}{|i-j|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{|i-j|}{\xi}\right) \quad (2.24)$$

onde função de correlação tem a forma típica de Ornstein-Zernike [78] com  $\xi$  é o comprimento de correlação típico com  $\xi \ll |i-j| \ll N$  e  $N$  o tamanho da cadeia. A correção do tipo  $|i-j|^{\frac{1}{2}}$  é usualmente encontrada em modelos quânticos desordenados em uma dimensão ou em seus análogos clássicos em duas dimensões [18]. Novamente podemos fazer comparações com o modelo Ising 2d, onde temos acima da temperatura crítica uma fase desordenada devido a flutuações geradas pela temperatura com uma função de correção de decaimento exponencial. Na fase de Haldane temos a mesma fenomenologia,

porém a temperatura zero o que sugere que as flutuações quânticas no modelo de Heisenberg de spin inteiro são superiores ao caso semi-inteiro. Esse também é um ponto que leva a aproximação de Hosten-Primakoff não ser efetiva para modelos de spins inteiros, uma vez que estado é desordenado ao ponto que flutuações em torno da orientações de Néel não serem a descrição adequada para essa fase [65].

Figura 2.8: Representação do espectro de energias do modelo de Heisenberg isotrópico para o caso de spin semi-inteiro e inteiro [18]. Vemos claramente o gap energético entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado para o caso inteiro.



Fonte: Hal Tasaki, (2020) [18]

A fase de Haldane não pode ser caracterizada por nenhum parâmetro de ordem local pois não apresenta ordenamento magnético espontâneo. Além disso o teorema de Lieb-Schultz-Mattis [81] não se aplica ao modelo de spin inteiro, de modo que não podemos inferir se o a fase de Haldane apresenta alguma quebra espontânea de simetria, de modo que a sua caracterização para além da existência do gap energético e da forma de função de correlação era uma questão aberta a época. Hoje em dia é demonstrado na verdade que a fase de Haldane faz parte de uma classe abrangente de novos ordenamentos quânticos da matéria não usuais denominado fases topológicas [12, 106].

### 2.2.2 O modelo de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki

Em seus trabalhos sobre o modelo de spin-1 Haldane trouxe luz as diferenças fundamentais na física de sistemas quânticos de spins inteiros e semi-inteiros. Entretanto, o seu trabalho foi baseado em um modelo efetivo de teoria de campos uma vez que o modelo de spin inteiro não apresenta solução exata, diferente de sua contra-parte semi-inteira [64]. Dessa forma apesar de bem estabelecidas as conjecturas de Haldane, faltava ainda um modelo exatamente solúvel que comportasse as mesmas. Em 1987 Affleck, Liebe, Kennedy e Tasaki [105] propuseram um modelo exatamente solúvel que apresenta as mesmas propriedades do modelo estudado por Haldane [?, 19] de modo a confirmar a sua conjectura. O modelo considera uma cadeia de spin-1 de Heisenberg com interações de *exchange* e *bi-exchange* descritos pelo hamiltoniano,

$$\mathcal{H}_{AKLT} = \sum_{i=1}^N \left[ S_i \cdot S_{i+1} + \frac{1}{3} (S_i \cdot S_{i+1})^2 \right] \quad (2.25)$$

onde é possível demonstrar que o modelo AKLT apresenta um gap energético  $\Delta E$  positivo, finito e independente do tamanho da cadeia e função de correlação com decaimento

exponencial [82, 105]. O estado fundamental  $|\Phi_{VBS}\rangle$  do modelo AKLT pode ser construído exatamente a partir da descrição *valence-bond solid*(VBS) que vamos brevemente demonstrar o procedimento. Primeiro, observamos que podemos reescrever efetivamente um spin-1 como um par de spins- $\frac{1}{2}$  onde vamos denotar esses spins como  $L$  e  $R$ . O espaço de Hilbert associado a esse par de spins tem dimensão quatro referente a todos os estados possíveis na base  $\sigma_L, \sigma_R = \{\uparrow, \downarrow\}$ . Dessa forma podemos construir os três estados possíveis com momento angular total de spin  $S = 1$ (triplete) e um estado de momento  $S = 0$ (singleto) aplicando o operador de simetrização  $\mathcal{J}$  a uma dada configuração dos pares  $\sigma_L, \sigma_R$  da seguinte maneira :

$$\begin{aligned}\mathcal{J}(|\psi_L^\uparrow\rangle |\psi_R^\uparrow\rangle) &= |\psi^+\rangle \\ \mathcal{J}(|\psi_L^\uparrow\rangle |\psi_R^\downarrow\rangle) &= \mathcal{J}(|\psi_L^\downarrow\rangle |\psi_R^\uparrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} |\psi^0\rangle \\ \mathcal{J}(|\psi_L^\downarrow\rangle |\psi_R^\downarrow\rangle) &= |\psi^-\rangle\end{aligned}$$

dessa forma podemos então descrever efetivamente cada spin-1 do modelo de interesse como pares de spins- $\frac{1}{2}$ . Para construirmos a mesma representação para uma cadeia de spin com  $N$  sítios de  $x = 1, \dots, N$  temos que considerar uma representação em pares de spins  $s = \frac{1}{2}$  uma cadeia de  $2N$  spins onde em cada sítio do em  $x$  teremos um par  $(x, L)$  e  $(x, R)$  onde podemos definir um estado  $|\Phi_{pre}\rangle$  dado por

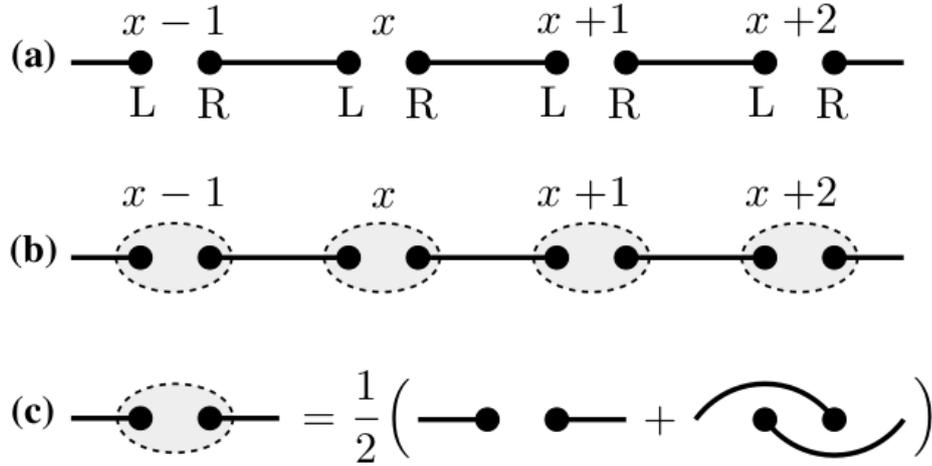
$$|\Phi_{pre}\rangle = \bigotimes_{x=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\psi_{x,R}^\uparrow\rangle |\psi_{x+1,L}^\downarrow\rangle - |\psi_{x,R}^\downarrow\rangle |\psi_{x+1,L}^\uparrow\rangle \right\} \quad (2.26)$$

o estado acima somente representa um produto tensor de pares singletos formados pelos spins  $s = \frac{1}{2}$  onde o operador de simetrização não foi ainda aplicado. Para construirmos uma representação correta da cadeia de spin  $S = 1$  aplicamos  $\mathcal{J}$  em cada sítio da seguinte forma

$$|\Phi_{VBS}\rangle = \left( \bigotimes_{x=1}^L \mathcal{J}_x \right) |\Phi_{pre}\rangle \quad (2.27)$$

onde obtemos acima a forma explícita do estado fundamental não normalizado. Perceba que apesar da função de onda pré-simetrização  $|\Phi_{pre}\rangle$  ser escrita como um simples produto tensor entre os singletos, o processo de simetrização induz correlações de curto alcance entre os spins vizinhos. A figura 2.9 demonstra como é feita essa construção onde cada círculo preto representa um spin  $s = \frac{1}{2}$  e as linhas conectando os círculos representa a formação dos pares singletos entre os spins  $L$  e  $R$  dos sítios  $x - 1, x, x + 1$ . A aplicação do operador de simetrização dada pela equação 2.27 é dada em (b) onde cada elipse azul circundando os pares  $L$  e  $R$  constroi corretamente a representação do spin  $S = 1$  correto do modelo em questão. Ainda na figura acima em (c) vemos como as correlações de curto alcance são induzidas pela construção do estado fundamental *VBS*.

Figura 2.9: Temos uma representação da construção do estado VBS para o modelo AKLT. Em (a) a representação dos pares de spins  $L$  e  $R$  para cada sítio em  $x = 1, \dots, N$  e formação do estado de produto singlete  $|\Phi_{pre}\rangle$ . Em (b) a aplicação dos operadores de simetrização  $\mathcal{J}$  em cada sítio. Em (c) o estado simetrizado que compõe o estado exato  $|\Phi_{VBS}\rangle$ .



Fonte: Hal Tasaki, (2020) [18]

O modelo AKLT tem fundamental importância pois muitas propriedades de fases topológicas são observadas nesse modelo. Para além das propriedades trazidas pela conjectura de Haldane, apesar de o estado fundamental no modelo não apresenta magnetização espontânea ( $S_{total}^z |\Phi_{VBS}\rangle = 0$ ) existe um ordenamento magnético oculto no modelo AKLT em sua construção VBS do estado fundamental. Não somente no modelo AKLT existe essa propriedade intrigante, mas na verdade em um modelo que generaliza o hamiltoniano do modelo AKLT e que inclui a fase de Haldane em seu diagrama de fases que inclui as interações bi-lineares e bi-quadráticas  $\mathcal{H}_{BLBQ}$  dado por

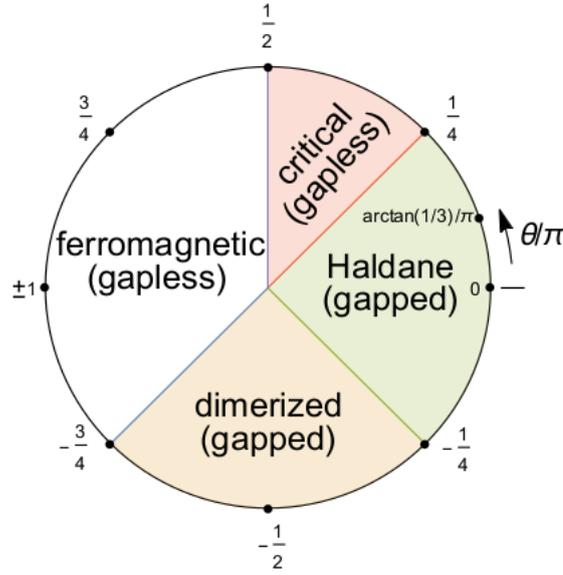
$$\mathcal{H}_{BLBQ} = \sum_{x=1}^L \{ \cos \theta (S_i \cdot S_{i+1}) + \sin \theta (S_i \cdot S_{i+1})^2 \} \quad (2.28)$$

o modelo apresenta um diagrama de fases quânticas rico que comporta a fase de Haldane, fase ferromagnética, uma fase crítica ou regime de líquidos de spins de Tomonaga-Luttinger e uma fase dimerizada com vemos na figura 2.12. Interessante notar aqui que o modelo AKLT na verdade é um ponto no regime da fase de Haldane onde no ponto  $\theta = \arctan(\frac{1}{3\pi})$  onde o modelo é exatamente solúvel.

### 2.2.3 Caracterização da fase de Haldane

Como vimos a fase de Haldane não se caracteriza por nenhum ordenamento magnético espontâneo de modo que o estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  pertence ao setor de magnetização  $S_{total}^z = 0$ , o que implica necessariamente  $\langle S^\alpha \rangle = 0, \forall \alpha = x, y, z$ . Entretanto foi demonstrado [104] que a fase de Haldane na verdade apresenta um ordenamento magnético oculto que pode ser caracterizado pelo parâmetro de ordem não local de *string*  $\mathcal{O}_S^\alpha$  definido por [104, 108],

Figura 2.10: Diagrama de fases do modelo de spin  $S = 1$  onde interações bi-lineares e bi-quadráticas são consideradas.



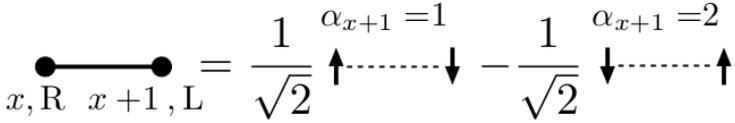
Fonte : Mykhailo V Rakov, (2017) [107]

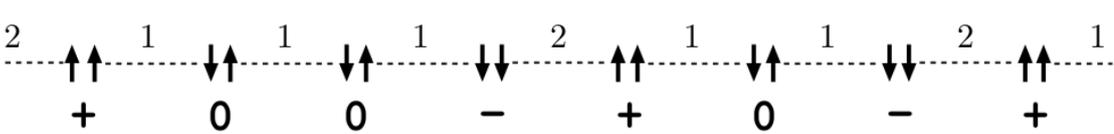
$$\mathcal{O}_n^\alpha = - \left\langle S_0^\alpha \exp \left[ i\pi \sum_{l=1}^{n-1} S_l^\alpha \right] S_n^\alpha \right\rangle \quad (2.29)$$

com  $\alpha = x, y, z$ . Podemos entender a quantidade acima se pensarmos na representação da função de onda VBS; Ao simetrizarmos os pares de spins efetivos  $s = \frac{1}{2}$  podemos ter pares de spins vizinhos com a mesma orientação ou orientações opostas, o que levaria a uma representação efetiva de uma dada configuração de spin para uma cadeia de spin  $S = 1$ . Dessa forma seja uma dada configuração de spins  $\langle \sigma \rangle = \{ \dots + 00 - + 0 - + \dots \}$  tal configuração é representada na figura 2.11, vemos que com excessão dos estados  $|0\rangle$  teremos um ordenamento de Néel perfeito ao longo da cadeia. É possível ser demonstrado na verdade [82] que em uma cadeia de spin  $S = 1$  teremos no limite termodinâmico um ordenamento magnético interessante com uma distribuição arbitrária de estados  $|0\rangle$  no entanto também teremos estado  $|+\rangle$  e  $|-\rangle$  distribuídos na cadeia de modo que, retirando os estados de spin efetivo  $S^z = 0$  teremos um ordenamento de Néel perfeito. Em outras palavras, para cada estado  $|0\rangle_i$  teremos necessariamente um outro estado  $|-\rangle_k$  com  $k > 0$  e um número arbitrário de estados  $|0\rangle$  entre os sítios  $i$  e o sítio  $k$ .

A fase de Haldane então pode ser identificada por ter um valor finito do parâmetro de ordem  $\mathcal{O}_n^x = \mathcal{O}_n^y = \mathcal{O}_n^z = \frac{1}{3}$  no ponto isotrópico do hamiltoniano de Heisenberg ( $J = 1.0$ ) enquanto a fase AKLT tem também um valor específico para o operador *string*  $\mathcal{O}_n^x = \mathcal{O}_n^y = \mathcal{O}_n^z = \frac{4}{9}$ . É possível então a partir de medidas do operador de *string* estimar por exemplo pontos críticos que separem duas fases quânticas distintas. Podemos citar por exemplo no diagrama de fases do modelo de spin-1 com interações bi-lineares e bi-quadráticas 2.28 que as quatro fases apresentam valores distintos do operador *string*, cito o regime de líquido de spins de Tomonaga-Luttinger (crítica)  $\mathcal{O}_n^\alpha = 0.0$  para todas as componentes  $\alpha = x, y, z$ , a fase dimerizada teremos  $\mathcal{O}_n^z > 0$  enquanto  $\mathcal{O}_n^x = \mathcal{O}_n^y = 0$  e por fim a fase ferromagnética

Figura 2.11: Representação do ordenamento oculto na representação de estados VBS. Em (a) é numerado os estados do tipo "up/down" e "down/up" em (1) e (2) para ajudar na visualização. Em (b) temos efetivamente o ordenamento efetivo numa cadeia de spin-1 como um exemplo, onde vemos que na ausência dos estados  $|0\rangle$  temos efetivamente um ordenamento de Néel perfeito.

(a) 

(b) 

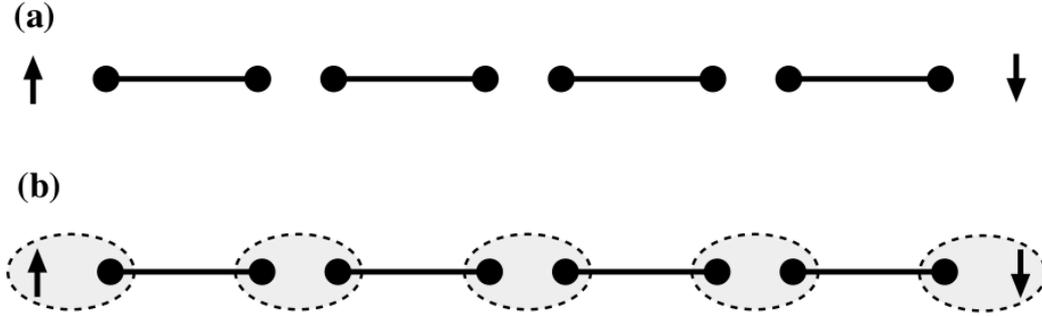
Fonte: Hal Tasaki, (2020) [18]

com  $\mathcal{O}_n^z = 1$  e nula para as outras componentes  $\alpha = x, y$ . É interessante que esse comportamento do operador *string* o classificaria como um parâmetro de ordem [14, 78] para o estudo de transições de fases de topológicas. Entretanto  $\mathcal{O}_n^\alpha$  é não-local além de ser uma medida indireta de um ordenamento oculto no sistema magnético de interesse pois também é finito para a fase dimerizada e a fase ferromagnética como já vimos.

Outra característica fundamental da fase de Haldane que a distingue de outras fases magnéticas que já vimos. Novamente vamos utilizar da construção VBS para o estado fundamental para entender a formação de estados de borda, característica fundamental em fases topológicas da matéria [10, 106, 109–111]. Seja a representação VBS que vimos anteriormente onde teremos o grau de liberdade de spin  $S = 1$  a partir de dois spins efetivos  $s = \frac{1}{2}$  e recuperamos o estado a partir da aplicação do operador de simmetrização. É possível então construir a partir da mesma estratégia um estado  $|\phi\rangle_{edge}$  onde teremos spins efetivos  $s = \frac{1}{2}$  no início e fim da cadeia, dando origem a uma fase quântica completamente distinta do que vimos anteriormente que faz parte de uma grande classe de fases topológicas não trivial. Essa propriedade de fracionalização dos graus de liberdade é verificada em varias outras fases isolantes não interagentes onde diversas propriedades podem ser estimadas analiticamente como os modelos SSH [7], supercondutores topológicos [8], o tão aclamado modelo de Kitaev [4] com excitações de borda quasi-partículas elementares denominadas férmions de Majorana [106].

Apesar desses estados de borda surgirem no modelo quântico de spins interagentes de uma construção VBS puramente teórica para o modelo de spin  $S = 1$ , tais estados de borda foram detectados experimentalmente já em 1990 [112] onde o grupo detectou no composto  $Ni(C_2H_8N_2)_2-NO_2(ClO_4)$  modos de excitação efetivos nas bordas do material a partir de medidas de ressonância eletrônica de spin. Dessa forma a fase de Haldane é caracterizada por apresentar um ordenamento magnético oculto revelado por medidas do operador não local de string  $\mathcal{O}_n^z$  juntamente com o surgimento de modos de spins efetivos  $s = \frac{1}{2}$  na borda do cadeia de spin. Note que esses modos de borda só surgem quando estudamos o modelo em condições abertas de contorno, onde efetivamente o sistema apresenta degenerescência  $g = 4$  no limite termodinâmico pois é possível demonstrar [113] que os spins da borda

Figura 2.12: Representação em VBS da formação dos modos de borda em uma fase topológica não trivial. Em (a) o estado pre-VBS é representado antes de aplicarmos o operador de simetrização  $\mathcal{J}$  em (b) o estado final VBS após a operação de simetrização, onde a fracionalização dos graus de liberdade é explicitada com a formação e spins efetivos  $s = \frac{1}{2}$  para o caso de cadeias de spin  $S = 1$  [18].



Fonte: Hal Tasaki, (2020) [18]

interagem a partir do hamiltoniano efetivo

$$\mathcal{H}_{eff} = \exp\left(\frac{-\xi}{N}\right) S_L \cdot S_R$$

com  $\xi$  o comprimento de correlação e  $N$  o tamanho da cadeia. Dessa forma longe do ponto crítico onde o comprimento de correlação é finito, no limite termodinâmico os spins da esquerda  $S_L$  e da direita  $S_R$  são efetivamente desacoplados, de modo que os 4 estados possíveis para o par  $(S_L, S_R)$  não contribuem para a energia total do estado fundamental do Hamiltoniano do sistema justificando a degenerescência. Para casos de spins inteiros  $S > 1$  é possível também demonstrar que o grau de degenerescência  $g$  da cadeia no modelo AKLT é dado por  $g = (S + 1)^2$  onde  $S$  é o spin do sistema [18].

Atualmente novas ideias classificam a fase de Haldane em uma classe especial de fases topológica da matéria onde as simetrias do modelo são de fundamental importância. Pollman e colaboradores [21] demonstraram que a fase de Haldane é uma fase topológica protegida por um grupo de três simetrias; dihedral  $Z_2 \times Z_2$ , reversão temporal e inversão espacial onde somente a existência de uma das três simetrias anteriores é suficiente para estabelecer a existência da mesma. Para tal os autores demonstraram utilizando propriedades das funções de onda inscritas em estados de produto de matriz é possível explorar as representações projetivas dos grupos de simetria citado anterior para definir um índice topológico  $\mathcal{O}_g$  que assume valores determinados para diferentes fases topológicas não triviais. Esse método é amplamente utilizado na comunidade científica na caracterização de diferentes fases topológicas não triviais a partir de seus grupos de simetrias em sistemas fortemente correlacionados diversos [22–24].

## 2.3 Emaranhamento Quântico

Desde de princípio de seu desenvolvimento a mecânica quântica trouxe ideias revolucionárias a física, levando a ações cétricas de grandes cientistas da época. De fato, o clássico artigo de Einstein, Podolski e Rosen de 1935 [114] já apontava críticas à teoria mostrando a possibilidade de estados separados espacialmente apresentarem uma ação "fantasmagórica" a distância dos quais não se tinha explicação a época, logo apontado como um erro grave na teoria. Hoje em dia já sabemos, sobretudo devido a os trabalhos importantes de John Bell [115] que tal comportanto na verdade se trata de um efeito inerente de partículas quânticas que compartilham um estado correlacionado denominado emaranhamento quântico. O fenômeno de emaranhamento quântico é representativo de como a teoria quântica e mesmo sistemas quânticos simples podem apresentar uma rica fenomenologia com grande potencial de se tornar um dos objetos centrais na próxima revolução industrial da humanidade com implicações em comunicação, processamento de informação e sobretudo computação quântica [71]. Do ponto de vista teórico, medidas distintas de emaranhamento quântico nos auxiliam no estudo de sistemas quânticos de muitos corpos, como na classificação de fases quânticas da matéria [21–24, 116], identificação e classificação de transições de fases quânticas [117] se tornando uma ferramenta crucial. Nessa sessão vamos introduzir algumas das medidas essenciais de emaranhamento em sistemas quânticos e suas principais implicações.

### 2.3.1 Emaranhamento e Sistemas Quânticos de Muitos Corpos

Vamos considerar um sistema quântico de partículas interagentes bipartido em que o seu estado quântico pode ser descrito em um espaço de Hilbert  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  onde os subespaços  $\mathcal{H}_A$  e  $\mathcal{H}_B$  definem todos os estados possíveis dos subsistemas A e B respectivamente. Podemos neste caso fazer uma decomposição de Schmidt [71] em que um estado puro  $|\psi\rangle$  pode ser decomposto como

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_A \otimes |\alpha\rangle_B \quad (2.30)$$

onde o conjunto de estados  $|\alpha\rangle_A$  e  $|\alpha\rangle_B$  formam uma base ortonormal do subespaços  $\mathcal{H}_A$  e  $\mathcal{H}_B$  respectivamente e o espectro de Schmidt  $\lambda_{\alpha} \geq 0$ . Temos ainda que a decomposição de Schmidt(SD) é única para estados não degenerados e a soma de seu espectro  $\lambda_{\alpha} = 1$  para estados quânticos  $|\Psi\rangle$  normalizados [40]. Um fator importante da decomposição de Schmidt é a sua relação direta com uma operação matricial importante denominada decomposição de valores singulares(SVD) [37] : Seja o estado  $|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{ij}^x \Psi_{ij} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B$  escritos em alguma base arbitrária A e B. Assim a decomposição de valores singulares da matriz  $\Psi$  implica  $\Psi = U\Lambda V^{\dagger}$ , com as matrizes  $U^{\dagger}U = \mathcal{I}$ ,  $V^{\dagger}V = \mathcal{I}$  matrizes ortogonais denominadas isometrias e  $\Lambda$  uma matriz diagonal  $\chi \times \chi$  com valores reais e positivos. Em termos dos elementos da matrix  $\Psi$  temos

$$\Psi_{ij} = \sum_{\alpha,\beta=1}^{\chi} U_{i\alpha} \Lambda_{\alpha\beta} (V^\dagger)_{\beta j} = \sum_{\alpha=1}^{\chi} U_{i\alpha} \lambda_\alpha (V^\dagger)_{\alpha j} \quad (2.31)$$

com  $\lambda_\alpha$  o espectro de Schmidt. Essa relação entre SD e SVD tem implicações importantes em otimização de métodos numéricos baseados na teoria de redes de tensores [37,38,45,46] que vamos explorar no capítulo seguinte. Voltando para a expressão (2.30), o espectro  $\lambda_\alpha$  está relacionado diretamente com uma medida fundamental do emaranhamento entre os graus de liberdade dos subsistemas A e B. Para entendermos melhor essa relação vamos introduzir uma medida útil para quantificar o grau de emaranhamento entre os dois subsistemas A e B, seja a matriz densidade do subsistema A dada por  $\rho_A = Tr_B(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$  a entropia de emaranhamento  $S$  definida a partir da entropia de Von-Neuman é definida por

$$S = -Tr(\rho_A \log(\rho_A)) \quad (2.32)$$

onde  $Tr$  representa o traço(soma dos elementos da diagonal principal de uma matriz) e teremos que  $S$  define a quantidade de emaranhamento entre os subsistemas A e B, tendo um valor positivo e finito caso os subsistemas sejam emaranhados e nulo caso os sistemas não sejam emaranhados. É possível ainda demonstrar que os estados de Schmidt se relacionam com a matriz densidade reduzida  $\rho_A$  assim como o espectro de Schmidt com os autovalores de  $\rho_A$  com  $\rho_A = \sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_A \langle\alpha|_A$ . A mesma relação é possível ser feita para o subsistema B. A partir dessa relação podemos reescrever a entropia de emaranhamento diretamente como

$$S = -Tr(\rho_A \log(\rho_A)) = -\sum_{\alpha} \Lambda_{\alpha}^2 \log \Lambda_{\alpha}^2 \quad (2.33)$$

note que há uma relação direta entre a entropia de emaranhamento  $S$  e a decomposição de Schmidt, onde para um sistema quântico em que a matriz que representa os possíveis estados  $\Psi_{ij}$  é decomposta em apenas um vetor de Schmidt obtemos diretamente  $\Lambda_{\alpha} = 1 \rightarrow S = 0$  ou seja teremos um estado não emaranhado.

Vamos demonstrar brevemente os conceitos anteriores a partir de exemplos simples partindo de um sistema cotendo dois spins- $\frac{1}{2}$  onde vamos separar cada spin como um subsistema (A) e (B). Considere por exemplo o primeiro estado  $|\phi\rangle$  dado por

$$|\phi\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \quad (2.34)$$

apresenta a decomposição de Schmidt

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) \quad (2.35)$$

representando um estado produto, logo com entropia de emaranhamento  $S = 0$ . Considere agora o estado  $|\phi\rangle$  dado por

$$|\phi\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.36)$$

de decomposição de Schmidt

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \quad (2.37)$$

representa um dos estados de Bell [115], com entropia de emaranhamento máxima  $S = \log 2$ .

Vale mencionar que a entropia de emaranhamento  $S$  é uma das formas de medir do grau de emaranhamento para estados puros, porém vale mencionar que existe uma medida mais geral de entropia de emaranhamento para sistemas puros onde substituímos a entropia de von-Neuman pela class de entropias de Renyi [72]

$$S_\alpha(\rho_A) = \frac{1}{1-\alpha} \log_2 (\text{Tr}(\rho_A^\alpha)) \quad (2.38)$$

onde recuperamos a entropia de von-Neuman de  $\rho_A$  para  $\alpha \rightarrow 1$ . Em analogia com a entropia de emaranhamento, teremos  $S_\alpha > 0$  para estados puros emaranhados e  $S_\alpha = 0$  para estados puros separáveis para todos valores de  $\alpha$  inteiros. Trabalhos que demonstram a utilidade de medidas de emaranhamento para identificar transições de fases datam do inicio dos anos 2000 [118–121] em diversos sistemas físicos de interesse. Certamente um dos primeiros trabalhos a demonstrar a utilidade da entropia de von-Neuman foi o de Gu *et. al* [121] em seus estudos do modelo de Hubbard estendido unidimensional de hamiltoniano [73]

$$\mathcal{H} = \sum_{i,\sigma} \left( c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1} \quad (2.39)$$

onde  $i = 1, \dots, N$  com  $N$  o tamanho da cadeia,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  os possíveis estados de spin e  $c_{i,\sigma}^\dagger, c_{i,\sigma}$  os operadores de criação e aniquilação no sítio  $i$  e de estado de spin  $\sigma$  respectivamente. Temos ainda  $U$  e  $V$  os parâmetros de controle das interações entre os elétrons no mesmo sítion e entre sítions vizinhos respectivamente. A partir de medidas da entropia de von-Neuman  $S_I$  para uma matriz densidade  $\rho_i$  de um sítio os autores demonstraram nesse espaço de parâmetros  $(U, V)$  que  $S_I$  tem um valor máximo exatamente no ponto crítico do modelo para  $U = 0.0$ . O diagrama de fases do modelo ainda pode ser construído também a partir de medidas de  $S_i$  [118].

É sabido que muitas teorias críticas em modelos quânticos interagentes unidimensionais são bem descritos por teorias de campos conformes em 1+1 dimensões [16, 17].

De fato, pontos críticos que apresentem invariância sob transformações conformes podem ser caracterizados por uma quantidade fundamental denominada carga central  $c$  que determina universalidade da transição de fase. Podemos citar como exemplo transições de fases Gaussianas apresentam carga central  $c = 1$  [122–124], transições de tipo Ising apresentam carga central  $c = \frac{1}{2}$  [125, 126] e em transições da classe  $SU(2)_k$  Wess-Zumino-Witten [127–129]. Na verdade há uma relação direta entre a carga central de uma dada teoria de campos conformes em 1+1 dimensões e a forma de escala entropia de emaranhamento de um modelo quântico em 1d. Assim, a entropia de Von Neumann  $S(l)$  de um sistema quântico bipartido em dois blocos  $L$  e  $L - l$  é dada por [130] :

$$S(l) = \frac{c}{6} \left[ \frac{2L}{\pi a} \sin \left( \frac{\pi l}{L} \right) \right] + s_1 \quad (2.40)$$

com  $c$  a carga central do modelo,  $a$  o espaçamento da rede e  $s_1$  uma constante não universal. Para o caso de uma bipartição em dois sub blocos  $L/2$  obtemos

$$S(l) = \frac{c}{6} \log \left( \frac{l}{a} \right)$$

onde podemos utilizar essas expressões para calcular  $c$ . Para sistemas quânticos invariantes sob translação próximo a um ponto crítico teremos o comprimento de correlação  $\xi$  ainda finito com a entropia de emaranhamento obedecendo a forma de escala

$$S = \frac{c}{6} \log \left( \frac{\xi}{a} \right)$$

Utilizando métodos de redes de tensores Tagliacozzo mostrou que no ponto crítico nos modelos de Ising transversal e de Heisenberg isotrópico, o comprimento de correlação  $\chi$  se relaciona com uma quantidade denominada *bond dimension*  $\xi$  a partir da relação [131]

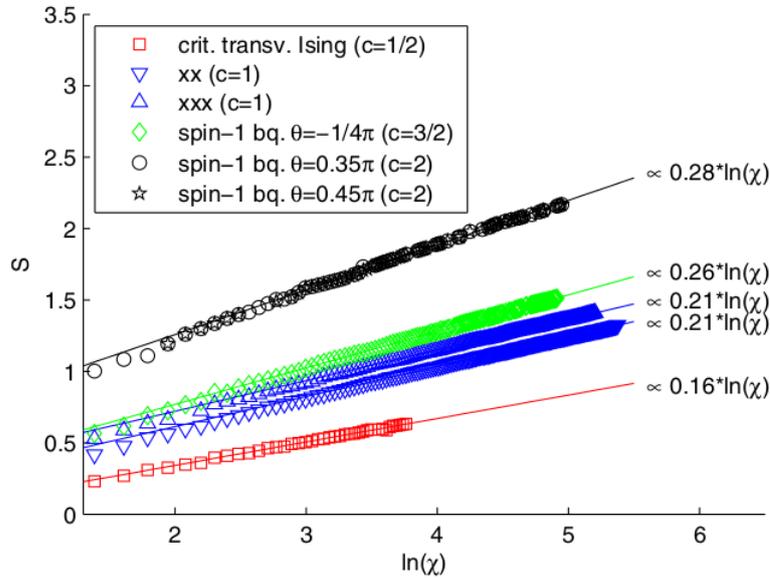
$$\xi = \chi^\kappa \rightarrow S_\chi \sim \frac{c}{6} \log \chi^\kappa \quad (2.41)$$

com  $\kappa$  um expoente não universal e  $\chi$  a quantidade que se relaciona com a entropia de emaranhamento a partir da decomposição de Schmidt dada a expressão (2.31). Dessa forma a equação (2.41) nos permite calcular a carga central para modelos quânticos com invariância translacional a partir da escala de emaranhamento finito [131]. Além disso, as formas de escala de outras quantidades como magnetização e energia podem ser reescritas em função de  $\chi^\kappa$ , de modo a nos permitir calcular os expoentes críticos associados. Em outro trabalho [132], Pollman e colaboradores implementando o método *time-evolving block decimation* para modelos de spins interagentes infinitos demonstrou que a entropia  $S_\chi$  pode assumir uma forma independente do expoente  $\kappa$  dada por :

$$S_\chi = \frac{1}{\sqrt{\frac{12}{c} + 1}} \log(\chi) \quad (2.42)$$

com  $c$  a carga central e  $\chi$  o *bond-dimension*. A partir da relação (2.41) o autor demonstra a validade da expressão calculando a carga central  $c$  para diversos modelos de spins interagentes [132].

Figura 2.13: Vemos na figura abaixo a forma de escala da entropia de emaranhamento de Von Neumann em função de  $\ln(\chi)$  para diferentes modelos de spins representados no interior da figura. Todos as medidas de carga central  $c$  foram obtidas a partir da relação (2.41)



Fonte : Pollman, (2009) [132]

As relações (2.41) e (2.42) são importantes pois relacionam a entropia de emaranhamento com uma quantidade  $\chi$  central nos métodos de redes de tensores, esta que controla o grau de emaranhamento em fases com excitações não massivas ou nas proximidades de um ponto crítico quântico. Para fases quânticas com gap energético, a entropia de emaranhamento independe do tamanho do sistema considerado e um número finito  $\chi$  é suficiente para uma representação precisa da função de onda do modelo de interesse [40, 41, 133]. Isso é possível devido a importante lei das áreas [134–136] para a entropia de emaranhamento, esta um elemento central na eficiência dos métodos advindos da teoria de redes de tensores. No capítulo seguinte vamos introduzir os conceitos fundamentais desta teoria e discutir métodos para eficientes para obtermos estado fundamental e observáveis em sistema quânticos de spins em uma dimensão.

# Capítulo 3

## Métodos de redes de tensores para sistemas quânticos de muitos corpos

### 3.1 Introdução

Estudar um sistema quântico de muitos corpos não é uma tarefa fácil. Vimos no capítulo anterior que modelos de spins interagentes, realização "mais simples" de sistemas quânticos de muitos corpos, não apresentam solução exata em grande parte dos seus modelos, levando a aplicação de técnicas analíticas aproximadas de representações diversas dos operadores de spins na obtenção dos estados excitados de baixas energias [49, 60, 65, 74]. Vimos também que a obtenção do Hamiltoniano de Heisenberg a partir de um modelo generalizado de elétrons interagentes passa por diversos tipos de considerações e simplificações [73, 137] e ainda assim obtivemos um modelo complexo e rico em fenômenos distintos. De que forma podemos então tratar os sistemas quânticos que não apresentam soluções analíticas? É nesse sentido que os métodos numéricos se apresentam como uma ferramenta importante na obtenção das quantidades importantes para os modelos de interesse. Neste capítulo vamos introduzir a teoria de redes de tensores [39, 45, 46, 138], uma formulação teórica que nos permite implementar métodos numéricos eficientes no estudo de sistemas quânticos de muitos corpos.

Ao nos propormos a estudar um sistema quântico de muitos corpos, uma das formas de atacar o problema é mapeando o sistema em uma rede cristalina. Dessa forma temos agora o papel de descrever os seus componentes (são spins localizados? férmions? bósons?), a forma com qual eles interagem (interações de segundos vizinhos, acoplamento com campos externos), a topologia da rede e as condições periódicas de contorno do problema (qual a dimensão da rede? qual a estrutura da célula unitária?). O sistema então consiste em  $N$  sub-sistemas quânticos que estão descritos em uma base adequada  $|\alpha_i^{(k)}\rangle$ ,  $k = 1, \dots, d$  com  $d$  a dimensão do espaço de um sítio separadamente. Então, dada a base, uma forma de representação o estado total da cadeia com  $N$  sítios é através do estado  $|\alpha_1^k, \alpha_2^k, \dots, \alpha_N^k\rangle$  dado pelo produto direto das componentes da base :

$$|\alpha_1^k, \alpha_2^k, \dots, \alpha_N^k\rangle = |\alpha_1^k\rangle \otimes |\alpha_2^k\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_N^k\rangle \quad (3.1)$$

Um estado arbitrário da cadeia  $|\Psi\rangle$  pode ser expandido em uma base ortonormal adequada como :

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_j} \psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N) |\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\rangle \quad (3.2)$$

onde o número total de combinações de cada um dos subespaços de um sítio gera o espaço de Hilbert do hamiltoniano que representa o modelo. A dimensão desse espaço vetorial escala com  $\prod_{j=1}^N d$ , um crescimento exponencial com o número de sítios do modelo. Esse é um problema difícil de lidar quando tratamos de sistemas quânticos de muitos corpos. Essa característica é comum aos modelos mais estudados na literatura, como o modelo de Hubbard de férmions itinerantes de spin  $s = \frac{1}{2}$  em que a dimensão da base local  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |0\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle\}$  é de dimensão 4, ou o modelo de férmions localizados de Heisenberg de spin  $s$  e com dimensão da base local generalizada  $2s + 1$ . Todas essas informações estão descritas na representação matricial do hamiltoniano do modelo em que, *a priori*, as propriedades estáticas do sistema podem ser extraídas a partir a equação de Schrödinger :

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (3.3)$$

Então, de forma simplificada, o problema em obter as energias do estado fundamental e suas propriedades em um dado modelo se resume em diagonalizar a matriz do Hamiltoniano do problema para um dada representação de base adequada. Porém, o crescimento exponencial do espaço de Hilbert do modelo torna a diagonalização da matriz Hamiltoniana um problema do ponto de vista computacional, sendo impossível para um computador clássico obter todas as energias de uma simulação real de um sólido com um número de sítios da ordem de  $10^{26}$  [36, 45]. É no sentido de atacar esse problema que os métodos numéricos são construídos. Nesse sentido os métodos de Montecarlo quântico [34] certamente é um dos mais eficientes no estudo de sistemas quânticos de muitos corpos. Ainda, métodos derivados da teoria de renormalização numérica se mostram eficientes para um grupo seletivo de problemas [139]. Mais recentemente novas ideias advindas da teoria de informação quântica trouxeram para a área de matéria condensada computacional um conjunto grande de ferramentas que nos permitem simular sistemas quânticos com muita eficiência. Nas próximas sessões vamos discutir as ideias gerais por trás da teoria de redes de tensores e demonstramos alguns dos algoritmos mais eficientes para tratar de sistemas quânticos interagentes em uma dimensão.

## 3.2 Teoria de Redes de Tensores

Um problema comum quando lidamos com sistemas quânticos de muitos corpos numericamente é o crescimento exponencial do espaço de Hilbert que descreve o hamiltoniano do problema. Seria interessante se existesse uma forma otimizada representar uma função de onda de muitos corpos  $|\Psi\rangle = \psi_{j_1, \dots, j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle$ , com a matriz  $\psi_{j_1, \dots, j_N}$  exponencialmente grande, a partir de um número polinomial de parâmetros. A teoria de redes de tensores tem como objetivo justamente descrever um conjunto de dados exponencialmente grande a partir de uma quantidade computacionalmente viável [38]. A ideia geral é a partir de constituintes de dimensões reduzidas, tensores, representar um conjunto grande de dados a partir de uma representação adequada. Para tal primeiro precisamos introduzir a linguagem utilizada. Um tensor é um conjunto de dados complexos multidimensional que contém índices que representa o seu grau. Temos como exemplo clássico na física, um número escalar é o equivalente a um tensor  $c$  de grau zero, enquanto um vetor seria o equivalente a um tensor  $\nu_\alpha$  de grau um. Sendo assim, uma matriz  $M$  seria equivalente a um tensor  $M_{\alpha\beta}$  de grau dois. A contração de um dado índice de um tensor é dado pela soma sob todos os possíveis valores desse índice para o conjunto de tensores que o compartilham. Por exemplo a matriz  $C_{\alpha\gamma}$  pode ser escrita como

$$C_{\alpha\gamma} = \sum_{\beta=1}^D A_{\alpha\beta} B_{\beta\gamma} \quad (3.4)$$

acima temos um produto entre as matrizes  $A_{\alpha\beta}$  e  $B_{\beta\gamma}$  descritos como uma contração do tensor  $\beta$  somando sob todos os valores possíveis. Outra operação que podemos representar é a multiplicação de uma matriz  $M_{ab}$  por um vetor  $\nu_b$  resultando em um outro vetor  $\kappa_a$  dado por

$$\kappa_a = \sum_b^D M_{ab} \nu_b \quad (3.5)$$

podemos claro ter situações mais complicadas como uma representação um tensor com vários índices  $F_{\gamma\omega\rho\sigma}$  como uma contração de outros tensores dado por

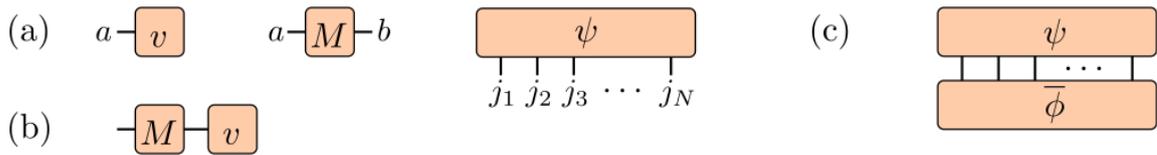
$$F_{\gamma\omega\rho\sigma} = \sum_{\alpha, \beta, \delta, \nu, \mu=1}^D A_{\alpha\beta\delta\sigma} B_{\beta\gamma\mu} C_{\delta\nu\mu\omega} D_{\nu\rho\alpha} \quad (3.6)$$

onde assumimos o caso particular em que todos os índices acima tem a mesma dimensão  $D$

Uma rede tensores então é um conjunto de tensores interconectados por índices que são contraídos seguindo algum padrão. Uma forma de visualizar então as operações com os tensores é a partir dos diagramas de tensores, como vemos na figura 3.1. Cada tensor é então representado no diagrama onde cada perna representa um de seus índices. Então

como vimos, o vetor  $\nu_\alpha$  é representado por somente uma perna, enquanto a matriz  $M_{\alpha\beta}$  por duas pernas na figura 3.1 (a). A multiplicação da matriz  $M_{ab}$  pelo vetor  $\nu_b$  é representado em (b), onde vemos a junção das pernas dos tensores em comum representando a contração desse índice. Um tensor com pernas soltas representa que não índices que ainda não foram contraídos.

Figura 3.1: Diagrama de tensores. Em (a) temos o vetor  $\nu$  e a matriz  $M$  e em (b) temos a contração do índice que ambos compartilham representando o produto da matriz  $M$  pelo vetor  $\nu$ . Em (c) temos a representação da matriz de coeficientes  $\psi$  da função de muitos corpos  $|\Psi\rangle$  e ainda a representação em diagrama de tensores do produto interno entre duas funções de onda  $\langle\bar{\phi}|\psi\rangle$



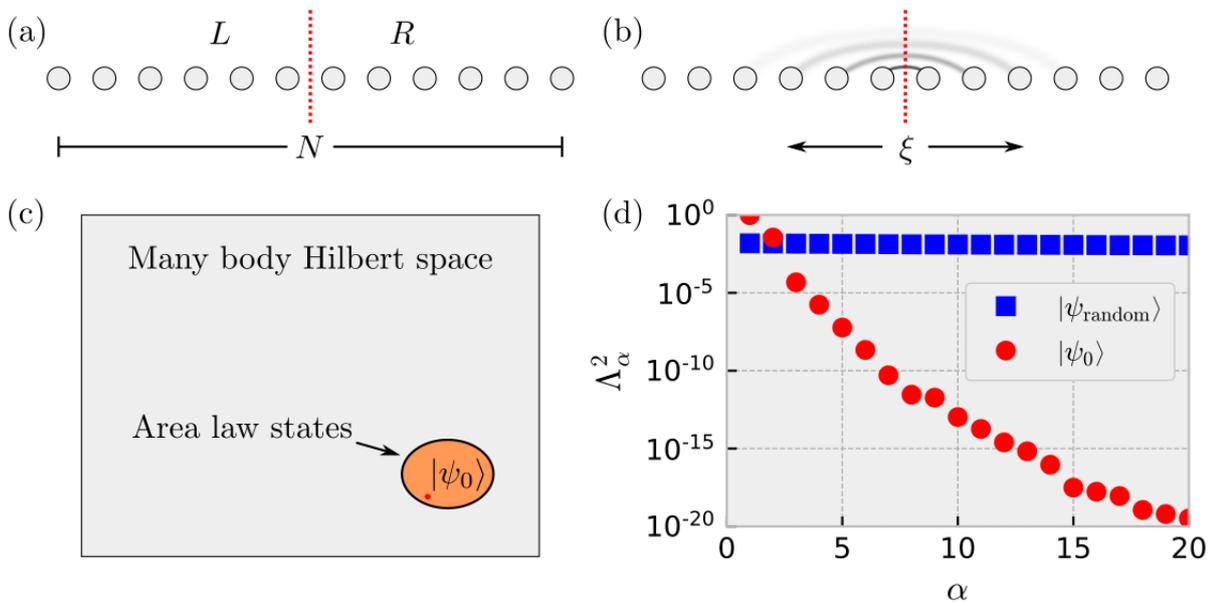
Fonte: Pollman, (2018) [140]

Assim podemos trazer essa linguagem para representar a matriz de coeficientes  $\psi_{j_1, \dots, j_N}$  da função de onda de muitos corpos  $|\Psi\rangle$ . Vemos na figura 3.1 (c) a representação de  $\psi$  como um tensor de índices  $j_1, \dots, j_N$  de grau  $N$  ( $N$  pernas) com a dimensão de cada índice  $j_n$  equivalente a dimensão de espaço de Hilbert local. Utilizando essa notação podemos representar a partir do diagrama de contração dos tensores medidas de operadores locais, operadores de produto de matrizes [38, 46] e funções de correlação por exemplo. Ainda na figura 3.1 (c) temos a representação do produto interno  $\langle\bar{\phi}|\psi\rangle$  entre duas funções de onda  $|\phi\rangle$  e  $|\psi\rangle$ . A representação da matriz  $\psi_{j_1, \dots, j_N}$  por diagramas de tensores não resolve o problema de sua dimensionalidade. Entretanto é possível a partir de um método controlado de sucessivas decomposições de Schmidt representar o mesmo estado  $|\Psi\rangle$  reduzindo com um número polinomial de parâmetros. E isso só é possível por causa de uma propriedade chave na eficiência dos métodos de redes de tensores denominada lei das áreas da entropia de emaranhamento.

A lei das áreas dita que a entropia de emaranhamento de um sistema quântico bipartido em dois sub blocos A e B cresce proporcional a região do que separa A e B. Um exemplo muito recorrente em estudos de matéria condensada é o de estados fundamentais que representem hamiltoniano com gap energético e interações locais. Neste caso por exemplo é possível demonstrar que a entropia de emaranhamento cresce proporcionalmente com a área do corte considerado na bipartição [134]. Em contrapartida, um estado quântico aleatório  $|\psi_{random}\rangle$  com  $N$  sítios de dimensão local do espaço de Hilbert  $d$  tem a entropia e emaranhamento que escala com  $S \approx \frac{N}{2} \log(d) - \frac{1}{2}$  [135] crescendo então linearmente com o tamanho da cadeia. Uma forma de entender essa diferença na forma de escala para estados fundamentais com gap energético é considerar que dada uma bipartição em uma cadeia de  $N$  sítios, teremos apenas flutuações quânticas em torno de um tamanho finito de comprimento de correlação  $\xi$ , de modo que teremos somente graus de emaranhamento exatamente na região biparticionada. Em outras palavras, estados

fundamentais com gap energético em modelos unidimensional tem o seu emaranhamento proporcional a área de corte biparticionada, ou seja, proporcional a uma constante. Esse resultado está formalmente demonstrado para diversos modelos quânticos em uma dimensão [141]. Temos então na figura 3.2 a representação da bipartição de uma cadeia de  $N$  sítios nos subblocos L e R e em (b) a relação do comprimento de correção  $\xi$  com o grau de emaranhamento entre os sub blocos L e R. Dessa forma, fases com gap energético tem o comprimento de correlação finito  $\xi$  o que implica que no limite termodinâmico a entropia de emaranhamento entre L e R independe do tamanho da cadeia ! Estados que obedecem a lei das áreas da entropia de emaranhamento então representam um conjunto de estados no espaço de Hilbert com o seu conteúdo de emaranhamento limitado (figura 3.2 (c)). Como vimos em capítulos anteriores, a decomposição de Schmidt de um estado  $|\psi\rangle$  é intimamente ligada com a entropia de emaranhamento  $S$ . Estados  $|\Psi\rangle$  que obedecem a lei das áreas então são eficientemente representado para um numero finito  $\chi$  de vetores de Schmidt, como vemos na figura 3.2 (d) o espectro de Schmidt  $\Lambda_\alpha^2$  decai rapidamente para o estado fundamental com gap energético  $|\psi_0\rangle$ , enquanto para o caso de um estado aleatório  $|\psi_{random}\rangle$  o espectro de Schmidt praticamente não muda para os  $\alpha = 20$  primeiros vetores da decomposição.

Figura 3.2: Temos em (a) a representação do biparticionamento da cadeia de  $N$  sítios em sub blocos L e R. Em (b) a representação do comprimento de correlação  $\xi$  no ponto de separação dos sub blocos. Em (c) temos a representação dos estados que seguem a lei das áreas como um subconjunto muito menor quando comparado com a dimensão do espaço de Hilbert. Em (d) a distribuição do espectro de Schmidt para o caso de estados fundamentais com gap energético  $|\psi_0\rangle$  e aleatório  $|\psi_{random}\rangle$ .



Fonte: Pollman, (2018) [140]

Entretando não são todos os estados fundamentais que seguem a lei das áreas. Fases críticas da matéria por exemplo segue a lei logarítmica no tamanho da cadeia  $N$ . Outras fases quânticas da matéria com estrutura de emaranhamento mais complicadas e a violação desta lei das áreas é um tema ainda bastante discutido [142].

### 3.2.1 Estados de produto de matrizes

Seja um estado quântico genérico  $|\Psi\rangle$  definido em uma cadeia com  $N$  sítios, vamos definir a forma de estados de produto de matrizes(MPS) decompondo o estado como

$$|\Psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} A^{[1]j_1} A^{[2]j_2} \dots A^{[N]j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle \quad (3.7)$$

onde teremos  $A^{[n]j_n}$  uma matriz de dimensões  $\chi_{n-1} \times \chi_n$  e  $|j_n\rangle$  com  $n = 1, \dots, d$  a base do espaço de Hilbert local referente ao sítio  $n$ . As matrizes definidas nos sítios  $n = 1$  e  $n = N$  determinam as condições de contorno do problema, onde para o caso de cadeias abertas teremos  $\chi_0 = \chi_N = 1$ . A decomposição dada pela equação (3.7) permite representar um conjunto exponencial de elementos dados pela matriz do espaço de Hilbert total da cadeia de tamanho  $N$  por um conjunto de  $N$  matrizes de dimensões  $\chi_{n-1} \times \chi_n$  a partir de um processo controlado de descarte de vetores de Schimidt com espectro pequeno o suficiente. Para representar melhor esse processo, vamos voltar para a função de onda  $|\Psi\rangle$  em sua forma original dada por

$$|\Psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} \psi_{j_1, \dots, j_N} |j_1, \dots, j_N\rangle \quad (3.8)$$

onde  $\psi_{j_1, \dots, j_N}$  representa um tensor de rank  $N$  e dimensão  $d^{\otimes N}$ . Podemos decompor esta função de onda em vetores de Schmidt escolhendo dois sub-blocos de dimensão arbitrária respeitando o tamanho da cadeia  $N$ . Assim, separando o primeiro sítio do restante da cadeia obtemos

$$|\Psi\rangle = \sum_1^d \lambda_{\alpha_1}^{[1]} |\alpha_1\rangle_{[1]} |\alpha_1\rangle_{[2, \dots, N]} \quad (3.9)$$

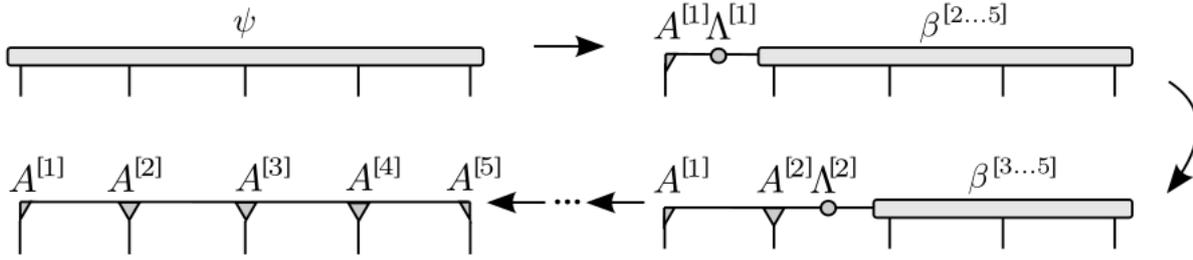
com os vetores  $|\alpha_1\rangle_{[1]}$  e  $|\alpha_1\rangle_{[2, \dots, N]}$  formam uma base ortonormal da bipartição esquerda e direita respectivamente. A primeira matriz  $A_{\alpha_1}^{[1]j_1}$  na forma MPS se relaciona com o vetor de Schmidt  $|\alpha_1\rangle_{[1]}$  com base local  $|j_1\rangle$  da seguinte forma  $A_{\alpha_1}^{[1]j_1} = \langle j_1 | \alpha_1 \rangle_{[1]}$  resultando em uma representação mista entre as bases ortonormais  $|j_i\rangle$  e  $|\alpha_i\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1=}^d A_{\alpha_1}^{[1]j_1} \Lambda_{\alpha_1}^{[1]} |j_1\rangle |\alpha_1\rangle_{[2, \dots, N]} \quad (3.10)$$

assim vamos seguir com a decomposição de Schmidt do próximo sítio separando o estado como

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_2=}^{d^2} \Lambda_{\alpha_2}^{[2]} |\alpha_2\rangle_{[1,2]} |\alpha_3\rangle_{[3, \dots, N]} \quad (3.11)$$

Figura 3.3: Decomposição em estados de produto de matrizes para uma função de onda  $\psi$  com 5 sítios.



Fonte : J. A. Kjäll, (2013) [143]

agora a segunda matriz  $A_{\alpha_1\alpha_2}^{[2]j_2}$  se relaciona com os estados base  $|\alpha_1\rangle_{[1]}|j_2\rangle$  com vetor de Schmidt  $|\alpha_2\rangle_{[1,2]}$  através da relação  $A_{\alpha_1\alpha_2}^{[2]j_2} = [\langle\alpha_1|_{[1]} \langle j_2|_{[2]}] |\alpha_2\rangle_{[1,2]}$ , onde agora a nossa função  $|\Psi\rangle$  fica

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1}^d \sum_{\alpha_2}^{d^2} \sum_{j_1, j_2=1}^d A_{\alpha_1}^{[1]j_1} A_{\alpha_1\alpha_2}^{[2]j_2} \Lambda_{\alpha_2}^{[2]} |j_1, j_2\rangle |\alpha_3\rangle_{[3, \dots, N]} \quad (3.12)$$

assim é fácil de ver que podemos seguir prosseguindo com o processo até o sítio  $N$ , onde podemos obter a matriz  $A^{[N]j_n}$  a partir da relação do vetor de Schmidt  $\Lambda_{\alpha_N} |\alpha_N\rangle_{[N]}$  e a base local  $|j_n\rangle$ . Dessa forma ao final do processo obtemos a forma de MPS dada pela equação (3.7). Note ainda que ao passo que movemos para o último sítio com decomposições de Schmidt sucessivas a dimensão da matriz  $A_{\alpha_n}^{[n]j_n}$  cresce exponencialmente tornando a representação MPS ineficaz. Porém, podemos definir um número máximo de vetores de Schmidt  $\chi$  limitando então o crescimento exponencial desta matriz. Assim, o *bond-dimension*  $\chi$  se relaciona inteiramente com a precisão da aproximação MPS para estados fundamentais de modelos quânticos em uma dimensão. Desta forma para estados que sigam a lei das áreas para a entropia de emaranhamento, a representação MPS é muito eficaz sendo possível por exemplo obter estados fundamentais e medidas de observáveis para um valor finito de  $\chi$  [41, 46].

### 3.2.2 Forma Canônica

Uma propriedade fundamental dos estados de produto de matriz é a invariância de gauge das matrizes  $A^{[n]i_n}$ . Em outras palavras, dada a transformação

$$\tilde{A}^{[n]i_n} = X_{n-1} A^{[n]i_n} X_n^{-1} \quad (3.13)$$

não altera a função de onda  $|\Psi\rangle$ , com  $X_n$  matrizes quadradas  $\chi_n \times \chi_n$  denominadas isometrias [38]. Assim devemos encontrar uma forma conveniente de representar as matrizes que compõe a decomposição MPS de modo a garantir a validade da decomposição de Schmidt. Considere sem perda de generalidade que podemos escrever as matrizes  $A^{[n]j_n}$  como



Figura 3.6: Representação das funções de onda dos sub-blocos  $|\alpha\rangle_R$  e  $|\alpha\rangle_L$  em função das matrizes  $\Gamma$  e  $\Lambda$ .

$$|\alpha\rangle_R = \alpha \begin{array}{c} \Gamma \quad \Lambda \quad \Gamma \quad \Lambda \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \dots$$

$$|\alpha\rangle_L = \dots \begin{array}{c} \Lambda \quad \Gamma \quad \Lambda \quad \Gamma \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \alpha$$

Fonte : J. A. Kjäll, (2013) [143]

- (ii) Para cada ligação  $n$  teremos que  $\langle \alpha' | \alpha \rangle_{[1, \dots, n]} = \delta_{\alpha', \alpha}$  e  $\langle \alpha' | \alpha \rangle_{[n+1, \dots, N]} = \delta_{\alpha', \alpha}$
- (iii) Por fim, para cada ligação  $n$  teremos que  $\sum (\Lambda^{[n]})^2 = 1$

### 3.2.3 Estados de produto de matriz invariantes sob translação

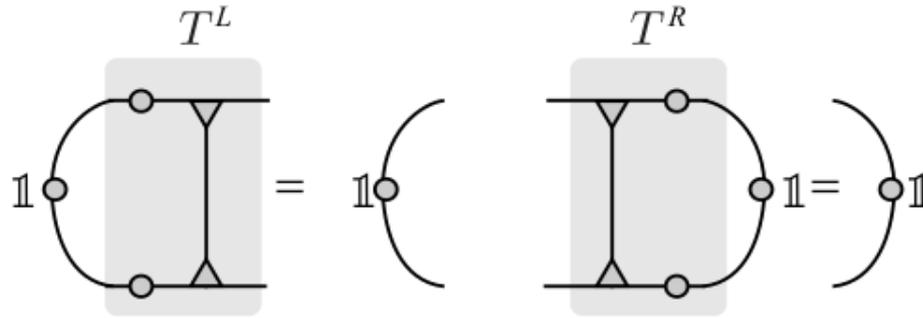
Considere a decomposição MPS para um sistema quântico infinito. Assumindo invariância translacional, teremos que o conjunto das matrizes  $\Gamma^{[n]j}$  e  $\Lambda^{[n]}$  independem do índice  $n$ . Logo, obtendo somente as matrizes  $\Gamma^{[n]j} = \Gamma^j, \Lambda^{[n]} = \Lambda$  teremos uma representação para a função de onda  $|\Psi\rangle$  mesmo no limite termodinâmico. Entretanto, obter medidas nesse regime requer a contração de uma rede de tensores infinita (somar sob todos os termos  $j_1, \dots, j_N$ ) o que não seria eficiente. Para então uma função de onda infinita na representação de estados de produto de matrizes (iMPS) a condição de ortogonalidade pode ser definida eficientemente introduzindo os operadores matriz transferência  $T^L$  e  $T^R$  representados na figura 3.7

$$T_{\alpha\alpha';\beta\beta'}^R = \sum_j \Gamma_{\alpha\beta}^j (\Gamma_{\alpha'\beta'}^j)^* \Lambda_\beta \Lambda_{\beta'} \quad (3.16)$$

$$T_{\alpha\alpha';\beta\beta'}^L = \Lambda_\alpha \Lambda_{\alpha'} \sum_j \Gamma_{\alpha\beta}^j (\Gamma_{\alpha'\beta'}^j)^* \quad (3.17)$$

com  $*$  o complexo conjugado. As matrizes transferência  $T^R$  e  $T^L$  garantem a forma canônica da representação iMPS se tivermos para o primeiro caso o autovetor à direita  $\delta_{\beta\beta'} = \mathbb{1}$  dominante com autovalor  $\nu = 1$  e o auto vetor à esquerda  $\delta_{\alpha\alpha'} = \mathbb{1}$  também com autovalor  $\nu = 1$  [38, 43, 144]. Um método para transformar uma função de onda escrita em uma forma iMPS arbitrária na forma canônica foi introduzido por Orús, o que envolve a partir dos vetores dominantes das matrizes transferência  $T^L$  e  $T^R$  construir uma representação para  $\Lambda$  as utilizando como isometrias [44]. O método se mostrou eficaz também no estudo de evoluções não unitárias e na obtenção de função de partição de medidas de observáveis para sistemas de spins clássicos 2D [44].

Figura 3.7: Temos as matrizes transferência à esquerda  $T^L$  e à direita  $T^R$  obtidas a partir da forma canônica para um dado estado de produto de matrizes.



Fonte : J. A. Kjäll, (2013) [143]

### 3.3 Métodos Numéricos

Nessa sessão vamos discutir como podemos a partir do formalismo de redes de tensores implementar métodos eficientes para investigar modelos quânticos em uma dimensão. Vamos então explicar dois métodos numéricos : O primeiro denominado *Density Matrix Renormalization Group*, um método variacional para obtenção do estado fundamental que surgiu pelos trabalhos pioneiros de Steven White [145, 146] como uma generalização do método de grupo de renormalização numérica para o problema de Kondo. Um trabalho posterior de Stellan Östlund [147] e Stefan Rommer já discutia a implementação do método DMRG no limite termodinâmico para estados "levemente emaranhados" escritos como um produto de matrizes, trabalho este pioneiro nos primeiros passos na teoria de redes de tensores. Atualmente o método é entendido naturalmente na linguagem de redes de tensores [45, 46] sendo um dos métodos mais eficientes no estudo de sistemas quânticos unidimensionais. O outro método que iremos discutir nessa sessão surgiu naturalmente com o desenvolvimento da teoria de redes de tensores [40–42, 133]. O método denominado *time-evolving block decimation* foi introduzido por Guifré Vidal [43] e nos permite obter o estado fundamental de um modelo a partir de evolução em tempo imaginário ou estudar dinâmica de sistemas quânticos por evolução de tempo real. O método é muito eficiente e é comumente utilizado no estudo de sistemas de spins clássicos em 2d [44] e também como uma ferramenta para método mais complexos como *projected entangled pair states* que nos permite estudar propriedades estáticas e dinâmicas de modelos quânticos bidimensionais [37, 47, 48]. O método TEBD também pode ser utilizado para estudo de dinâmica de sistemas quânticos abertos [56] a partir da equação de Lindblad vetorizada. Em um trabalho recente, Roman Orús [148] demonstrou a eficiência do método TEBD para o estudo de dinâmica de sistemas quânticos abertos bidimensionais. Outros métodos derivados da teoria de tensores propostos nos últimos anos também nos permite o estudo de sistemas quânticos abertos eficientemente [149–152].

#### 3.3.1 O método *Time-Evolving Block Decimation*

O método *Time-Evolving Block Decimation* (TEBD) consiste em obter o estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  de um modelo quântico de interesse a partir da evolução temporal:

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle \quad (3.18)$$

onde através do operador de evolução temporal  $U(t) = e^{-it\mathcal{H}}$  podemos ter uma evolução em tempo real ou uma evolução em tempo imaginário absorvendo a unidade imaginária  $i$  em  $U(\tau) = e^{-\tau\mathcal{H}}$  com  $\tau = it$ . Para uma evolução em tempo imaginário, a função de onda  $|\psi(0)\rangle$  é projetada no estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  do hamiltoniano  $\mathcal{H}$  para tempos imaginários suficientemente grandes [43] :

$$|\psi_0\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{e^{-\tau\mathcal{H}} |\psi(0)\rangle}{|e^{-\tau\mathcal{H}} |\psi(0)\rangle|} \quad (3.19)$$

O método TEBD utiliza então a decomposição de Trotter-Suzuki [43, 44] que aproxima a soma de operadores exponenciais pelo produto desses mesmos operadores. Sejam então  $X$  e  $Y$  dois operadores, a expansão de Trotter-Suzuki de primeira e segunda ordem é dada respectivamente por

$$e^{\delta(X+Y)} = e^{\delta X} e^{\delta Y} + \mathcal{O}(\delta^2) \quad (3.20)$$

$$e^{\delta(X+Y)} = e^{\frac{\delta}{2}X} e^Y e^{\frac{\delta}{2}X} + \mathcal{O}(\delta^3) \quad (3.21)$$

com  $\delta$  um parâmetro pequeno. Vamos então utilizar a decomposição descrita acima em nosso operador evolução temporal  $U(t)$ . Para tal, primeiro considere que o hamiltoniano  $\mathcal{H}$  pode ser escrito como uma soma de operadores locais, como por exemplo operadores de dois sítios

$$\mathcal{H} = \sum_n h^{[n, n+1]}$$

onde  $h^{[n, n+1]}$  atua somente nos sítios  $n$  e  $n+1$ . Sendo assim, podemos separar o hamiltoniano  $\mathcal{H}$  como

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum_{n \text{ ímpar}} h^{[n, n+1]}}_{\mathcal{H}_{\text{par}}} + \underbrace{\sum_{n \text{ par}} h^{[n, n+1]}}_{\mathcal{H}_{\text{ímpar}}} \quad (3.22)$$

onde os termos  $\mathcal{H}_{\text{ímpar}}$  e  $\mathcal{H}_{\text{par}}$  consistem em uma soma de operadores que comutam entre si, de modo que podemos escrever

$$e^{\delta\mathcal{H}_{\text{ímpar}}} = \prod_{n \text{ ímpar}} e^{\delta h^{[n, n+1]}} \quad (3.23)$$

$$e^{\delta\mathcal{H}_{\text{par}}} = \prod_{n \text{ par}} e^{\delta h^{[n, n+1]}} \quad (3.24)$$

Podemos então na evolução temporal dividir o tempo em intervalos pequenos  $\delta t \ll 1$  e considerar a evolução temporal do operador  $U(\delta t)$ . O tempo relevante aqui para obtermos uma representação adequada do estado fundamental durante a evolução temporal imaginária escala com o inverso do gap energético  $\Delta E$ , de modo que fases críticas requerem um tempo muito grande de evolução temporal [46]. Assim sendo, a decomposição de Trotter-Suzuki de primeira ordem para o operador temporal  $U(\delta t)$  é dada por

$$U(\delta t) \approx \left[ \prod_{n \text{ ímpar}} U^{[n,n+1]}(\delta t) \right] \left[ \prod_{n \text{ par}} U^{[n,n+1]}(\delta t) \right] \quad (3.25)$$

utilizamos acima a notação  $U^{[n,n+1]}(\delta t) = e^{-i\delta t h^{[n,n+1]}}$ . Assim sendo o operador  $U(\delta t)$  é unitário e atua sob dois sítios, onde podemos aplicá-lo em uma função de onda escrita na forma MPS para computar evoluções em tempo real ou imaginário. Temos na figura 3.8 uma representação da implementação do operador  $U(\delta t)$  em uma função de onda na forma MPS.

Figura 3.8: Evolução temporal da função de onda em MPS no método TEBD. Aplicação do operador  $U(\delta t)$  ocorre aos pares ao longo da cadeia, de modo que cada "camada" de operadores formada pelo conjunto de operadores  $U(\delta t)$  evolui a função de onda no eixo imaginário em um tempo  $\delta t$ . A aplicação sucessivas dos operadores  $U(\delta t)$  para um tempo imaginário suficiente grande projeta o estado fundamental  $|\psi_0\rangle$  do modelo de interesse.

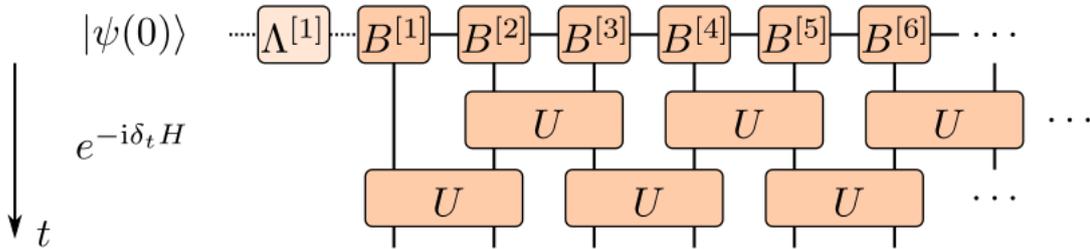


Figura 3.9: Fonte : Hauschild, (2018) [140]

Uma propriedade fundamental de um MPS é a possibilidade de ser implementadas transformações locais nos tensores  $\Gamma$  na forma canônica para operadores unitários [40, 41]. Assim uma transformação unitária  $U$  aplicada em um sítio  $n$  transforma o tensor  $\Gamma$  como

$$\tilde{\Gamma}_{\alpha_n \alpha_{n+1}}^{[n] j_n} = \sum_{j'_n} U_{j'_n}^{j_n} \Gamma_{\alpha_n \alpha_{n+1}}^{[n] j'_n}$$

nesse caso o emaranhamento da função de onda não é afetado, de modo que os valores em  $\Lambda$  não são afetados e a forma canônica do modelo se mantém.

Assim então uma transformação unitária em dois sítios adjacentes  $n$  e  $n+1$  é o que esperamos ao aplicarmos o operador  $U(\delta t)$ . Primeiro, vamos tomar a função de onda expandida na base formada pelo vetor de Schmidt esquerdo  $|\alpha_n\rangle_L$ , a base local  $|j_n\rangle, |j_{n+1}\rangle$  e o vetor de Schmidt direito  $|\alpha_{n+2}\rangle_R$ , que juntos formam o conjunto  $\{|\alpha_n\rangle_L \otimes |j_n\rangle \otimes |j_{n+1}\rangle \otimes |\alpha_{n+2}\rangle_R\}$ . Assim a função de onda pode ser escrita como

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha_n, j_n, j_{n+1}, \alpha_{n+2}} \Theta_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+1}} |\alpha_n\rangle_L |j_n\rangle |j_{n+1}\rangle |\alpha_{n+2}\rangle_R \quad (3.26)$$

com  $\Theta$  o tensor que contém os coeficientes da expansão. Vamos utilizar uma notação mais adequada utilizando a forma canônica mista [44] para os vetores de Schmidt à esquerda e à direita  $|\alpha_n\rangle_L |\alpha_{n+1}\rangle_R$ :

$$|\alpha_n\rangle_L = \sum_{\alpha_n, j_n} A_{\alpha_n \alpha_{n+1}}^{[n] j_n} |\alpha_n\rangle_L \otimes |j_n\rangle, \quad |\alpha_{n+1}\rangle_R = \sum_{j_n, \alpha_n} B_{\alpha_n \alpha_{n+1}}^{[n] j_n} |j_n\rangle \otimes |\alpha_{n+1}\rangle_R \quad (3.27)$$

onde novamente teremos as condições de ortogonalidade  $\langle \alpha_n |_L | \bar{\alpha}_n \rangle_L = \delta_{\alpha_n, \bar{\alpha}_n}$  e  $\langle \alpha_n |_R | \bar{\alpha}_n \rangle_R = \delta_{\alpha_n, \bar{\alpha}_n}$ . Utilizando essa definição, o tensor  $\Theta_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+1}}$  pode ser reescrito como

$$\Theta_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+1}} = \sum_{\alpha_{n+1}} \Lambda_{\alpha_n \alpha_n}^{[n]} B_{\alpha_n \alpha_{n+1}}^{[n] j_n} B_{\alpha_{n+1} \alpha_{n+2}}^{[n+1] j_{n+1}} \quad (3.28)$$

Podemos então aplicar uma transformação unitária de dois sítios em nossa função de onda escrita na base acima, representada no passo (ii) da figura 3.11. Obtemos então

$$\tilde{\Theta}_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+1}} = \sum_{j'_n j'_{n+1}} U_{j'_n j'_{n+1}}^{j_n j_{n+1}} \Theta_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j'_n j'_{n+1}} \quad (3.29)$$

O próximo passo é reescrever o tensor  $\Theta$  como uma matriz  $d_{\chi_n} \times d_{\chi_{n+2}}$  através de um processo comum em manipulação de tensores, concatenando os termos de modo a compor uma matriz com o mesmo número de elementos do tensor. Esse processo é comumente denominado *reshape* na literatura e é extramente comum em métodos de redes de tensores [38, 46]. Seguimos então com uma decomposição de valores singulares (SVD) dessa nova matriz representado pelo passo (iii) na figura 3.11. Essa decomposição é possível pois temos uma base ortonormal no conjunto de vetores à esquerda  $\{|\alpha_n\rangle_L \otimes |j_n\rangle\}$  assim como o equivalente à direita. Assim então agora a matriz

$$\tilde{\Theta}_{j_n \alpha_n; j_{n+1} \alpha_{n+1}} = \sum_{\alpha_{n+1}} \tilde{A}_{j_n \alpha_n; \alpha_{n+1}}^{[n]} \tilde{\Lambda}_{\alpha_{n+1} \alpha_{n+1}}^{[n+1]} \tilde{B}_{\alpha_{n+1}; j_{n+1} \alpha_{n+2}}^{[n+1]} \quad (3.30)$$

onde teremos  $\tilde{A}^{[n]}$  e  $\tilde{B}^{[n+1]}$  são isometrias e  $\tilde{\Lambda}^{[n+1]}$  uma matriz diagonal. A isometria  $\tilde{A}^{[n]}$  se relaciona com o agora novo estado de Schmidt  $|\alpha_{n+1}\rangle$  como uma combinação da base  $|\alpha_n\rangle_L \otimes |j_n\rangle$ . De maneira análoga a os novos estados de Schmidt  $|\alpha_{n+1}\rangle_R$  são obtidos a partir da matriz  $\tilde{B}^{[n+1]}$ . Dessa forma a matriz diagonal  $\tilde{\Lambda}^{[n+1]}$  contém o espectro de Schmidt do estado após a transformação unitária. O último passo (iv) consiste em atualizar os tensores, remodelando as matrizes  $\tilde{A}^{[n]}$  e  $\tilde{B}^{[n+1]}$  de modo a obtermos a forma canônica inicial com os tensores atualizados. Assim teremos

Figura 3.10: Os passos do método TEBD. Primeiro, obtemos a forma da função de onda escrita na base dos vetores Schmidt à esquerda e à direita de um dado sítio  $n$ . Aplicamos então a transformação unitária sob os dois sítios  $n$  e  $n + 1$  de modo a obtermos o tensor  $\tilde{\Theta}$ . Em (ii) temos o processo de modelar o formato do tensor  $\tilde{\Theta}$  em uma matriz com as dimensões  $d_{\chi_n} \times d_{\chi_{n+1}}$  onde seguimos com a decomposição de valores singulares em (iii), mantendo um número máximo de vetores  $\chi_{max}$  seguindo um critério de truncamento adequado. Por fim, introduzindo as isometrias  $\tilde{\Lambda}^{[n+1]}$  e  $(\Lambda^{[n]})^{-1}$  atualizamos os tensores nos sítios  $n$  e  $n + 1$  mantendo a forma canônica do MPS.

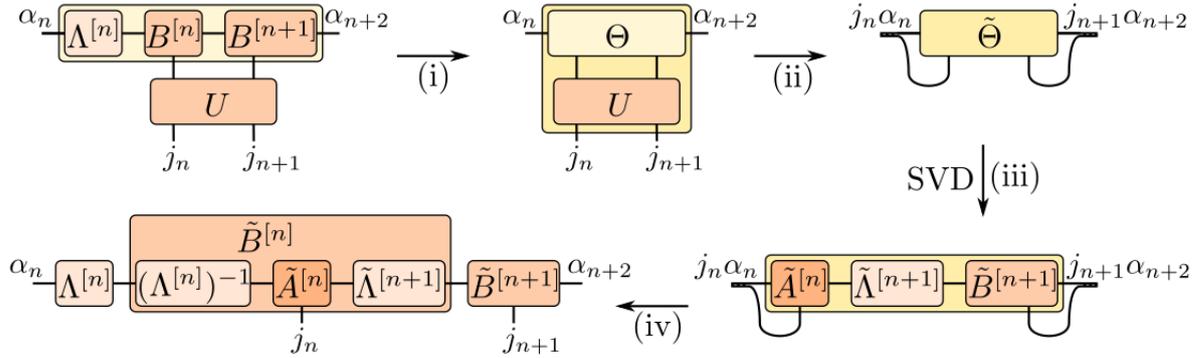


Figura 3.11: Fonte : Hauschild, (2018) [140]

$$\tilde{B}_{\alpha_n \alpha_{n+1}}^{[n]j_n} = (\Lambda^{[n]})_{\alpha_n \alpha_n}^{-1} \tilde{A}_{j_n \alpha_n; \alpha_{n+1}}^{[n]} \tilde{\Lambda}_{\alpha_{n+1} \alpha_{n+1}}^{[n+1]}, \quad \tilde{B}_{\alpha_{n+1}; \alpha_{n+2}}^{[n+1]j_{n+1}} = \tilde{B}_{\alpha_{n+1}; j_{n+1} \alpha_{n+2}}^{[n+1]} \quad (3.31)$$

Após a atualização dos tensores que compõem o estado MPS, mantemos a forma canônica inicial. Um fator importante de mencionar é o fato de o emaranhamento crescer entre os sítios  $n$  e  $n + 1$  uma vez que após a atualização a dimensão de ligação ou *bond-dimensional* cresceu de um fator  $d\chi$  com  $d$  a dimensão local e  $\chi$  a dimensão de ligação inicial entre os sítios  $n$  e  $n + 1$ . De fato, a quantidade de informação após sucessivas aplicações do operador evolução temporal como uma transformação unitária em dois sítios adjacentes cresce exponencialmente. Entretanto, podemos a cada atualização dos tensores que compõe a nossa função de onda impor uma aproximação selecionando somente os  $\chi_{max}$  vetores de Schmidt mais relevantes. Em outras palavras, no passo (iii) representado na figura 3.11, limitamos o o numero de vetores  $\alpha_{n+1}$  a serem somados na equação (3.29) em um valor máximo  $\chi_{max}$ . Essa aproximação então limita as dimensões dos tensores que compõe a nosas função de onda em MPS a  $\chi_{max} \times d \times \chi_{max}$  [43, 133]. Assim temos que escolher um valor da dimensão de ligação  $\chi_{max}$  de modo a minizar o erro de truncamento dado pela expressão

$$\mathcal{N} = \sqrt{\sum_{j_n, j_{n+1}, \alpha_n, \alpha_{n+2}} |\Theta_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+2}}|^2} \quad (3.32)$$

de modo a manter a forma canônica de nossa representação MPS. Entretanto o erro de truncamento  $\mathcal{N}$  é apenas uma das quantidades que temos que avaliar em nossas simulações de modo a obtermos resultados razoáveis. A escolha por exemplo do passo  $\delta t$  temporal

pequeno o suficiente no esquema de evolução temporal seguindo a ordem de decomposição de Trotter-Suzuki também é fundamental. Outra forma de otimizar a precisão de sucessivas decomposições de Schmidt para evoluções em tempo imaginário é reduzir o passo no tempo  $\delta t$  ao passo que o tempo  $\tau$  cresce [43]. Para evoluções no tempo real por exemplo, é sabido que a entropia cresce com o tempo naturalmente no decorrer da simulação de modo a necessitarmos de uma precisão maior para simulações em tempos longos, como critérios de adaptação das quantidades  $\chi_{\max}$  e  $\delta t$  podem ajudar muito na eficiência da simulação [153]. O custo computacional do algoritmo TEBD aplicado a um problema unidimensional escala com  $\mathcal{O}(d^3\chi_{\max}^3)$  e nos dias atuais é um dos métodos mais versáteis e eficientes no estudo de sistemas quânticos interagentes em diversos cenários distintos.

### 3.3.2 O método *Density Matrix Renormalization Group*

Vamos iniciar a detalhar o método DMRG na linguagem de redes de tensores. Antes de partirmos para o método é necessário introduzir o conceito de operador de produto de matrizes (MPO). Um MPO  $\mathcal{O}$  é uma representação generalizada de um dado operador quântico em paralelo com a representação para funções de onda MPS dado por

$$\mathcal{O} = \sum_{\substack{j_1, \dots, j_n \\ j'_1, \dots, j'_n}} \nu^L W^{[1]j_1 j'_1} W^{[2]j_2 j'_2} \dots W^{[N]j_N j'_N} \nu^R |j_1, \dots, j_N\rangle \langle j'_1, \dots, j'_N| \quad (3.33)$$

onde  $W^{[n]j_n j'_n}$  são matrizes  $D \times D$  e  $|j_n\rangle, |j'_n\rangle$  representam a base local no sítio  $n$ . Temos os vetores esquerdo e direito  $\nu^L, \nu^R$  respectivamente determinam a condição de contorno considerada na descrição do nosso modelo [154].

Todo hamiltoniano  $\mathcal{H}$  com interações de tamanho finito pode ser representado exatamente em forma de um MPO com dimensão  $D$ . Vamo tomar como exemplo o hamiltoniano de Heisenberg anisotrópico XXZ sob efeito de um campo magnético externo  $h_n$  dado por :

$$\mathcal{H} = J \sum_n (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + \Delta S_n^z S_{n+1}^z) - \sum_n h_n S_n^z \quad (3.34)$$

podemos expressar o hamiltoniano (3.34) como um produto tensor dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J(S^x \otimes S^x \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S^x \otimes S^x \otimes \dots \otimes \mathbb{1} + \dots \\ & + S^y \otimes S^y \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes S^y \otimes S^y \otimes \dots \otimes \mathbb{1} + \dots \\ & + \Delta S^z \otimes S^z \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \dots) \\ & - h_1 S^z \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes h_2 S^z \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} - \dots \end{aligned} \quad (3.35)$$

onde a representação equivalente de MPO é dada pela matriz [46]

$$W^n = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & S^x & S^y & S^z & -h_n S^z \\ 0 & 0 & 0 & 0 & JS^x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & JS^y \\ 0 & 0 & 0 & 0 & J\Delta S^z \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

onde as entradas são operadores atuando nos sítios equivalentes  $n$  com os índices correspondentes  $j_n, j'_n$  e ainda teremos os valores  $\nu^L$  e  $\nu^R$  dados por

$$\nu^L = (1, 0, 0, 0, 0), \quad \nu^R = (0, 0, 0, 0, 1)^T \quad (3.37)$$

multiplicando então as matrizes  $W^n$  e tomando o produto tensor entre os operadores, recuperamos o hamiltoniano (3.34).

Introduzido o conceito de operador de produto de matrizes, podemos comentar agora o método DMRG em si. O algoritmo consiste em uma aproximação variacional que otimiza a função de onda na representação MPS, minimizando a energia para dado hamiltoniano  $\mathcal{H}$ . A ideia do método é otimizar os tensores de dois sítios vizinhos  $n$  e  $n+1$  para minimizar a energia do estado fundamental  $\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle$  enquanto mantém fixo o resto da cadeia. Este método é denominado "atualização por dois sítios" e é por este que vamos explicar o método com mais detalhes. Iniciamos assumindo que a função de onda  $|\psi\rangle$  está na forma canônica mista em relação a dado índice de cadeia  $n$ , como podemos ver na representação dada na figura 3.13. Nosso objetivo é atualizar os tensores  $A^{[n]}, \Lambda^{[n]}, B^{[n+1]} \rightarrow \tilde{A}^{[n]}, \tilde{\Lambda}^{[n]}, \tilde{B}^{[n+1]}$  enquanto é mantido fixo os outros tensores. Assim como no caso do método TEBD, vamos iniciar o passo (i) contraindo dois tensores de um dado par de sítios vizinhos para obtermos a função de onda inicial para dos sítios descritas pelo tensor  $\Theta_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+1}}$ . A partir da base ortonormal  $\{|\alpha_n\rangle_L \otimes |j_n\rangle \otimes |j_{n+1}\rangle \otimes |\alpha_{n+2}\rangle_R\}$  podemos construir uma função de onda variacional

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\alpha_n, j_n, j_{n+1}, \alpha_{n+2}} \tilde{\Theta}_{\alpha_n \alpha_{n+2}}^{j_n j_{n+1}} |\alpha_n j_n j_{n+1} \alpha_{n+2}\rangle \quad (3.38)$$

onde a função de onda variacional  $|\tilde{\psi}\rangle$  nos permite calcular a energia variacional  $E_{\text{var}} = \langle \tilde{\psi} | \mathcal{H}_{\text{eff}} | \tilde{\psi} \rangle$  para determinar o novo tensor otimizado  $\tilde{\Theta}$ . Aqui  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  é o hamiltoniano do modelo projetado no espaço variacional [140]. Relembramos que o produto dos tensores  $A^{[1]} A^{[2]} \dots A^{[n-1]}$  nos permite obter uma projeção exata da base  $|j_1 j_2 \dots j_{n-1}\rangle$  em  $|\alpha\rangle_L$  e similarmente com os tensores  $B^{[n+2]} \dots B^{[N]}$  mapeia a base  $|j_{n+2} \dots j_N\rangle$  no vetor  $|\alpha_{n+1}\rangle_R$ . É conveniente definir os tensores *environment* à esquerda  $L^{[n]}$  e à direita  $R^{[n+1]}$  de um dado índice  $n$  para contrair parcialmente a rede de tensores necessária para a obtenção da energia variacional. Cada tensor desse tipo é composto por três pernas compostas por um índice  $\gamma_n$  relacionado ao hamiltoniano na forma MPO e outros dois relacionados aos elementos ket e bra da função de onda MPS.

Podemos ver então o hamiltoniano efetivo  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  como uma matriz de dimensões  $\chi_{\text{max}}^2 d^2 \times \chi_{\text{max}}^2 d^2$  de modo que minimizar a energia  $E = \langle \tilde{\psi} | \mathcal{H}_{\text{eff}} | \tilde{\psi} \rangle$  é equivalente a encon-

Figura 3.12: Temos a representação da energia  $E = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle$  em diagramas de tensores com a função de onda  $|\psi\rangle$  escrito como um MPS na forma canônica mista e  $\mathcal{H}$  é dado na forma MPO. As matrizes *environment*  $L^{[n]}$  e  $R^{[n+1]}$  foram obtidas contraindo todos os sítios à esquerda de  $n$  e todos aqueles à direita do sítio  $n + 1$  respectivamente.

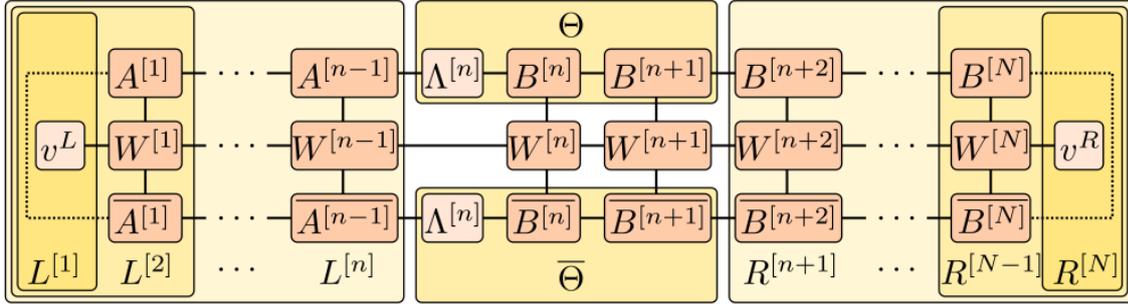


Figura 3.13: Fonte : Hauschild, (2018) [140]

trar o estado fundamental de  $\tilde{\Theta}$  dimensões  $\chi_{\max}^2 d^2$ . Computacionalmente essa tarefa pode demandar um tempo computacional alto a depender do valor máximo de dimensão de ligação  $\chi_{\max}$  considerada, de modo que a implementação de algoritmos de Lanczos [155] é usualmente mais eficiente do que diagonalização exata para  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ .

Figura 3.14: Descrição do hamiltoniano efetivo  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  utilizado para atualizar os tensores nos sítios  $n$  e  $n + 1$ .

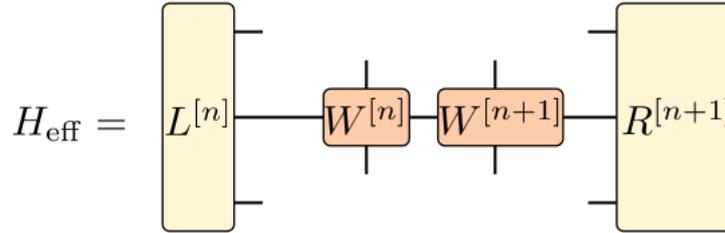


Figura 3.15: Fonte : Hauschild, (2018) [140]

Obtido então o estado fundamental de  $\tilde{\Theta}$  seguimos com a atualização dos tensores  $A^{[n]}$ ,  $\Lambda^{[n]}$ ,  $B^{[n+1]}$  de maneira similar ao esquema de atualização apresentado no método TEBD. Temos um resumo desse esquema na figura 3.17, onde após otimizado o tensor  $\tilde{\Theta}$  é remodelado em uma matriz e fazemos uma decomposição de valores singulares no passo(iii) onde novamente truncamos o índice  $\alpha_{n+1}$  a um valor de dimensão de ligação máximo  $\chi_{\max}$  de modo a evitar o crescimento descontrolado do emanhamento durante o processo. Além disso é importante garantir que os vetores esquerdos e direitos da base de Schmidt  $|\alpha_n\rangle_L$  e  $|\alpha_{n+2}\rangle_R$  são ortonormais, o que vai garantir que o autoestado de  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  detem o autovalor que minimiza a energia  $E = \langle \tilde{\psi} | \mathcal{H}_{\text{eff}} | \tilde{\psi} \rangle$ , logo garantindo o melhor esquema de truncamento para a dada ligação  $n$  e  $n + 1$  que estamos lidando.

Nesse ponto do algoritmo obtivemos uma representação otimizada dos tensores  $\tilde{A}^{[n]}$ ,  $\tilde{\Lambda}^{[n]}$ ,  $\tilde{B}^{[n+1]}$ , porém precisamos ainda continuar atualizando os tensores aos pares ao longo da cadeia. Note ainda que na representação canônica mista que utilizamos consideramos a ligação central entre os sítios  $n$  e  $n + 1$ , de modo que se movermos para a direita a função de onda para os próximos dois sítios temos que utilizar novamente os tensores

Figura 3.16: Esquema do update dos tensores representados nos sítios  $j_n$  e  $j_{n+1}$ . Note que, assim como no método TEBD, é necessário remodelar o tensor  $\tilde{\Theta}$  e seguir com a decomposição de valores singulares do mesmo, controlando assim o crescimento exponencial da dimensão de ligação  $\chi$ .

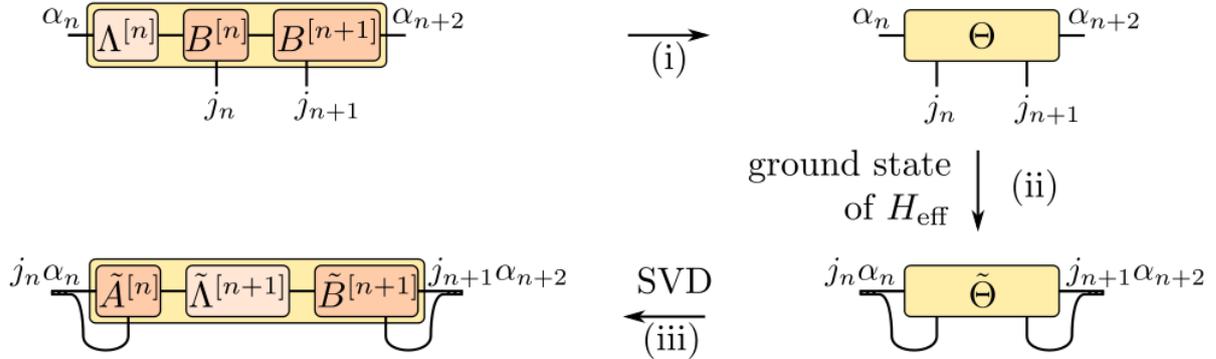


Figura 3.17: Fonte : Hauschild, (2018) [140]

$\tilde{\Lambda}^{n+1} \tilde{B}^{[n+1]} \tilde{B}^{n+2}$  enquanto nos movendo para à esquerda teremos de utilizar os tensores  $\tilde{A}^{[n-1]} \tilde{A}^n \tilde{\Lambda}^{n+1}$  de modo que teremos que obter novamente os nossos tensores *environment*  $L^n$  e  $R^{n+1}$ . Assim, iniciando pelo primeiro sítio à esquerda da cadeia ou pelo último à direita podemos definir os tensores *environment*

$$L_{\alpha_1 \bar{\alpha}_1 \gamma_1}^{[1]} = \delta_{\alpha_1 \bar{\alpha}_1} \nu_{\gamma_1}^L, \quad R_{\alpha_{N+1} \bar{\alpha}_{N+1} \gamma_{N+1}}^{[N]} = \delta_{\alpha_{N+1} \bar{\alpha}_{N+1}} \nu_{\gamma_{N+1}}^R \quad (3.39)$$

onde aqui teremos  $\delta_{\delta_1 \bar{\alpha}_1}$  e  $\delta_{\delta_{N+1} \bar{\alpha}_{N+1}}$  são triviais no caso de condições de contorno abertas. Entretanto, há outras formas de se obter os tensores *environment* recursivamente como podemos ver na figura 3.19. A partir desta regra de recursiva podemos iniciar o processo de otimização para o par de sítios mais à esquerda e ir movendo para à direita da cadeia e depois repetir o processo no caminho inverso. Esse processo é de otimização dos sítios se movendo ao longo da cadeia é denominado *sweeps* e tem um impacto relevante na precisão do método.

Figura 3.18: Forma recursiva para obtenção dos tensores *environment*  $L^n$   $R^{[n+1]}$ .

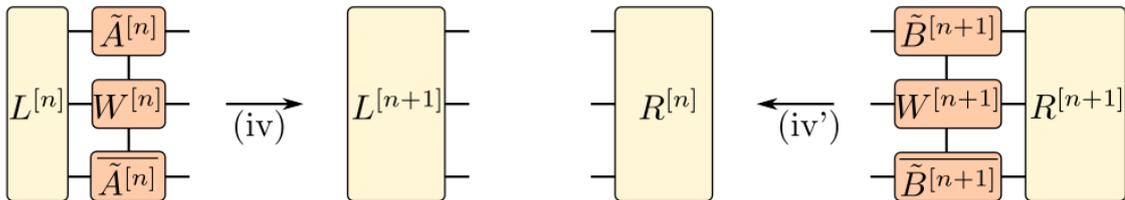


Figura 3.19: Fonte : Hauschild, (2018) [140]

Atualmente há na comunidade científica uma grande quantidade de pacotes numéricos de acesso gratuito que nos permite implementar métodos complexos de forma mais acessível. De fato, há diversos pacotes disponíveis que incluem algoritmos utilizando teoria de redes de tensores onde destaco um dos pioneiros ALPS [54] com versões em Python e em C, TenPy [140] mais moderno e contruido unicamente em Python e o iTen-

sor [55] também atual e com opções nas linguagens de programação Julia e C++. Em nosso primeiro trabalho discutido no próximo capítulo, utilizamos o pacote de algoritmos ALPS [54] escrito em Python v2.x que nos permite implementar códigos como diagonalização exata, DMRG e Monte Carlo quântico com uma curva de aprendizado que permite pesquisadores não especialistas na área utilizar os códigos. Nos trabalhos posteriores discutidos no capítulo cinco, utilizamos o pacote iTensor [55] voltado somente para métodos numéricos advindos da teoria de redes de tensores. Em nosso caso utilizamos a versão do pacote escrito na linguagem Julia.

# Capítulo 4

## Transições de Fases Topológicas no Modelo de Haldane Anisotrópico

Nesse capítulo, iremos investigar algumas propriedades interessantes do modelo de Heisenberg de spin-1 quando consideramos diferentes tipos de anisotropias. Especificamente iremos considerar um modelo onde teremos anisotropia do tipo "Ising" e anisotropia de campo cristalino ou íon-único, que nos leva a um diagrama de fases com diversas fases quânticas interessantes. Obtivemos o diagrama de fases do modelo no espaço de parâmetros  $\lambda - D$  ambos positivos e discutimos um pouco as fases quânticas. Destaco aqui duas linhas críticas de transições de fases quânticas. Nesse sentido, focamos na investigação da linha crítica de transição de fase quântica topológica que separa a fase de Haldane da fase *Large-D* onde propomos um método para caracterizar essa transição de fase a partir de uma forma de escala apropriada. O método tangencial de escala de tamanho finito nos permite caracterizar especificamente transições de fases topológicas que pertencem à classe de universalidade Gaussiana com a obtenção do expoente crítico do comprimento de correlação e o ponto crítico de linha Gaussiana que separa as duas fases topológicas.

### 4.1 O modelo de Haldane anisotrópico

Vimos anteriormente que o modelo de Heisenberg de spin-1, também denominado de modelo de Haldane, apresenta diversas propriedades interessantes tal como estado fundamental desordenado único, gap energético no limite termodinâmico e queda exponencial de sua função de correlação. Tal modelo assim como o modelo AKLT como vimos anteriormente são descritos como realizações teóricas de fases topológicas não triviais [6, 7, 18], uma fase quântica da matéria que não pode ser descrita pela teoria de Landau-Ginzburg a partir de conceitos de parâmetro de ordem local e quebra espontânea de simetria. Ao passo de que a fase de Haldane foi indentificada experimentalmente em materiais reais [77], é importante estudar efeitos de diferentes tipos de anisotropias nas fases quânticas do modelo. Tais efeitos são comuns em materiais reais, uma vez que muitos materiais apresentam uma estrutura eletrônica que não pode ser descrita por interações puramente isotrópicas. Nesse sentido, vamos incluir tipos de anisotropia no modelo de Haldane descritos no

Hamiltoniano :

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N J [(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \lambda S_i^z S_{i+1}^z)] + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 \quad (4.1)$$

onde teremos  $S_i^\alpha$  a componente  $\alpha$  do operador de spin-1 no sítio  $i$ ,  $J$  o parâmetro de controle da interação de *exchange*,  $\lambda$  e  $D$  são as constantes de anisotropia do tipo *Ising* e de campo cristalino respectivamente. Anisotropia do tipo *Ising* promove um desbalanço nas interações no plano  $x-y$  em relação às interações no eixo  $z$ , gerando uma competição entre os termos de "ordenamento" referentes às interações no eixo  $Z$  e os termos de "flutuações quânticas" referentes às interações no plano  $X-Y$  onde podemos ter regimes de surgimento de fases interessantes e transições de fases quânticas não convencionais. Aqui destaco o modelo XXZ de spins- $\frac{1}{2}$ , onde para  $-1.0 < \lambda < 1.0$  temos o regime de líquidos de spin de Tomonaga-Luttinger para sistemas em uma dimensão, com dois pontos críticos em  $\lambda = -1.0$  com uma transição de fases de primeira ordem para um regime ferromagnético e  $\lambda = +1.0$  onde temos a conhecida transição de fases de Kosterlitz-Thouless para uma fase de ordenamento de Néel. Fenomenologia similar ocorre em modelos Ferrimagnéticos de spins interagentes, onde destaco aqui o nosso trabalho no modelo de Heisenberg ramificado [156, 157] onde consideramos um modelo baseado em um composto hetero-trimetálico de célula unitária composta por três centros metálicos, Cobre Ferro e Manganês [88, 91]. O modelo de spin-1 XXZ apenas com anisotropia do tipo Ising no Hamiltoniano 4.1 apresenta uma fenomenologia interessante quando variamos o parâmetro  $\lambda$ . Este apresenta quatro fases fundamentais: a fase Ferromagnética para  $\lambda < -1.0$  onde teremos uma transição de fase de primeira ordem para uma fase de Líquido de Spin exatamente em  $\lambda = -1.0$  [158]. A fase de líquido de spin se mantém no  $(-1.0 < \lambda < 0)$  onde teremos uma transição de fase quântica do tipo Kosterlitz-Thouless entre a fase com excitações sem gap (Líquido de spins) para a fase de Haldane que apresenta excitações com gap energético. Por fim, esta fase se mantém no intervalo  $(0 < \lambda \leq 1.14)$  onde ocorre uma transição de fase do tipo Ising para a fase Antiferromagnética de Néel caracterizada pelo parâmetro de ordem magnetização

$$M_{stag}^\alpha = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (-1)^i \langle S_i^\alpha \rangle$$

ou de forma similar o parâmetro de Néel

$$\mathcal{O}_N^\alpha = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} (-1)^{|i-j|} \langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle$$

ambos finitos nesse caso para  $\alpha = z$  [159].

O termo de anisotropia de campo cristalino também trás efeitos interessantes, uma vez que define um eixo de simetria para o sistema que estamos estudando. Note que apesar da similaridade com o típico termo de Zeeman de campo magnético externo, aqui é definido um eixo de simetria e não uma direção preferencial de modo que os estados de spins de componentes  $S^z \pm s$  são energeticamente equivalentes para esse tipo de interação.

Dessa forma para  $D \rightarrow \infty$  esperamos um estado preferencial de spin onde a componente  $S^z = 0$  por argumentos de minimização de energia no Hamiltoniano 4.1, enquanto para  $D \rightarrow -\infty$  esperamos um ordenamento ferromagnético, novamente de modo a minimizar a energia no Hamiltoniano acima. É de se esperar então transições de fases quânticas entre a fase de Haldane e esses regimes para  $D$  suficientemente grande positivo, levando à fase denominada *Large-D*. Esta fase interessante é o estado fundamental  $|\psi\rangle_0$  do hamiltoniano trivial [18],

$$\mathcal{H}_{tri} = D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2 \quad (4.2)$$

onde o termo trivial se refere ao fato de a fase *Large-D* ser uma realização de uma fase topológica simetricamente protegida trivial e que compartilha de muitas propriedades da fase de Haldane: um estado fundamenta único e desordenado, um gap energético finito no limite termodinâmico e funções de correlações com decaimento como uma lei de potência. Note que apesar de  $|\psi\rangle_0$  pertencer ao setor de magnetização  $S_{total}^z = 0$  isso não implica que o estado fundamental é somente um estado produto  $|\psi\rangle_0 = \bigotimes_1^N |0\rangle$ , uma vez que temos desordem nas orientações das componentes de spins  $S^x$  e  $S^y$ . Uma diferença importante da fase *Large-D* para a fase de Haldane é a ausência de ordenamento oculto na direção  $Z$  capturado pelo parâmetro de ordem *string*

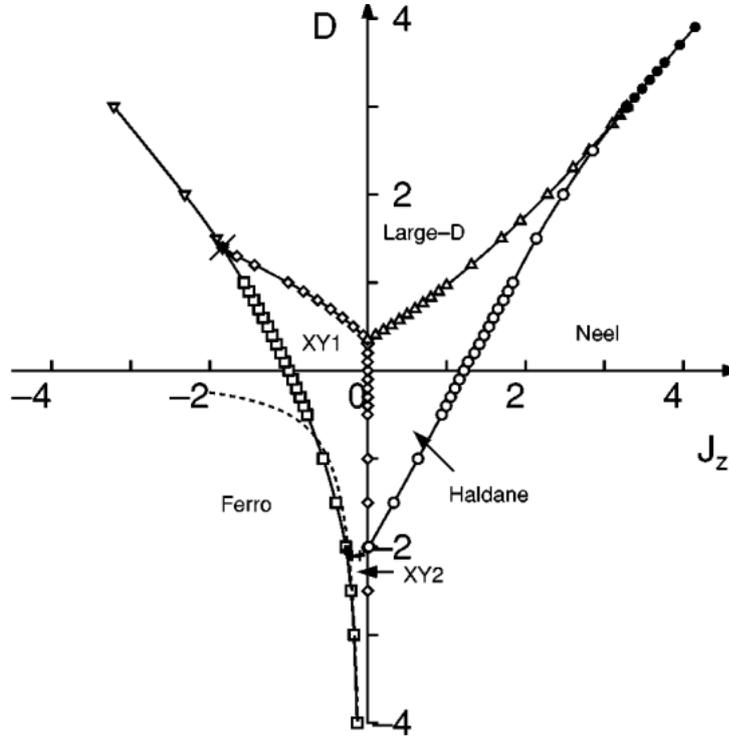
$$\mathcal{O}_S^z = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} - \left\langle S_i^z \exp \left[ i\pi \sum_{l=1}^{j-1} S_l^z \right] S_j^z \right\rangle$$

que é nulo nesta fase e finito na fase de Haldane.

Considerando então os dois tipos de anisotropias podemos obter então um diagrama de fases muito interessante. De fato esse modelo já foi estudado anteriormente [124]. Os autores exploraram o espaço de parâmetros  $\lambda - D$  onde diversas fases interessantes foram identificadas como podemos ver na figura 4.1. Na linguagem dos autores,  $D$  continua sendo o parâmetro referente à anisotropia de campo cristalino enquanto  $J_z$  é o parâmetro de controle das interações anisotrópicas tipo Ising. Como podemos ver no diagrama de fases, obtemos as fases ferromagnética, Haldane, *Large-D*, Néel e as fases críticas XY1 e XY2. As fases ferromagnética e Néel apresentam um ordenamento magnético espontâneo de longo alcance, no primeiro caso com os spins alinhados paralelamente e no segundo caso um alinhamento anti-paralelo. Nesses dois casos teremos ordenamentos magnéticos caracterizados pelos parâmetros de ordem de magnetização total e magnetização de sub-rede respectivamente. Teremos duas fases críticas XY1 e XY2 que são classificadas como líquidos quânticos de spins de Tomonaga-Luttinger [49] que se diferem pela carga central [124] e natureza das excitações elementares [123]. Ainda temos uma linha crítica de transição de fase quântica de primeira ordem separando a fase ferromagnética das fases críticas XY1 e XY2

O diagrama de fases acima foi obtido utilizando métodos numéricos distintos (Lanczos, Grupo de Renormalização da Matriz Densidade) e explorando ideias de análise de escala

Figura 4.1: Diagrama de fases do modelo de Haldane anisotrópico. Diversas fases quânticas discutidas no texto surgem nesse interessante modelo, onde destaca-se a transição de fase topológica entre as fases de Haldane e *Large-D*.



Fonte : W. Chen et al, (2003) [124]

de tamanho finito e teoria conforme de campos [123, 124] que nos permitem computar as linhas críticas de transições de fases de interesse. É nosso foco estudar a região nos espaços de parâmetros para  $J_z$  e  $D$  ambos positivos sobretudo pela transição de fase topológica Gaussiana que temos interesse. Mas antes vamos comentar um pouco sobre como as linhas críticas do tipo Ising são obtidas nesse artigo [124]. Como já dito anteriormente, o parâmetro de ordem da fase de Néel é a magnetização

$$M_{stag}^z = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (-1)^i \langle S_i^z \rangle$$

que é finito nesta fase e vai a zero na fase de Haldane. Dessa forma, é possível estimar a linha crítica de transição de fase entre essas duas fases analisando o comportamento dessa quantidade e também estimar o expoente crítico do comprimento de correlação  $\xi \propto |x|^{-\nu}$  através de análise de tamanho finito [17] para esse quantidade.  $\nu = 1$  caracteriza a classe de universalidade da transição do tipo Ising. Para transições do tipo Ising há um parâmetro de ordem local que consegue caracterizar a classe de universalidade obtendo assim os pontos críticos e expoentes de interesse. Destaco aqui também a linha crítica Gaussiana que separa a fase de Haldane e a fase *Large-D* onde os pontos das linhas críticas são obtidos computando os autovalores dos operadores de paridade  $P$  e translação  $T$  considerando condições de contorno torcidas [160–162]. Apesar de interessante, esse método de condições de contorno torcidas exige implementar condições de contorno não usuais.

## 4.2 Obtenção de diagrama de fases e linhas críticas

Aqui vamos descrever uma outra estratégia que nos permite obter os pontos críticos das linhas de transições de fases Gaussianas e do tipo Ising porém sem utilização de um parâmetro de ordem local. Como já vimos anteriormente, algumas fases da matéria se caracterizam por apresentarem uma diferença energética significativa em seu espectro de energias entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, denominado *gap*. Essa quantidade para fases topológicas é independente do tamanho da cadeia enquanto para outras fases como o estado fundamental do modelo de Heisenberg para spin  $s = \frac{1}{2}$  é inversamente proporcional ao tamanho da cadeia. Os estados fundamentais que descrevem a fase de Haldane, *Large-D* e a fase de Néel não apresentam magnetização espontânea  $M_{total}^\alpha = \frac{1}{N} \sum_i \langle S_i^\alpha \rangle$  com  $\alpha = x, y, z$ . Estas pertencem ao setor de magnetização  $S_{tot} = 0$  que cria um espaço de hilbert de todos os estados possíveis que magnetização total iguais a zero. Assim, a energia do sistema  $E(S, N)$  para um dado setor de magnetização  $S$  e tamanho de cadeia  $N$  o gap energético  $E_s$  é igual a

$$E_s = E_0(1, N) - E_0(0, N) \quad (4.3)$$

onde teremos na prática a diferença de energia entre o estado "triplete"  $E_0(1, N)$  e o estado "singlete"  $E_0(0, N)$ . Por analogia aos estados singlete e triplete para um par de spins  $s = \frac{1}{2}$ , essa quantidade é usualmente referida na literatura como gap de spin [122, 125, 126]. Especificamente em simulações numéricas, o gap para fases do tipo Néel é calculado de forma diferente. No limite termodinâmico, uma fase de Néel é degenerada pois essa fase detêm simetria de inversão  $S^z \rightarrow -S^z$  implicando em nenhuma diferença de energia entre esses dos possíveis estados. Para uma cadeia finita, vamos ter uma diferença entre as duas configurações de energia ao operar  $S^z \rightarrow -S^z$ , de modo que o primeiro estado excitado pertence ao setor de magnetização  $S_{tot} = 0$ , onde o gap neutro  $E_n$  é dado por

$$E_n = E_1(0, N) - E_0(0, N) \quad (4.4)$$

onde  $E_n$  só é efetivamente zero no limite termodinâmico. Podemos então definir quantidades que vão nos auxiliar no encontro dos pontos críticos que desejamos. SEjam  $\Delta_s$  e  $\Delta_n$  o gap escalado de spin e o gap escalado neutro da seguinte forma

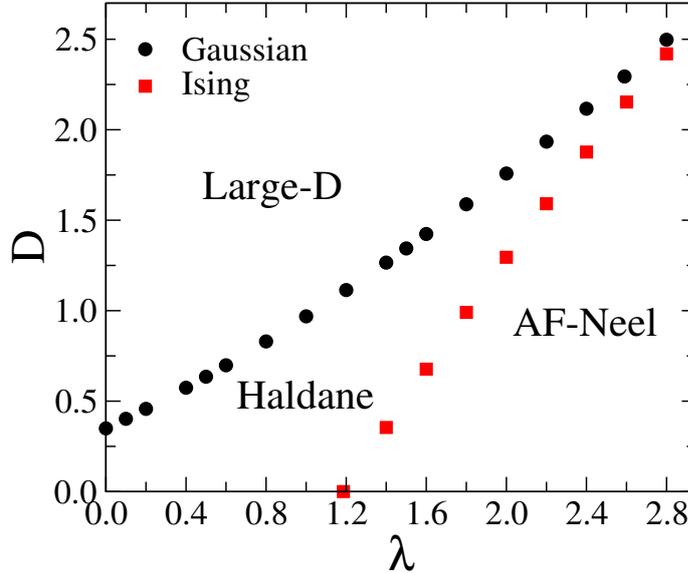
$$\Delta_s = NE_s$$

$$\Delta_n = NE_n$$

com  $N$  o tamanho da cadeia que estamos considerando. Para o gap escalado de spin, teremos que na fase com gap  $E_s \propto O(1)$  que modo que  $\Delta_s \propto N$  e para diferentes tamanhos de cadeias teremos curvas com comportamentos distintos. Entretanto em uma fase crítica teremos excitações não-massivas, que modo que o gap para esse tipo de fase escala com  $E_s \propto O(\frac{1}{N})$  indo pra zero no limite termodinâmico, o que leva a um espectro contínuo. Dessa forma, o gap escalado  $\Delta_s = NE_s \propto O(1)$  no ponto crítico e independente do tamanho da cadeia. Desta forma, o comportamento do gap escalado  $\delta_s$  e  $\delta_n$  para diferentes

tamanhos de cadeias diferentes nos permite determinar os pontos críticos que estamos interessados.

Figura 4.2: Diagrama de fases do modelo descrito pelo Hamiltoniano 4.1 no espaço de parâmetros onde  $\lambda$  e  $D$  positivos. Temos no diagrama de fases duas linhas críticas em destaque, a primeira uma linha Gaussiana que separa duas fases com gap sendo estas as fases de Haldane e *Large-D*. A segunda linha crítica separa a fase de Haldane da fase antiferromagnética sendo uma transição de fases quântica do tipo Ising.



Fonte: Autor, (2021) [53]

Seguindo a estratégia acima, calculamos o gap escalado  $\Delta_s$  e  $\Delta_n$  referentes às transições topológicas Gaussiana, entre a fase de Haldane e a fase *Large-D*, e a transição do tipo Ising entre a fase de Haldane e a fase antiferromagnética de Néel. Temos na figura 4.2 um esboço do diagrama de fases do modelo obtido resolvendo numericamente o Hamiltoniano 4.1 utilizando o método de grupo de renormalização da matriz densidade [145, 146] para uma cadeia de  $N = 100$  spins onde condições periódicas de contorno foram consideradas. Destaco aqui os pontos críticos  $\lambda_c = 1.1862$  para  $D = 0$  que separa a fase de Haldane da fase antiferromagnética de Néel e o ponto  $D_c = 0.3493$  para  $\lambda = 0$  onde teremos uma transição de fases de Kosterlitz-Thouless entre a fase de Haldane e o regime de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger (denominado XY1 no artigo que primeiro obteve o diagrama de fases desse modelo [124]) onde esperamos para essa transição de fase o expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu = \frac{1}{2}$  e o parâmetro  $K = 2$ . Além disso obtivemos as curvas Gaussiana e da transição do tipo Ising até aproximadamente o ponto tricrítico  $D \approx \lambda \approx 3.0$  onde se encontram as linhas já mencionadas e uma linha de transição de primeira ordem entre a fase *Large-D* e a fase antiferromagnética de Néel. Essa última não será objeto de nossa discussão nesse trabalho. Em geral obtivemos um diagrama de fases que concorda muito bem com as estimativas anteriores [123, 124] inclusive nas proximidades do ponto tricrítico. Obtidas as linhas críticas, como podemos caracterizar as transições de fases e determinar a sua classe de universalidade? Explicaremos mais a frente o procedimento que introduzimos em que utilizamos teoria de escala de tamanho finito e a hipótese de escala [14, 78] para obter os expoentes críticos ao longo da linha crí-

tica Gaussianas onde a transição de fase topológica ocorre. Denominamos o procedimento de método de escala de tamanho finito tangencial e iremos discutir o mesmo, mas antes vamos explorar um pouco algumas ideias de teoria de campos que vamos utilizar também nesse trabalho.

### 4.3 Teoria $\sigma$ não linear para transições Gaussianas

Existem algumas formas nas quais podemos representar os graus de liberdade de spins de maneira a inferir o comportamento do modelo de interesse através de modelos efetivos. Esse método é comum no cenário de matéria condensada seja com transformações de spins como as de Holstein-Primakoff [163], Jordan-Wigner [164] ou por obtenção de teorias de campos efetivos através de métodos de Bosonização [49, 50, 75]. Nesse sentido, a representação de estados de spins coerentes [65, 159] pode nos ajudar a reescrever a função de partição canônica para o modelo dado pelo Hamiltoniano 4.1 a temperatura  $T = \frac{1}{k_B\beta}$  usando a representação de integrais de trajetória. Dessa forma, o operador de spin  $S_i$  pode ser representado como uma variável clássica  $S_i \rightarrow S\hat{\Omega}_i$  e, seguindo com a parametrização de Haldane [19, 20, 159],

$$\hat{\Omega}_i = (-1)^{i\hat{n}_i} \sqrt{1 - \left(\frac{\vec{l}_i}{S}\right)^2} + \left(\frac{\vec{l}_i}{S}\right)$$

onde  $\hat{n}_i$  é um vetor de módulo unitário que representa os modos de oscilação lenta com  $\hat{n}_i \cdot \vec{l}_i = 0$  [159]. Utilizando a parametrização de Haldane, podemos tomar o limite semiclássico para  $S$  grande e integrar os modos gerados por  $l_i$  utilizando a representação de integral de trajetória onde obtemos a função de partição

$$\mathcal{Z} = \int [\mathcal{D}\hat{n}] \delta(\hat{n}^2 - 1) \exp^{-S_E - iS_B}$$

onde teremos  $[\mathcal{D}\hat{n}]$  a medida funcional [78] relacionada ao funcional  $\delta$ . Teremos então os seguintes termos na ação acima

$$S_E = \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \left[ \frac{1}{2g} \left( \frac{1}{c} |\partial_\tau \hat{n}|^2 + c |\partial_x \hat{n}|^2 \right) \right] \quad (4.5)$$

onde agora  $\hat{n} = \hat{n}(x, \tau)$  é uma função de duas variáveis no espaço real e no tempo imaginário, com  $g = \frac{2}{S}$  a constante de acoplamento e  $c = 2JS$  a velocidade da onda de spin. Essa ação somente representa um modelo sigma não linear de simetria  $O(2)$  (1+1) no espaço Euclidiano  $(x, \tau)$  e isoladamente representa uma teoria efetivamente sem interações e completamente integrável. O segundo termo  $S_B$  é referente ao termo topológico ou fase de *Berry* [7, 8]

$$S_B = \frac{\theta}{4\pi} \int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \hat{n} \cdot (\partial_\tau \hat{n} \times \partial_x \hat{n}) \quad (4.6)$$

onde nesse caso teremos  $\theta = 2\pi S$ . O termo de fase de Berry é um termo topológico que se relaciona com a carga topológica ou *winding number* que assume valores  $S_B = 2\pi nS$  com  $n$  inteiro de modo que  $\exp^{-iS_B} = 1$  para  $S$  inteiro e  $\exp^{-iS_B} = (-1)^n$  pra  $S$  semi-inteiro [159], de modo que o termo  $S_B$  não pode ser simplesmente ignorado na ação acima e é dependente dos diferentes setores topológicos dados por  $n$ . Essa pequena diferença no termo topológico acima dependente do spin  $S$  reflete também a natureza diferente dos estados de baixas energias desses modelos. Dessa forma, considerando o caso em que teremos  $S = 1$  teremos então uma teoria (1+1) sigma não linear  $O(2)$  que apresenta um estado fundamental único e um espectro de excitação massivo com um gap energético finito e independente do tamanho do modelo. Especificamente o modelo sigma não linear representa bem a física do modelo de Heisenberg no limite contínuo e confirma as conjecturas de Haldane para o estado fundamental do modelo.

De maneira análoga podemos construir uma teoria de campos efetiva para o modelo de Heisenberg XXZ com anisotropia de campo cristalino descrito pelo Hamiltoniano 4.1. Entretanto o diagrama de fases do modelo é rico em diversas fases quânticas distintas onde o modelo sigma não linear não pode ser aplicado dado a natureza do seu estado fundamental. Dessa forma podemos efetivamente obter um modelo sigma não linear mapeando o modelo na rede(4.1) no modelo contínuo com intuito de descrever a transição de fase Gaussiana entre as fases de Haldane e *Large-D* a partir da Langrangeana [123,165]

$$\mathcal{L}_{O(2)} = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{v} (\partial_\tau \Theta)^2 + v (\partial_x \Theta)^2 \right] \quad (4.7)$$

onde reescalamos a variável  $\Theta = \frac{\hat{n}(x,\tau)}{\sqrt{g}}$  com  $g = \frac{1}{S} \sqrt{2(1+D+\lambda)}$  e  $v = S \sqrt{2(1+D+\lambda)}$  onde aqui teremos uma teoria Gaussiana livre com o campo bosônico  $\Theta$  compactado em um círculo de raio  $\frac{1}{\sqrt{g}}$  e  $v$  é a velocidade da onda de spin. Perceba que as quantidades  $g$  e  $\nu$  estão relacionadas diretamente aos parâmetros do Hamiltoniano 4.1 e conectam diretamente o modelo efetivo de teoria de campos no limite contínuo com o modelo da rede descrevendo os pontos da linha crítica de transição de fase Gaussiana. O modelo contínuo 4.7 também descreve uma teoria de campos conforme de carga central  $c = 1$  [50,123,159] onde os seus campos primários  $V_{mn}$  são

$$d_{m,n} = \left( \frac{m^2}{4K} + n^2 K \right)$$

com  $m$  e  $n$  inteiros e relacionados com a magnetização total do modelo na rede e a carga topológica do campo dual à  $\Theta$ . O parâmetro  $K$  é bastante importante para nosso trabalho e se relaciona com o raio de compactação  $K = \frac{\pi}{g}$  [123,159] e há valores específicos que caracterizam pontos críticos de classes de universalidades para transições de fases importantes como a transição de Kosterlitz-Thouless para  $K = 2$ . Para modelos de spins em uma dimensão o parâmetro  $K$  é equivalente ao parâmetro de Luttinger [?] e pode ser estimado diretamente a partir a função de correlação [98,159]

$$\langle S^+(0)S^-(r) \rangle \propto |r|^{-\eta}$$

com  $\eta = 2d_{1,0} = \frac{g}{2\pi} = \frac{1}{2K}$ .

Seja o comprimento de correlação  $\xi = |x|^\nu$  onde aqui  $x$  é a distância ao ponto crítico e  $\nu$  é o expoente crítico que caracteriza a classe de universalidade da transição de fase. Para a transição de fase Gaussiana que é bem descrita por teorias de campos conformes de carga central  $c = 1$  podemos também estimar o expoente crítico  $\nu$  a partir do parâmetro  $K$  dada pela relação

$$\nu = 1/(2 - K) \quad (4.8)$$

a relação acima será importante para nós mais à frente pois nos permitirá estimar um valor de parâmetro  $K$  e por consequência estimar o expoente crítico da transição de fase topológica a partir das estimativas numéricas dos pontos críticos da linha Gaussiana. Veremos que o método que introduzimos nos permite computar de forma efetiva os expoentes críticos  $\nu$  e que estão de acordo com a estimativa da teoria de campos efetiva (1+1) O(2) sigma não linear.

## 4.4 O método de escala tangencial de tamanho finito

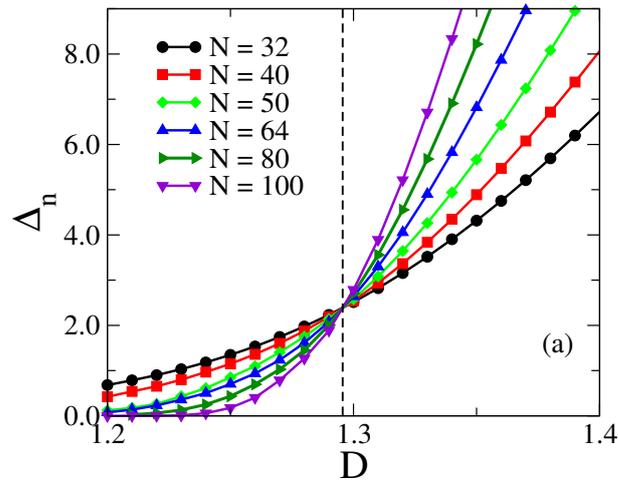
Vamos agora introduzir as ideias que compõe o método de escala tangencial de tamanho finito primeiro dando como exemplo uma classe de universalidade que pode ser caracterizada diretamente apenas evocando a hipótese de escala finita usual. Considere a linha crítica que separa a fase de Haldane da fase antiferromagnética de Neel onde obtivemos os pontos críticos da transição do tipo Ising analisando o comportamento do gap neutro escalado  $\Delta_n$ . Temos da hipótese de escala que em um ponto crítico o sistema é invariante sobre transformação de escala [78] além de que o comprimento de correlação  $\xi \propto |x|^{-\nu} = (D - D_c)^{-\nu}$  diverge e deve ser a única quantidade de escala relevante para descrever o comportamento do ponto crítico [14]. Utilizando então teoria de escala de tamanho finito podemos considerar que o gap neutro escalado é uma função apenas da quantidade  $\frac{\xi}{N}$  nas proximidades do ponto crítico com  $\xi \gg 1.0$ . Dessa forma para diferentes tamanhos de cadeias  $N$  teremos o gap neutro escalado seguindo uma lei universal nas proximidades do ponto crítico dada por [53]

$$\Delta_n = f\left(\frac{\xi}{N}\right) = g\left[(D - D_c)N^{\frac{1}{\nu}}\right] \quad (4.9)$$

onde esperamos que para curvas do gap neutro escalado considerando diferentes tamanhos de cadeia  $N$  que atravessem a transição de fase do tipo Ising tenhamos um valor universal dessa quantidade nas proximidades do ponto crítico. Além disso, dada a expressão 4.9, teremos que a primeira derivada  $\alpha_n = \frac{d\Delta_n}{dD}$  no ponto crítico  $D_c$  escala  $\alpha_n(D_c) = \alpha_n^* \propto N^{\frac{1}{\nu}}$ . Dessa forma seguimos o procedimento para obter o ponto crítico e o expoente para o caso da transição do tipo Ising. Computamos primeiramente o gap neutro escalado variando o parâmetro do Hamiltoniano que leve o sistema a atravessar uma transição de fase para diferentes tamanhos de cadeia e identificamos o ponto crítico  $D_c$  onde o gap neutro

escalado se torna independente de  $N$ . Próximo passo é computar a primeira derivada do gap neutro escalado no ponto crítico  $\alpha = \frac{d\Delta_n}{dD}|_{D_c} = \alpha_n^*$  onde partindo da expressão 4.9 computando essa quantidade para diferentes tamanhos de cadeia  $N$  o plot log-log nos dá uma estimativa o inverso do expoente do comprimento de correlação  $\nu$  através da inclinação da reta.

Figura 4.3: Curvas do gap escalado neutro  $\Delta_n$  na transição do tipo Ising entre as fases de Haldane e Antiferromagnética de Neel para diferentes tamanhos de cadeias  $N = 32, 40, 50, 64, 80, 100$  sob condições periódicas de contorno. Vemos claramente a independência do tamanho da cadeia  $N$  nesta quantidade nas proximidades do ponto crítico o que nos permite identificar o mesmo, neste caso  $D_c = 1.2956(2)$  para  $\lambda = 2.0$ .



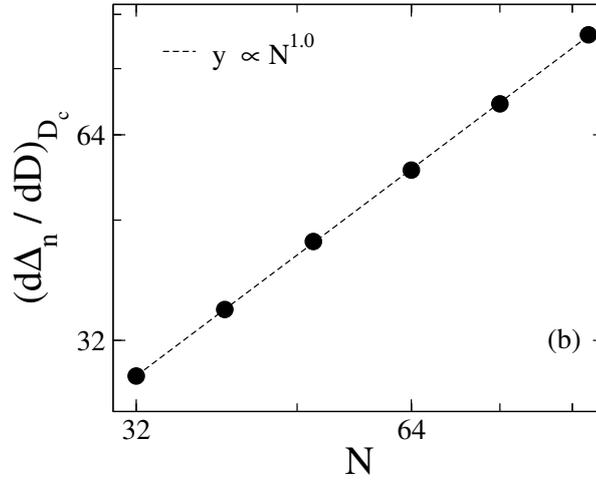
Fonte: Autor, (2021) [53]

O próximo passo e mais importante: obtida uma estimativa do expoente crítico  $\nu$ , podemos utilizar a expressão 4.9 para reescrever o gap neutro escalado em função de uma variável universal onde se as nossas estimativas de expoente crítico estiverem corretas todas as curvas para diferentes tamanhos de cadeia  $N$  irão colapsar em uma curva universal, revelando assim a propriedade fundamental que é a validade da hipótese de escala.

Seguimos esse passo na caracterização da transição do tipo Ising para  $\lambda = 2.0$  onde variamos o parâmetro  $D$  com intuito de obter o ponto crítico  $D_c$  que separa a fase de Haldane da fase antiferromagnética de Néel. Vemos na figura 4.3 o comportamento do gap neutro escalado para diferentes tamanhos de cadeia  $N = 32, 40, 50, 64, 80, 100$  onde condições periódicas de contorno foram consideradas. Vemos claramente o comportamento de  $\Delta_n$  como descrevemos, de modo a nos permitir estimar o ponto crítico  $D_c = 1.2956(2)$  exatamente onde  $\Delta_n$  se torna independente de  $N$  como esperávamos. A figura 4.4 nos deixa claro como podemos obter o expoente  $\nu$  e caracterizar a classe de universalidade da transição do tipo Ising com  $\nu = 1.0$  computando os valores de  $\alpha$  exatamente no ponto crítico. Por fim temos na figura 4.5 a confirmação da boa estimativa que fizemos do ponto crítico  $D_c$  e do expoente  $\nu$

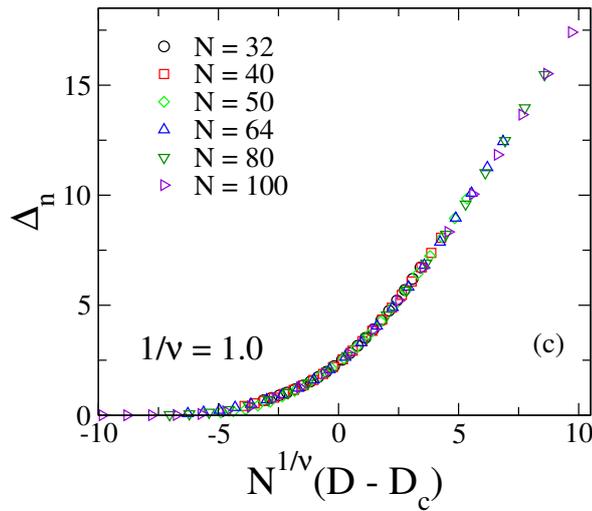
Dessa forma, verificamos que a hipótese de escala fornece um método muito efetivo para caracterizar a transição do tipo Ising que ocorre no modelo. Agora vamos partir para a transição topológica onde teremos um comportamento ligeiramente diferente do

Figura 4.4: Primeira derivada do gap neutro escalado para a transição do tipo Ising para os parâmetros  $\lambda = 2$  e  $D_c = 1.2956(2)$ . Obtemos através dessa estimativa exatamente o expoente crítico da transição do tipo Ising  $\nu = 1.0$ .



Fonte: Autor, (2021) [53]

Figura 4.5: Colapso das curvas do gap neutro escalado  $\Delta_n$  em uma curva universal independente de  $N$  para  $\lambda = 2.0$  e para o ponto crítico estimado  $D_c = 1.2956(2)$ . Tal comportamento revela a invariância sob transformação de escala e atesta qualidade de nossas estimativas de  $D_c$  e  $\nu$ .

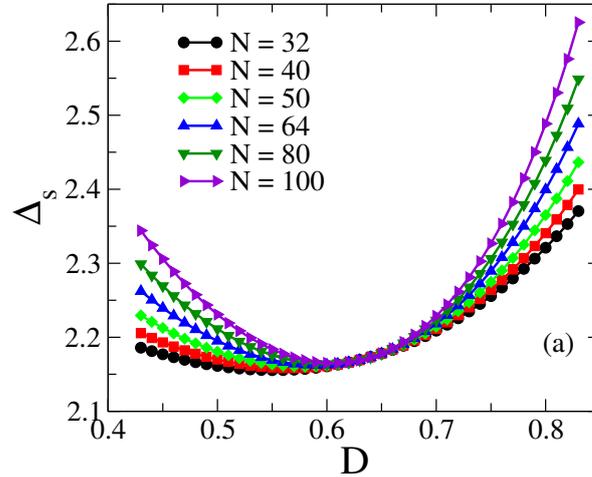


Fonte: Autor, (2021) [53]

gap de spin escalado. Para o caso anterior tínhamos que a nossa função de escala  $g[x]$  ia para zero quando  $x \rightarrow -\infty$  e crescia dependente de  $N$  para  $x \rightarrow \infty$ . No caso da transição Gaussiana teremos um ponto crítico que separa duas fases com gap finito, de modo que fora do ponto crítico teremos uma função de escala que cresce em função de  $N$  para  $g[x] \rightarrow \pm\infty$ . Além disso teremos que o gap escalado de spin  $\Delta_s$  não cruza no ponto crítico como no caso anterior. Neste caso as curvas para diferentes tamanhos de cadeia tangenciam no ponto crítico onde voltam a crescer em função de  $N$  fora do ponto crítico. Essa característica surge naturalmente da natureza da transição Gaussiana com um ponto crítico separando duas fases com gap energético finito no limite termodinâmico, de modo que a forma de escala do gap escalado de spin nas proximidades da transição de

fase topológica é diferente da expressão que propomos para o gap escalado neutro dada por 4.9.

Figura 4.6: Curvas do gap escalado de spin  $\Delta_s$  para diferentes tamanhos de cadeia  $N = 32, 40, 50, 64, 80, 100$  e  $\lambda = 0.5$ . Vemos como o comportamento dessa quantidade apresenta uma forma de escala diferente do caso anterior nas proximidades do ponto crítico Gaussiano, onde as curvas se aproximam e tangenciam somente o ponto crítico.



Fonte: Autor, (2021) [53]

Assim propomos uma forma de escala para o gap escalado  $\Delta_s$  onde consideramos que não somente a forma de escala usual advinda da hipótese de escala há de ser considerada, mas também a primeira derivada do gap escalado de spin há de ser invariante nas proximidades do ponto crítico. Essa proposição nos leva então a seguinte forma de escala para  $\Delta_s$  nas proximidades do ponto crítico Gaussiano,

$$\begin{aligned}\Delta_s &= (D - D_c)\alpha_s^* + f\left(\frac{\xi}{N}\right) \\ &= (D - D_c)\alpha_s^* + g[(D - D_c)N^{1/\nu}]\end{aligned}\quad (4.10)$$

onde agora teremos que  $g[x]$  é quadrática em  $x = 0$  e diverge para  $x \rightarrow \pm\infty$  e usamos a mesma notação de anteriormente com  $\alpha_s^* = \frac{d\Delta_s}{dD}|_{D_c}$ . Note que agora estimamos o expoente crítico  $\nu$  a partir da segunda derivada do gap escalado em  $D = D_c$ , com

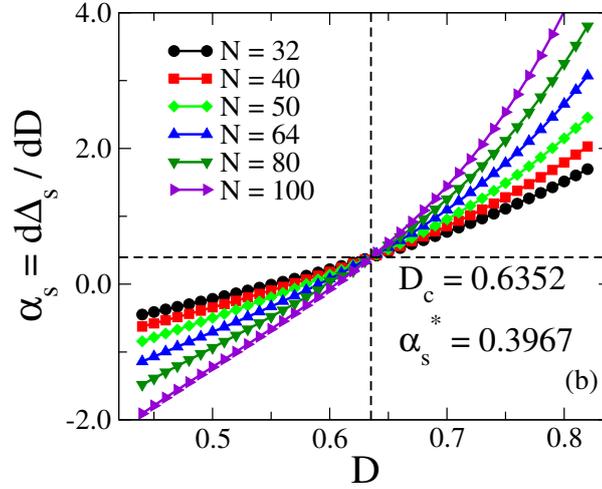
$$\frac{d^2\Delta_s}{dD^2} = \frac{d\alpha_s^*}{dD} = \frac{d^2g}{dD^2} \propto N^{\frac{2}{\nu}} \quad (4.11)$$

assim podemos seguir o procedimento similar ao que fizemos anteriormente para obtermos os pontos críticos da linha Gaussiana e respectivamente os valores do expoente crítico do comprimento de correlação  $\xi \propto |x|^{-\nu}$  ao longo da linha crítica. Vamos descrever os passos para obter essas quantidades, onde o denominamos método de escala tangencial de tamanho finito. Primeiro vamos considerar o caso  $\lambda = 0.5$  e em seguida o caso  $\lambda = 2.0$ .

O primeiro passo do método é obtermos as curvas de gap escalado de spin  $\Delta_s$  para diferentes tamanhos de cadeia variando os parâmetros de interesse de modo a incluir um

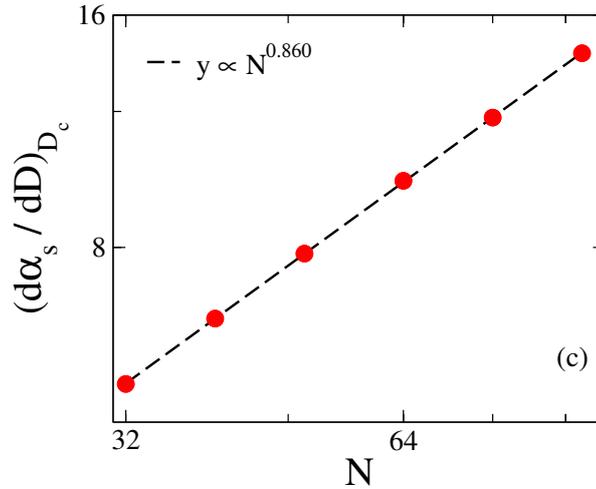
ponto crítico de transição de fase Gaussiana como vemos na figura 4.6 para  $\lambda = 2.0$  e  $D_c$  para ser estimado. A partir dessa curva computamos a primeira derivada do gap escalado de spin  $\alpha_s$  onde podemos obter o valores do ponto crítico  $D_c$  e da primeira derivada do gap escalado no ponto crítico  $D = D_c$  dado por  $\alpha_s^*$ . O terceiro passo é a partir da expressão para a segunda derivada do gap escalado de spin dado por 4.10 obtermos uma estimativa do expoente  $\nu$ , onde vemos na figura 4.8 vemos claramente o comportamento linear da segunda derivada do gap escalado em log-log para diferentes tamanhos de cadeia com  $\frac{2}{\nu} = 0.860$  para  $\lambda = 0.5$ .

Figura 4.7: Primeira derivada do gap escalado de spin  $\alpha_s$  para diferentes tamanhos de cadeia. Veoms claramente um comportamento diferente na forma de escala da transição Gaussiana, onde a primeira derivada do gap escalado também é invariante sob transformação de escala nas proximidades do ponto crítico



Fonte: Autor, (2021) [53]

Figura 4.8: Estimativa do expoente crítico do comprimento de correlação  $\xi \propto |x|^{-\nu}$  a partir da segunda derivada do gap de spin escalado e utilizando a expressão que propomos dada por 4.10.

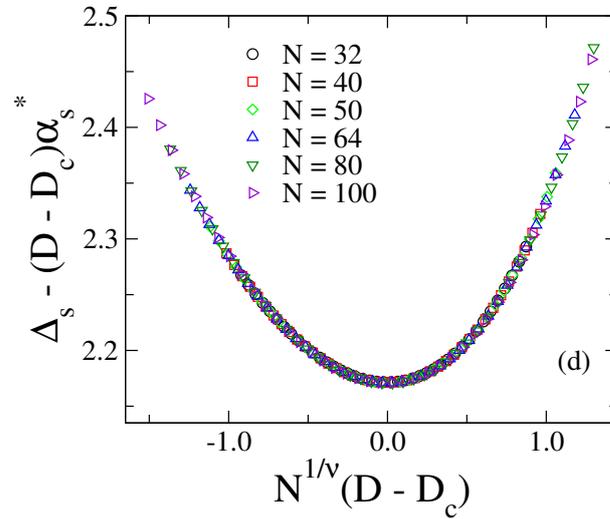


Fonte: Autor, (2021) [53]

Por fim o passo mais importante é checar a validade do método através do colapso das curvas de gap de spin escalado para diferentes tamanhos de cadeia. Dessa forma

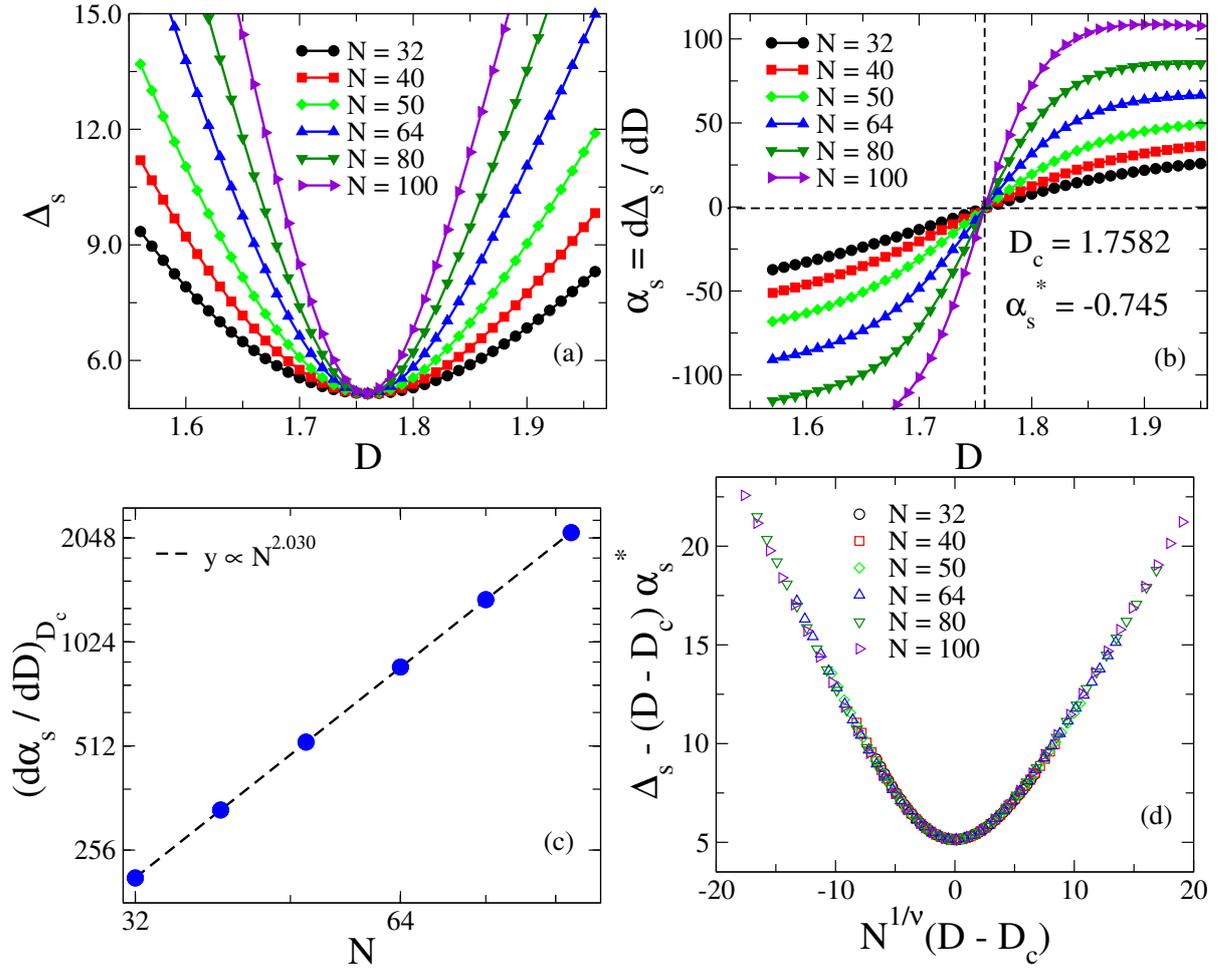
reescrevemos o gap de spin escalado em função da nova variável de escala  $x = (D - D_c)N^{\frac{1}{\nu}}$  porém agora estamos também considerando a contribuição de  $\alpha_s^*$  na forma de escala nas proximidades do ponto crítico Gaussiano. Dessa forma utilizando a relação dada por 4.10 reescrevemos o gap de spin escalado em função de uma quantidade universal independente do tamanho da cadeia  $N$ , onde esperamos que todas as curvas consideradas colapsem em uma curva universal. Vemos claramente a invariância sob transformação de escala do ponto crítico emergir naturalmente analisando a figura 4.9 onde temos todas as curvas obedecendo a lei de escala que propomos, onde estimamos para  $\lambda = 0.5$  um ponto crítico  $D_c = 0.6352(2)$ , a primeira derivada do gap de spin escalado no ponto crítico  $\alpha_s^* = 0.3967(6)$  e um expoente crítico do comprimento de correlação  $\frac{1}{\nu} = 0.430(4)$ .

Figura 4.9: Collapso das curvas de gap de spin escalado para diferentes tamanhos de cadeia e  $\lambda = 2.0$ . Note que as curvas seguem a forma universal de escala que propomos ao reescrevemos o gap de spin escalado em função da variável de escala adequada, revelando a precisão do método de escala tangencial de tamanho finito na caracterização de pontos críticos Gaussianos.



Fonte: Autor, (2021) [53]

Figura 4.10: Acima temos um conjunto de figuras que organizam os passos descritos no método de escala tangencial de tamanho finito nesse caso para  $\lambda = 2.0$ .



Fonte: Autor, (2021) [53]

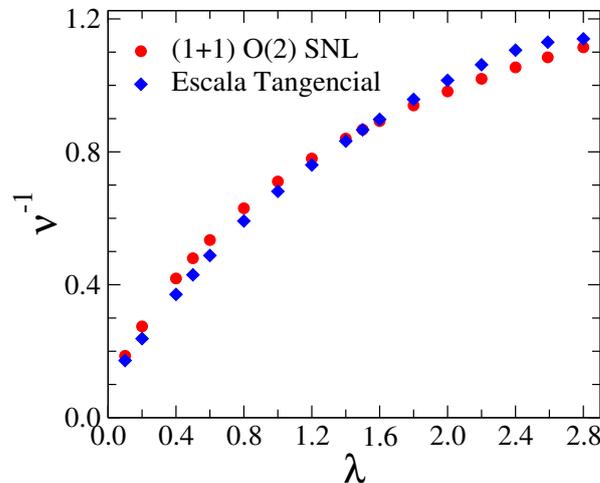
Temos na figura 4.10 resumido os passos do método de escala tangencial de tamanho finito para  $\lambda = 2.0$  novamente para  $N = 32, 40, 50, 64, 80, 100$  e condições periódicas de contorno. Em (a) vemos o gap escalado de spin  $\Delta_s$  para diferentes tamanhos de cadeias onde em (b) podemos identificar o ponto crítico  $D_c = 1.7582(2)$  e  $\alpha_s^* = -0.745(9)$  pelo fato de  $\alpha_s$  também ser independente de  $N$  na proximidade do ponto crítico Gaussiano. Em (c) usamos a expressão que propomos 4.10 para a forma de escala na transição Gaussiano onde podemos estimar o comportamento para a segunda derivada do gap escalado para estivar o valor inverso ao expoente crítico  $\frac{1}{\nu} = 1.015(5)$  e por fim em (d) o colapso das curvas do gap escalado  $\Delta_s$  quando computamos a contribuição de sua primeira derivada  $\Delta_s \rightarrow \Delta_s - (D - D_c) \alpha_s^*$  e escrito em função da variável de escala  $x = (D - D_c)N^{1/\nu}$ . As curvas colapsam em uma curva universal com uma ótima precisão, o que demonstra a efetividade do método em caracterizar tal transição de fase topológica.

Descrita a ideia por trás do método de escala tangencial de tamanho finito e cada passo do mesmo, seguimos obtendo os pontos críticos da linha Gaussiana e caracterizando a transição de fase com a obtenção dos expoentes críticos  $\nu$ . Conseguimos obter os pontos crítico até a proximidade do ponto tri-crítico ( $\lambda \approx D \approx 3.0$ ), onde os efeitos de tamanho finito ficam muito mais pronunciados de modo a afetar a precisão do método. Ficou como perspectiva futura para nosso grupo caracterizar o ponto tricrítico utilizando do método de grupo de renormalização da matriz densidade para tamanhos de cadeias maiores e aumentando bastante os parâmetros de precisão numérica. Nosso intuito agora é comparar o nosso método com a previsão teórica advinda da teoria de campos efetiva do modelo (1+1) sigma não linear O(2), onde através da expressão para o parâmetro  $K = \frac{\pi}{g}$  e a sua relação com o com expoente  $\nu$  teremos que

$$\nu_{SNL} = \frac{1}{2 - K} \rightarrow \nu_{SNL}^{-1} = 2 - \frac{\pi}{\sqrt{2(1 + D_c + \lambda)}} \quad (4.12)$$

onde introduzimos na expressão acima a nossa estimativa para dos pontos ao longo da linha crítica Gaussiana ( $\lambda, D_c$ ). Podemos também obter o valor de  $\nu_{SNL}^{-1}$ . A fim de validar o nosso método fizemos esse procedimento em todos os pontos que obtivemos na linha crítica Gaussiana e o resultado está descrito na figura 4.11. Temos duas curvas para o inverso do expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu$  estimados a partir da expressão 4.12 e através do método de escala tangencial de tamanho finito, onde é evidente a acordância entre as duas estimativas. Como era esperado o expoente  $\nu$  é não universal, comportamento típico da classe de universalidade da transição de fase Gaussiana, e começa a divergir quando se aproxima de  $\lambda = 0.0$  onde a transição de fase de Kosterlitz-Thouless ocorre para  $D_c \approx 0.3493$ , sinalizando a mudança de natureza da transição de fase quântica onde a expressão 4.12 e o método de escala tangencial de tamanho finito não se aplicam.

Figura 4.11: Inverso do expoente crítico do comprimento de correlação obtidos através do método de escala tangencial e a partir da expressão advinda da teoria de campos efetiva (1+1) O(2) sigma não linear.



Fonte: Autor, (2021) [53]

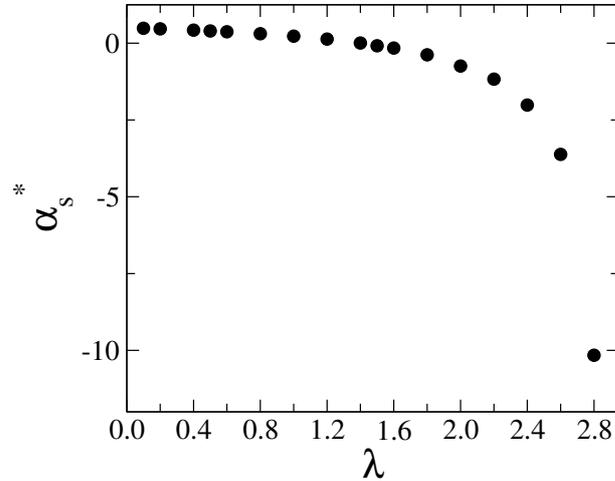
Construímos então uma tabela com todas as nossas estimativas de ponto crítico  $D_c$  para cada  $\lambda$ , primeira derivada do gap de spin escalado  $\alpha_s^*$  no ponto crítico e os expoente  $\nu^{-1}$  e  $\nu_{SNL}^{-1}$  obtidos através do método tangencial e da expressão da teoria de campos efetiva respectivamente. Notamos que a barra de erro cresce substancialmente ao passo que nos aproximamos do ponto tricrítico decorrência natural dos efeitos de escala na proximidade do mesmo. Destaco aqui também como os valores de  $\alpha_s^*$  divergem ao nos aproximarmos do ponto tricrítico como vamos na figura 4.12, o que nos sinaliza a possibilidade de estimar o ponto crítico analisando o comportamento dessa quantidade como perspectiva de um trabalho futuro, pois novamente tamanhos maiores de cadeia e mais precisão numérica são necessários para estabelecer uma boa estimativa do mesmo [53].

$\lambda$	$D_c$	$\alpha_s^*$	$\nu^{-1}$	$\nu_{SNL}^{-1}$
0.10	0.4025(4)	0.4831(1)	0.172(3)	0.1877(3)
0.20	0.4575(3)	0.4648(4)	0.238(6)	0.2745(1)
0.40	0.5741(2)	0.4221(2)	0.371(4)	0.4189(1)
0.50	0.6352(2)	0.3967(6)	0.430(4)	0.4797(1)
0.60	0.6982(3)	0.3691(2)	0.488(2)	0.5346(1)
0.80	0.8298(4)	0.3055(7)	0.592(1)	0.6301(1)
1.00	0.9685(2)	0.2262(2)	0.681(1)	0.7107(1)
1.20	1.1139(3)	0.1305(5)	0.760(1)	0.7797(1)
1.40	1.2658(1)	0.0046(5)	0.832(1)	0.8397(1)
1.50	1.3440(2)	-0.092(8)	0.866(1)	0.8670(1)
1.60	1.4239(2)	-0.161(6)	0.898(1)	0.8926(1)
1.80	1.5881(1)	-0.381(8)	0.958(1)	0.9395(1)
2.00	1.7582(2)	-0.745(9)	1.015(5)	0.9816(1)
2.20	1.9343(1)	-1.171(9)	1.062(3)	1.0196(1)
2.40	2.1162(1)	-2.015(6)	1.106(3)	1.0542(1)
2.59	2.2944(2)	-3.62(8)	1.130(5)	1.0850(1)
2.80	2.4976(3)	-10.5(9)	1.14(1)	1.1148(1)

Tabela 4.1: Valores estimados dos parâmetros de anisotropia  $D_c$ , primeira derivada do gap escalado no ponto crítico  $\alpha_s^*$  e o expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu^{-1}$  obtidos através do método tangencial de escala finita e a estimativa da teoria de campos efetiva [53].

Demonstramos o método de análise tangencial de escala finita utilizando o modelo de Heisenberg XXZ com anisotropia de campo cristalino como cenário ideal para demonstrar o potencial do método em caracterizar a transição de fase topológica entre as fases de Haldane e *Large-D*. Como já mencionado existem outros métodos para tentar obter os pontos críticos [123, 124] como o método de condições de contorno torcidas [160–162] e propostas diversas explorando propriedades de emaranhamento quântico do modelo como forma de escala da entropia de Von-Neuman [166], medidas de Fidelidade [167, 168] entre novas propostas aplicadas a modelos diferentes [169–173]. Dentre as propostas anteriores, destaco a que investigou os efeitos de escala sob a entropia de Von-Neuman [166] para tamanhos de cadeias muito elevados  $L = N^4$  onde os autores buscam reduzir a con-

Figura 4.12: Comportamento da primeira derivada do gap de spin escalado  $\alpha_s$  em função de  $\lambda$  calculada no ponto crítico  $D_c$  de transição de fase Gaussiana. Vemos que para  $\lambda \rightarrow \lambda_c \approx 3.0$  se aproximando do valor estimado na literatura [123, 124] do ponto tricrítico  $\alpha_s^*$  começa a divergir. Exploraremos esse comportamento interessante para estimar o ponto tricrítico desse modelo em um trabalho futuro.



Fonte: Autor, (2021) [53]

tribuição para a entropia de Von Neuman dos modos de borda que existem na fase de Haldane fazendo simulações de larga escala. A estimativa por exemplo dos autores [166] estimaram os pontos críticos  $D_c$  e o expoente crítico  $\nu$  na transição de fase Gaussiana para  $\lambda = 1.0$  onde obtiveram  $D_c = 0.96845(8)$  e  $\nu = 1.472(2)$  como estimativa para as simulações de larga escala. Essa medidas estão de acordo com as nossas estimativas a partir do método tangencial de escala finita, onde obtivemos  $D_c = 0.9685(2)$  e  $\nu = 1.468(2)$  utilizando de cadeias muito menores em nossas simulações com  $N_{max} = 100$ . Os mesmos autores [166] também mostram uma estimativa dessa vez somente do ponto crítico para  $\lambda = 0.5$ , onde obtiveram no ponto crítico Gaussiano  $D_c = 0.6355(6)$  valor este que se aproxima muito de nossa estimativa a partir do método de escala tangencial de tamanho finito  $D_c = 0.6352(1)$ . O método de escala tangencial de tamanho finito se mostra promissor no estudo de transições de fases topológicas em modelos quânticos de spins interagentes. Comparativamente com outros métodos, este tem uma vantagem grande de não precisar de simulações de larga escala para obtenção tanto dos pontos críticos quanto dos expoentes do comprimento de correlação do modelo de interesse, podendo ainda ser colocado a prova a precisão das estimativas a partir do colapso dos dados para o gap de spin escalado.

## 4.5 Conclusões e Perspectivas

Neste capítulo investigamos o diagrama de fases e transições de fases quânticas do modelo de Haldane anisotrópico onde consideramos anisotropias do tipo *Ising* e de campo cristalino no espaço de parâmetros  $(\lambda, D)$  ambos positivos. Obtemos as linhas críticas que separadas as três fases quânticas no diagrama de fases no regime citado, com uma linha Gaussiana separando as transições entre as fases de Haldane e *Large-D* e uma linha do tipo Ising separando as fases de Haldane e antiferromagnética de Néel. Mostramos como a partir a forma de escala do gap neutro  $\Delta_n$  podemos calcular o expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu = 1$  na transição Ising a partir de uma análise de escala finita padrão. Em seguida, introduzimos efetivamente o método de escala tangencial de tamanho finito onde mostramos que no caso da linha crítica Gaussiana a forma de escala do gap de spin  $\Delta_s$  tem um comportamento tangencial, necessitando assim considerarmos um termo de primeira derivada na forma de escala  $g[x]$  para essa transição. Dessa forma, pudemos calcular os expoentes críticos do comprimento de correlação  $\nu$  ao longo de pontos na linha Gaussiana e nossos resultados foram comparados com previsões teóricas obtidas a partir de um modelo efetivo na rede a partir de uma teoria de campos  $\sigma$  não-linear onde observamos uma excelente acordância entre os resultados. O método de escala tangencial de tamanho finito se mostrou eficiente quando comparamos a outros métodos já abordados na literatura [123, 124, 162, 166–168] e especificamente neste trabalho para a transição de fase Gaussiana no modelo Haldane anisotrópico entre as fases de Haldane e *Large-D*. É sabido que a transição de fases entre as fases de Haldane e *Large-D* se trata de uma transição entre uma fase topológica não trivial e uma fase topológica trivial, duas fases com gap energético porém com características bem diferentes quando falamos de emaranhamento e simetrias [21, 24]. Uma das perspectivas é implementar o método para modelos de spins que apresentem transições entre fases topológicas distintas, como por exemplo cadeias ferrimagnéticas tetrâmeras com interações de Heisenberg isotrópicas e alternadas [174–176]. Esse modelo apresenta simetria  $SU(2)$  e temos na literatura exemplos de modelo com interações de Heisenberg alternadas como por exemplo para cadeais de spins  $s = \frac{1}{2}$  [177, 178] e  $S = 1$  [160, 161] apresentam um rico diagrama de fases. O conjunto desses resultados estão publicados na revista *Physical Review B* [53].

# Capítulo 5

## Transições de Fases Topológicas em Cadeias Ferrimagnéticas Tetrâmeras.

Neste capítulo vamos estudar uma classe de modelos representados por hamiltonianos com interações de Heisenberg com interações antiferromagnéticas dimerizadas em cadeias ferrimagnéticas tetrâmeras ( $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$ ) compostas por spins  $S_1$  e  $S_2$  distintos. Para tal implementamos o método numérico DMRG, onde obtemos as nossas quantidades de interesse a temperatura zero na caracterização das fases quânticas do modelo e de seus fenômenos críticos. Inicialmente, vamos estudar o caso da cadeia tetrâmera com spins  $S_1 = \frac{1}{2}$  e  $S_2 = \frac{5}{2}$ , o modelo pode ser entendido como uma cadeia ferrimagnética onde sua célula unitária é composta por dois dímeros de spins  $S_1 - S_1$  e  $S_2 - S_2$  com interações antiferromagnéticas intra-dímeros distinta das interações inter-dímeros. Na segunda parte vamos investigar mais profundamente uma tipo especial de transição de fases que ocorrem nessa classe de modelos de cadeias ferrimagnéticas tetrâmeras onde vamos fixar os spins  $S_1 = \frac{1}{2}$  e consideramos diferentes spins  $S_2$ . A terceira parte vamos estudar uma cadeia tetrâmera interessante que apresenta sucessivas transições topológicas [176] com estrutura dadas por spins  $S_1 = 1$  e  $S_2 = \frac{3}{2}$ , onde investigamos o seu diagrama de fases e discutimos mais a fundo as duas transições de fases topológicas e a sua classe de universalidade.

### 5.1 Introdução

Entre diversos tipos de ordenamentos magnéticos o ferrimagnetismo é o mais comum entre os compostos magnéticos existentes, sendo de fundamental importância investigar materiais que apresentem ordenamentos ferrimagnéticos [91, 92]. Alguns teoremas fundamentam as propriedades do estado fundamental de uma cadeia ferrimagnética e as possíveis fases magnéticas [102, 103], sendo ferramentas fundamentais para o entendimento dessas fases magnéticas mesmo para ordenamento quânticos não triviais que apresentam propriedades topológicas. De fato propriedades de fases topológicas são identificadas em fases de platô magnético a campo nulo [174–176, 179] ou induzidos por campos magnéticos [98, 100]. O teorema de Oshikawa-Yamanaka-Affleck [103] por exemplo nos mostra

quais os critérios de quantização da magnetização em distintos modelos de spins interagentes onde invariantes topológicos como o número de Chern são associados aos platôs de magnetização [180, 181]. Além disso, medidas de funções de correlações não locais podem ser utilizadas para identificar fases topológicas em cadeias ferrimagnéticas como o parâmetros de ordem *string*  $\mathcal{O}_S^\alpha$  [104, 108] e *twist* [18, 182]

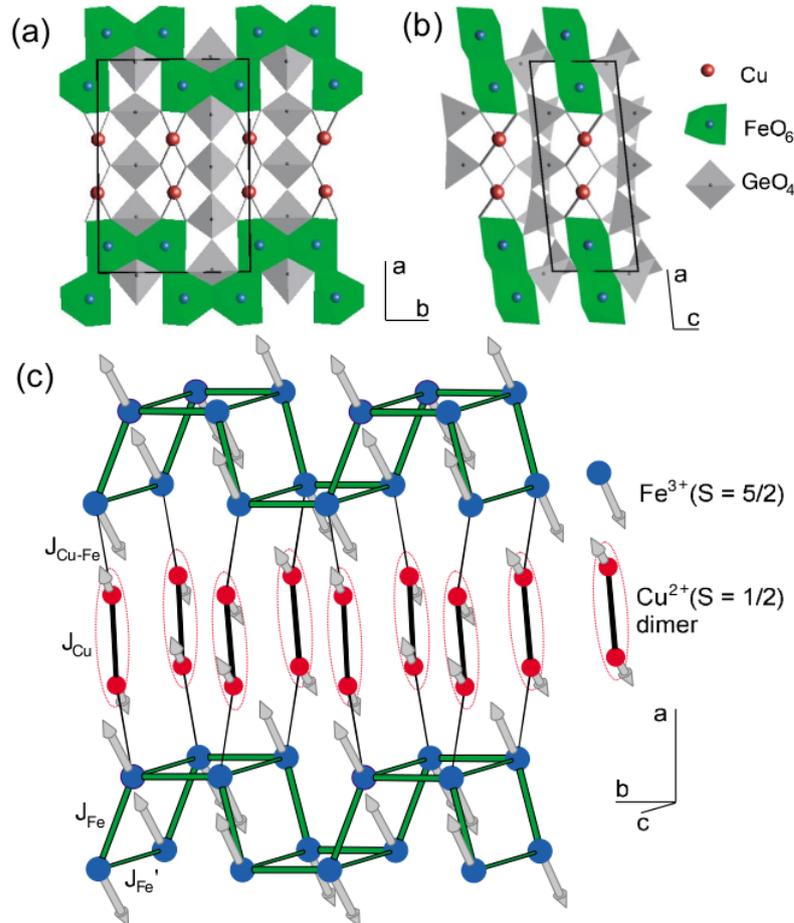
$$U_t = \exp\left[i \frac{2\pi}{N} \sum_{j=1}^N j S_j^z\right]$$

este último introduzido em um estudo do modelo ferrimagnético tetrâmico que apresenta transições de fases topológicas entre fases VBS distintas [182]. Essa nova medida não local se mostrou eficaz na determinação das transições de fases Gaussianas e  $SU(2)_1$  Wess-Zumino-Witten em um modelo de Hubbard estendido onde o hamiltoniano efetivo pode ser mapeado em uma teoria de sine-Gordon [183]. Além disso, medidas do parâmetro de ordem *twist* também foram implementadas em uma investigação extensa utilizando os métodos DMRG e QMC sobre transições de fases topológicas em modelos de cadeias de spins dimerizadas interagentes através do hamiltoniano de Heisenberg alternado para valores distintos de spins [184]. Um trabalho recente demonstrou ainda que a partir de uma extensão do parâmetro de ordem *twist* é possível identificar propriedades topológicas em fases de líquidos de spins de Tomonaga-Luttinger [185].

Um modelo de spin ferrimagnético interessante que vem sendo investigado nas últimas duas décadas é interações de Heisenberg com interações antiferromagnéticas dimerizadas em cadeias de spins ferrimagnéticas tetrâmicas ( $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$ ) compostas por spins  $S_1$  e  $S_2$  distintos. O modelo pode ser entendido como uma cadeia de spins ferrimagnéticos onde sua célula unitária é composta por dois dímeros de spins  $S_1 - S_1$  e  $S_2 - S_2$  com interações antiferromagnéticas intra-dímeros distinta das interações inter-dímeros. Esse modelo inspirou investigações teóricas em diferentes frentes na busca de investigar as possíveis fases quânticas do modelo e fenômenos críticos. Uma primeira proposta do diagrama de fases desse modelo mapeou o hamiltoniano da cadeia ferrimagnética com interações descritas anteriormente em um modelo Sigma não linear e fases com gap foram previstas com excitações não-massivas nas bordas da cadeia [174]. Transições de fases topológicas entre fases VBS distintas também foram investigadas para essa classe de cadeia ferrimagnética tetrâmica ( $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$ ) com spins  $S_1 = 1/2$  e  $S_2 = 1$  utilizando medidas distintas de emaranhamento. No primeiro caso [175] os autores investigaram o comportamento a temperatura finita da negatividades logarítmica para determinar o ponto crítico onde a transição de fase topológica ocorre, onde obtiveram  $\alpha_c \approx 0.768$ . Em um trabalho recente os autores exploraram a forma de escala da susceptibilidade de fidelidade para investigar a transição de fases topológica no mesmo modelo, onde os autores obtiveram medidas do ponto crítico  $\alpha_c = 0.7625$  e do expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu = 0.733$  [179]. Um outro trabalho investigou o modelo de cadeia ferrimagnética tetrâmica com  $S_1 = 1$  e  $S_2 = 3/2$  utilizando o método QMC, onde foi demonstrada a existência de transições de fases topológicas sucessivas para os pontos críticos  $\alpha_{c_1} = 0.479(1)$  e  $\alpha_{c_2} \approx 1.318(1)$  a partir de medidas do parâmetro de ordem  $U_t$ .

Do ponto de vista experimental devemos mencionar o material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$  da família do Germanato que é usualmente mencionado como motivação para o estudo do modelo Ferrimagnético tetrâmero ( $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$ ). Vemos na figura 5.1 [186] a estrutura do material, onde teremos dispostos em linhas ao longo do eixo cristalino  $a$  pares de dímeros dos íons  $\text{Fe}^{3+}$  e  $\text{Cu}^{2+}$  de spins  $S = 5/2$  e  $s = 1/2$  respectivamente com interações de Heisenberg entre os íons de Cobre dadas pelo parâmetro  $J_{\text{Cu}}$ , as interações entre os íons de Ferro por  $J_{\text{Fe}}$  e interações entre os íons Cobre-Ferro por  $J_{\text{Cu-Fe}}$ . Na figura temos em destaque a estrutura do composto em (a) os planos cristalinos  $a$ ,  $b$  e em (b) os planos cristalinos  $a, c$  e em (c) a estrutura efetiva do composto onde os íons e suas interações são destacadas. Esse material fora investigado experimentalmente em diversos trabalhos [89, 90, 187–189], onde fora demonstrado que o material apresenta efetivamente um ordenamento magnético tridimensional, uma vez que apesar de sua estrutura em cadeias de dímeros acopladas através das interações entre os íons de Ferro  $\text{Fe}^{3+}$  nos eixos cristalinos  $b$  e  $c$  são fortes o suficiente para serem desconsideradas em um modelo mais realístico. De fato, experimentos de espalhamento inelástico de neutrões [90] mostraram que enquanto as interações efetivas de troca entre os íons de ferro ao longo dos eixos cristalinos  $a$  e  $b$  são  $J_{\text{Fe}} = 1.60(2)\text{meV}$ , as interações entre os íons de ferro ao longo do eixo  $c$  são bem menos expressivas com  $J'_{\text{Fe}} = 0.12(1)\text{meV}$ . Perceba que mesmo desconsiderando as interações dos íons de ferro menos relevantes ( $J'_{\text{Fe}} \approx 0\text{meV}$ ) ainda assim teríamos acoplamento entre as cadeias de dímeros  $\text{Cu}^{2+}$  e  $\text{Fe}^{3+}$  ao longo do eixo cristalino  $b$  [188, 189]. Dessa forma, apesar de haver menções na literatura ao material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$  como uma motivação experimental para o estudo da cadeia ferrimagnética tetrâmérica, é importante mencionar que isso só pode ser possível que desconsiderarmos uma a interação entre os íons de Ferro ao longo do eixo cristalino  $b$  e tomarmos o limite de cadeias de dímeros desacopladas.

Figura 5.1: Representação da estrutura do material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$ . Em (a) e (b) temos a disposição espacial da rede cristalina do material ao longo dos eixos cristalinos (a,b) e (a,c) respectivamente. Em (c) vemos de fato como os spins dos íons que compõem o material estão dispostos ao longo da rede com cadeias compostas por pares de dímeros de íons  $\text{Cu}^{2+}$  e  $\text{Fe}^{3+}$  com spins  $s = 1/2$  e  $S = 5/2$  respectivamente. As cadeias de dímeros são dispostas ao longo do eixo cristalino  $a$  e são acopladas por interações de troca através das interações entre os íons de  $\text{Fe}^{3+}$  ao longo dos eixos cristalinos  $b(J_{\text{Fe}})$  e  $c(J'_{\text{Fe}})$ .



Fonte: Masuda, T. et al, 2004 [186]

## 5.2 Ordenamento magnético e transição de fase topológica em uma cadeia Ferrimagnética tetrâmera $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$

Nessa sessão vamos discutir o resultado que obtivemos para a cadeia de Heisenberg ferrimagnética tetrâmera  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$  com interações de troca antiferromagnéticas alternadas. Para tal temos como inspiração para investigar as fases quânticas do modelo e fenômenos críticos o material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$  da família do germanato que apresenta em sua estrutura as cadeias de dímeros dos íons de Cobre e Ferro interagentes ao longo de um eixo cristalino e acoplados em uma rede tri-dimensional a partir das interações entre os íons de Ferro. Neste trabalho vamos considerar um modelo simplificado tomando o

limite das cadeias de dímeros desacopladas, tendo ao final de fato cadeias ferrimagnéticas tetrâmeras com seus spins  $s = 1/2$  e  $S = 5/2$  referentes aos íons de Cobre e Ferro respectivamente.

### 5.2.1 O modelo de cadeia tetrâmera $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$

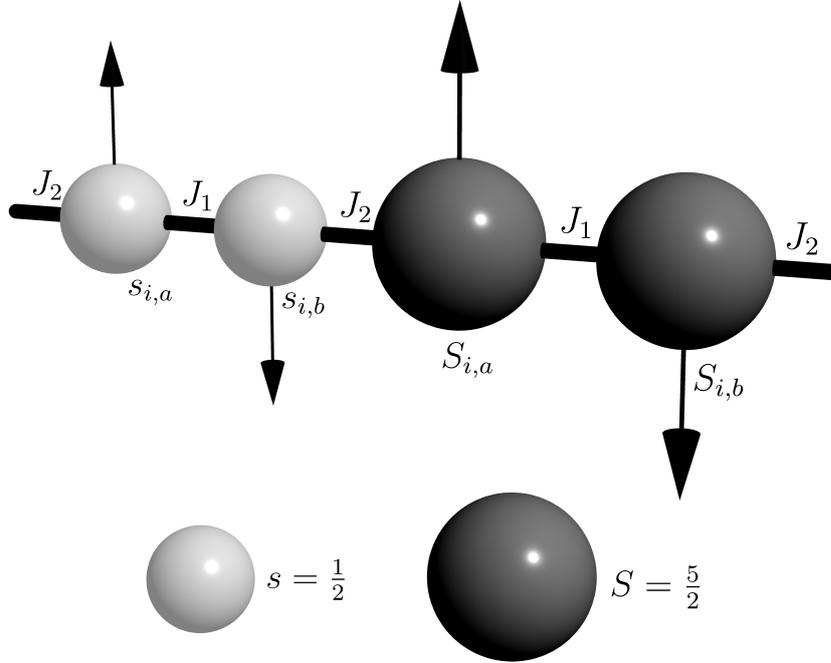
Podemos pensar nesse modelo como uma sequência de pares de dímeros de spins  $s - s$  e  $S - S$  com  $s = \frac{1}{2}$  e  $S = \frac{5}{2}$  que se dispõe em uma cadeia alternadamente com interações de troca intra-dímero  $J_1$  e inter-dímero  $J_2$ , de modo que as interações entre os spins de mesma natureza( $J_1$ ) são diferentes das interações dos spins distintos( $J_2$ )5.2. Dessa forma o hamiltoniano que descreve as interações magnéticas do modelo acima é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N_c} [J_1(\mathbf{s}_{i,a} \cdot \mathbf{s}_{i,b} + \mathbf{S}_{i,a} \cdot \mathbf{S}_{i,b}) + J_2(\mathbf{s}_{i,b} \cdot \mathbf{S}_{i,a} + \mathbf{S}_{i,b} \cdot \mathbf{s}_{i+1,a}) - \mu_0 g B (s_{i,a}^z + s_{i,b}^z + S_{i,a}^z + S_{i,b}^z)], \quad (5.1)$$

onde temos que  $s_{i,\alpha}$  e  $S_{i,\alpha}$  representam os spins  $s = \frac{1}{2}$  e  $S = \frac{5}{2}$  respectivamente com  $\alpha = a, b$  da  $i$ -ésima célula unitária. As interações dos spins é governada pelos termos de troca de Heisenberg de modo isotrópico governado pelos parâmetros  $J_1$  e  $J_2$  ambos positivos, o que implica interações antiferromagnéticas. O efeito do campo magnético aplicado no eixo Z é representado no hamiltoniano (5.1) pelo termo de Zeeman, com  $-\mu_0$  o magneton de Bohr,  $g$  o fator giromagnético e  $B$  o campo magnético aplicado. Em nossas simulações vamos incorporar as constantes  $\mu$  e  $g$  e utilizar a notação  $h = \mu g B$  em nossas figuras e discussões. Além disso somamos os termos das interações entre os spins até o número total de células unitárias que compõe o nosso sistema  $N_c$  onde consideramos o sistema com  $N_c = 32, 48, 64, 80$  para análises de tamanho finito. Para as outras medidas de interesse utilizamos o maior tamanho de cadeia que conseguimos obter numericamente com  $N_c = 80$ (320 spins).

Primeiro investigamos quais são as fases possíveis que esse modelo pode apresentar dada as interações descritas pelo Hamiltoniano(5.1). Nesse sentido construímos um diagrama de fases para o modelo a temperatura zero em função do campo magnético  $h = \mu_0 g B$  e da constante de troca  $J = J_2/J_1$ , onde fixamos a interação  $J_1 = 1.0$  em nossas simulações. Para tal, implementamos o algoritmo DMRG [45, 46, 137] utilizando o formalismo de redes de tensores na representação da função de onda do estado fundamental em EPM. Utilizamos o algoritmo escrito na linguagem de programação Julia [190](especificamente utilizamos a versão 1.6) e criado e administrado pela equipe iTensor [55]. O código disponível nos permite implementar o DMRG efetivo com conservação de números quânticos [55], o que nos permite computar o estado fundamental de um modelo de spins de interesse em um dado setor de magnetização de interesse. Isso é importante, pois nos permite calcular diretamente em quais setores de magnetização podem ocorrer as fases previstas pelo teorema de Oshikawa-Yamanaka-Affleck [103].

Figura 5.2: Representação da célula unitária que compõe a cadeia tetrâmera de Heisenberg. Temos pares de dímeros  $s - s$  e  $S - S$  onde  $s = \frac{1}{2}$  e  $S = \frac{5}{2}$  com interações de troca antiferromagnéticas inter-dímeros e intra-dímeros geridas pelas constantes  $J_1$  e  $J_2$  respectivamente.



Fonte: Autor, (2023)

### 5.2.2 Diagrama de fases e curvas de Magnetização

O diagrama de fases então foi obtido computando diretamente as linhas de transições de fases quânticas a partir das diferenças de energias entre os setores de magnetização onde sabemos previamente que tais fases ocorrem. Para exemplificar o método vamos considerar a célula unitária do modelo que investigamos, onde teremos uma magnetização total de saturação de  $S_{cel}^z = 6$  o que vale seis setores de magnetização por célula unitária. Para uma cadeia com 80 células unitárias (320 spins) teremos um total de  $S_{cadeia}^z = 480$ . A magnetização de saturação  $M_s$  onde todos os spins estão alinhado com um campo magnético aplicado é magnetização máxima que o sistema pode assumir, de modo que a magnetização reduzida  $m = M/M_s = 1.0$  nesse caso. Em termos de setores de magnetização, equivale ao ultimo setor para uma dada cadeia de tamanho  $N$  onde claramente é função do tamanho da cadeia. Para o nosso caso como já vimos o ultimo setor para o nosso sistema com 80 células unitárias equivale a  $S_{sat}^z = 480$  onde partimos daqui para determinarmos os outros setores das possíveis fases de platô de magnetização que podem surgir em nosso sistema. Nos guiando novamente pelo teorema de Oshikawa-Yamanaka-Affleck sabemos que o sistema pode apresentar fases com platô magnético  $0, 1/6, 1/3, 1/2, 2/3,$

5/6 em termos da magnetização reduzida ou o equivalente 0, 1, 2, 3, 4, 5 em termos de magnetização por célula unitária. Dessa forma facilmente podemos identificar os setores de magnetização onde cada platô ocorre se notarmos que os setores de magnetização são divididos em seis partes em relação à magnetização reduzida ( $S_{cadeia}^z = 480$ ). Assim obtemos os setores onde ocorrem cada uma das fases de platô de magnetização 0, 1/6, 1/3, 1/2, 2/3, 5/6 nos setores  $S_{\alpha}^{plato} = 0, 80, 160, 240, 320, 400$  para  $\alpha = 0, 1/6, 1/3, 1/2, 2/3, 5/6$  respectivamente. Seja a energia variacional que obtemos a partir do método DMRG,  $E(N, S_{total}^z)$  com  $N$  o tamanho da cadeia que estamos lidando e  $S_{total}^z$  o setor de magnetização que o sistema apresenta. Uma forma de numericamente simular o campo necessário para um sistema de tamanho fixo  $N$  com uma dada energia  $E(N, S_{total(b)}^z)$  transitar de setor de magnetização para outro de interesse  $E(N, S_{total(a)}^z)$  é calculando numericamente a diferença de energia do sistema nesses setores

$$h = E(S_{total(b)}^z) - E(S_{total(a)}^z)$$

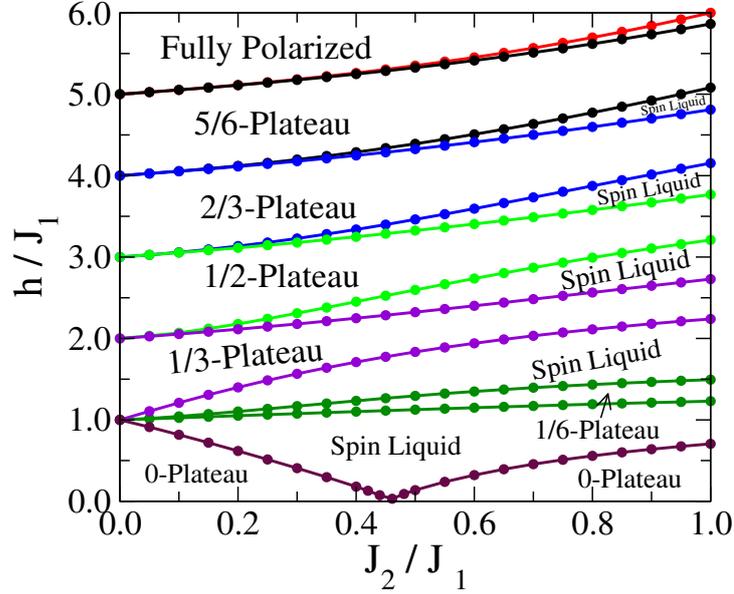
onde ignoramos a variável fixa  $N$  e as energias  $E(S_{total}^z)$  são obtidas sem o termo de Zeeman diretamente no Hamiltoniano (5.1). As linhas críticas que identificam as bordas das fases com gap magnético são obtidas então calculando os campos críticos superior  $h_{\gamma}^{+}$  e inferiores  $h_{\gamma}^{-}$  dados por

$$\begin{aligned} h_{\gamma}^{+} &= E(S_{\gamma} + 1) - E(M_{\gamma}) \\ h_{\gamma}^{-} &= E(S_{\gamma}) - E(M_{\gamma} - 1) \end{aligned} \quad (5.2)$$

com índices  $\gamma = 1/6, 1/3, 1/2, 2/3, 5/6$  referente aos campos críticos que delimitam a fronteira inferior ( $h^{-}$ ) e superior ( $h^{+}$ ) de cada fase de platô magnético  $\gamma$ . Não incluímos a fase de platô zero nessa definição pois como veremos mais a frente esta fase não se enquadra pelo fato de não apresentar campo inferior por ser o estado fundamental do modelo a campo magnético nulo além de ser uma fase topológica que apresenta propriedades distintas das outras fases com gap.

Obtivemos então o diagrama de fases do modelo ferrimagnético de Heisenberg tetrâmero com interações alternadas dada pela figura 5.3. As fases de gap magnético são delimitadas pelas curvas de campos críticos  $h_{\gamma}^{+}$  e  $h_{\gamma}^{-}$  separadas por fases de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger. Neste regime o sistema apresenta excitações não-massivas (sem gap) e suas propriedades de baixas energias são bem descritas utilizando métodos de bosonização do Hamiltoniano de Sine-Gordon [49]. O fato de a fase de líquido de spin ter excitações não-massivas implica diretamente em um crescimento contínuo das curvas de magnetização com o aumento do campo magnético externo, além de o regime em que esta fase aparece se torna cada vez mais estreito ao passo que aumentamos o campo magnético  $h/J_1$ . Uma característica que salta aos olhos no diagrama de fases é o comportamento do da fase de platô de magnetização 0; conseguimos identificar um ponto onde o campo crítico superior que determina a linha que separa esta fase da fase de líquido de spin diminui ao passo que o parâmetro de troca  $J_2/J_1$  aumenta, anulando-se próximo de  $J_2/J_1 \approx 0.456$ . Essa característica indica claramente uma típica transição de fase quântica onde o gap

Figura 5.3: Diagrama de fases do modelo no espaço de parâmetros  $(\frac{J_2}{J_1}, \frac{h}{J_1})$ . Obtivemos seis fases magnéticas de platô de magnetização estritamente de acordo com o teorema de Oshikawa-Yamanaka-Affleck [103]. Com excessão do platô de magnetização 0, todas as outras fases magnéticas com gap são conectadas por fases de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger. Vemos claramente uma transição de fases quântica entre dois mecanismos de formação do platô-0 em  $J_2/J_1 \approx 0.456$  que será discutida posteriormente.



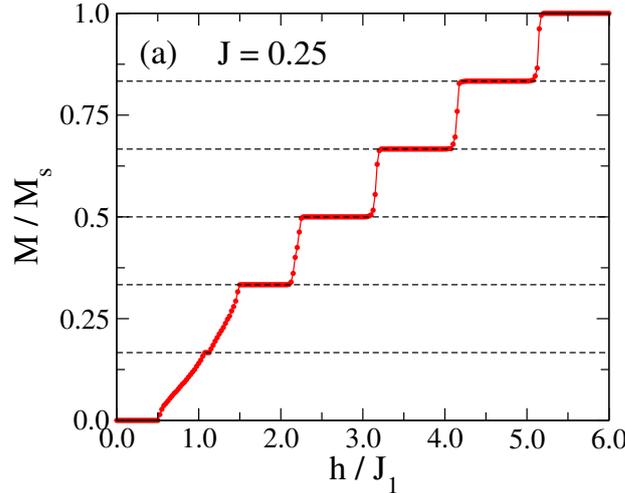
Fonte: Autor, (2023)

energético se anula exatamente em um ponto crítico que separa a fase de platô de magnetização zero em dois regimes com mecanismos de formação desta fase distintos. De fato, olhando somente para o valor da magnetização entre essas fases não vamos conseguir distinguir as duas fases de platô zero e vai ser analisando o perfil das magnetizações da célula unitária  $M_{Cell}$  e magnetização local  $M_{loc}$  que vai nos permitir entender a diferença entre essas duas fases.

Computamos as curvas de magnetização em dois pontos distintos do diagrama de fases para checarmos as fases quânticas que este apresenta. Dessa forma construímos duas figuras 5.4 e 5.5 de curvas de magnetização reduzida  $m = M/M_s$  para dois valores distintos do parâmetro de troca  $J = J_2/J_1$  onde calculamos a magnetização reduzida do modelo para valores de campo magnético  $h/J_1 = (0.0, 6.0)$  com variação de campo  $dh = 0.025$ . No primeiro caso escolhemos um ponto  $J < J_c$  com  $J = 0.25$  e obtivemos a curva de  $m$  em função do campo magnético  $h/J_1$  como podemos ver na figura 5.4. As linhas horizontais destacam as fases de platô de magnetização que ocorrem no modelo. Iniciamos com a fase de platô magnético zero a campo nulo persistindo até um campo crítico  $h/J_1 \approx 0.514$ , onde temos uma transição de fase quântica para o regime de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger. Esse comportamento se repete para as fases de platô de magnetização seguintes, onde vemos o surgimento dos platôs de magnetização 1/6, 1/3, 1/2, 2/3 e 5/6 em ordem separados por uma faixa de líquidos de spin que é cada vez menos pronunciada na região  $J_2/J_1$  pequenos para valores intermediários de campos magnéticos. Obtemos a fase saturada onde todos os spins estão alinhados com o campo magnético

externo  $h/J_1 \approx 5.2$  para este caso.

Figura 5.4: Curva de magnetização reduzida em função do campo magnético  $h/J_1$  para  $J = 0.25$ . Vemos identificadas claramente as fases magnéticas descritas no diagrama de fases onde respectivamente obtivemos as fases de platô 0, 1/6, 1/3, 1/2, 2/3, 5/6 e a fase de saturação com  $\frac{M}{M_s} = 1.0$  com as linhas horizontais destacando cada. Entre as fases de platô temos o regime de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger onde a magnetização cresce continuamente com o campo magnético.

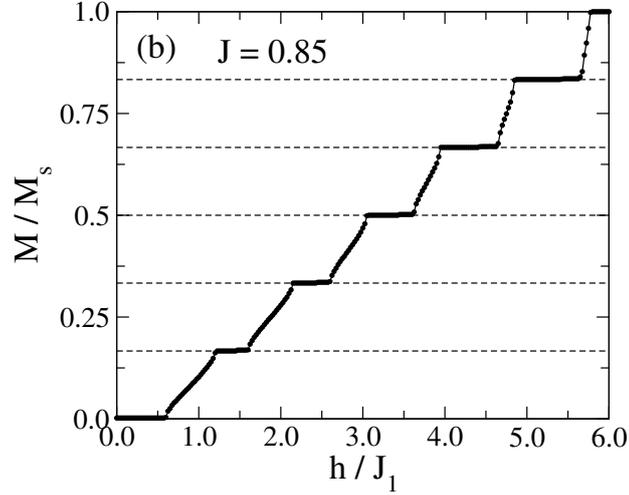


Fonte: Autor, (2023)

Calculamos ainda a curva de magnetização reduzida  $m = M/M_s$  para interações de troca  $J_2/J_1 = 0.85$  acima do ponto crítico  $J_c$  onde vemos na figura 5.5 um comportamento similar à figura 5.4 com destaque a formação de das fases de platô de magnetização nas linhas horizontais. A campo nulo teremos a fase de platô zero como estado fundamental que persiste até um campo crítico  $h/J_1 \approx 0.62$  onde uma transição de fase quântica ocorre para o regime de líquido de spin. Com o crescimento do campo magnético esse comportamento se repete, com a formação das fases de platô magnético 1/6, 1/3, 1/2, 2/3 e 5/6 conectadas por regimes de líquidos de Tomonaga-Luttinger. Neste regime de interação de troca  $J_2/J_1 = 0.85$  o sistema satura a sua magnetização para campo magnético  $h/J_1 \approx 5.575$  onde todos os spins estão alinhados com o campo magnético externo.

Vimos que as curvas de magnetização para os dois valores considerados de interação de troca  $J_2/J_1 = 0.25$  e  $J_2/J_1 = 0.85$  estão de acordo com o nosso diagrama de fase 5.3 no espaço de parâmetros  $\left(\frac{h}{J_1}, \frac{J_2}{J_1}\right)$ . Entretanto, não obtivemos resposta sobre o mecanismo de formação das fases de platô de magnetização zero separadas pelo ponto crítico  $J_c$  analisando a magnetização reduzida. Desta forma vamos expandir a discussão analisando outras medidas de magnetização para o modelo que estamos investigando em busca de entender o mecanismo de formação e a diferença da fase de platô zero para  $J_2/J_1$  abaixo e acima de ponto crítico  $J_c$ . Nesse sentido calculamos a distribuição espacial da magnetização por célula unitária  $M_{cell}$  em função do campo magnético externo  $h/J_1$  novamente para  $J = J_2/J_1 = 0.25$  e  $J = J_2/J_1 = 0.85$  respectivamente. A magnetização  $M_{cell}$  da

Figura 5.5: Curva de magnetização reduzida em função do campo magnético  $h/J_1$  para  $J = 0.85$ . Vemos identificadas claramente as fases magnéticas descritas no diagrama de fases onde respectivamente obtivemos as fases de platôs 0,  $1/6$ ,  $1/3$ ,  $1/2$ ,  $2/3$ ,  $5/6$  e a fase de saturação com  $\frac{M}{M_s} = 1.0$  com as linhas horizontais destacando cada. Entre as fases de platô temos o regime de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger onde a magnetização cresce continuamente com o campo magnético.



Fonte: Autor, (2023)

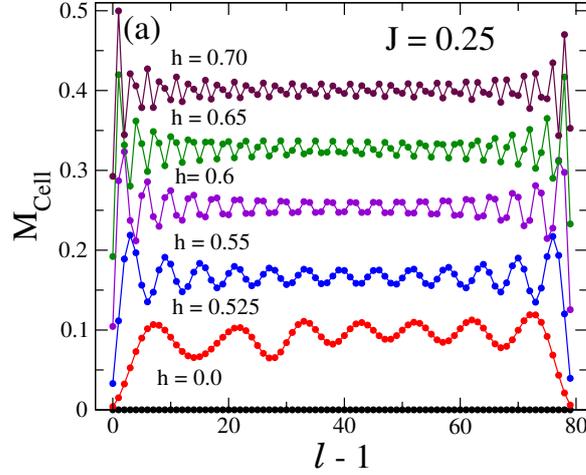
$i$ -ésima célula unitária é dada pela expressão

$$M_{cell}^i = (s_{i,a}^z + s_{i,b}^z + S_{i,a}^z + S_{i,b}^z),$$

onde computamos espacialmente a magnetização por célula unitária para a cadeia tetrâmera com 80 células unitárias (320 spins). Na figura 5.6 temos o perfil de  $M_{cell}$  para valores de campo magnético dentro da fase de platô-0 e imediatamente acima do campo crítico  $h_c$  onde o sistema penetra a fase de líquido de spin. No eixo x temos  $l - 1$  referente ao índice da célula unitária. Na fase de plato zero para interação de troca  $J = 0.25$  vemos na figura 5.6 que o sistema não apresenta magnetização espontânea ao longo de toda cadeia, logo com modos de bordas ausentes. É necessário um campo magnético acima de  $h_c \approx 5.15$  para o sistema apresentar excitações em seu interior (*bulk*) referentes a fase de líquido de spin, onde a magnetização cresce continuamente ao passo que aumentamos o campo aplicado.

Construímos a mesma figura analisando a distribuição espacial  $M_{cell}$  para o caso  $J > J_c = 0.85$  representado na figura 5.7. Vemos claramente que para um valor de campo magnético  $h < h_c$  (com  $h_c \approx 5.575$  neste caso), ou seja ainda na fase de platô de magnetização zero, o sistema apresenta um comportamento diferente do caso anterior. Observamos agora que em seu interior (*bulk*) a magnetização por célula unitária se mantém zero enquanto nas bordas (*edges*) o sistema apresenta excitações magnéticas que penetram o seu interior seguindo uma lei exponencial. Novamente consideramos valores de campo magnético no interior da fase de plato de magnetização e valores imediatamente acima do campo crítico onde o sistema penetra o regima de líquido de Tomonaga-Luttinger. É curioso notar que mesmo para campos magnéticos  $h > h_c$  onde o sistema acessa a fase de líquido de spins, os modos de borda permanecem agora acompanhados de excitações no interior da

Figura 5.6: Perfil de distribuição espacial da magnetização por célula unitária  $M_{Cell}$  ao longo da cadeia para a constante  $J = J_2/J_1 = 0.25$ . Observamos claramente para campo  $h = 0.0$  o sistema não apresenta magnetização espontânea onde esse comportamento persiste até  $h \approx 0.514$ , onde a partir desse valor de campo a magnetização cresce continuamente com o campo magnético no regime de líquido de spin. É importante notar que não observamos estados de borda

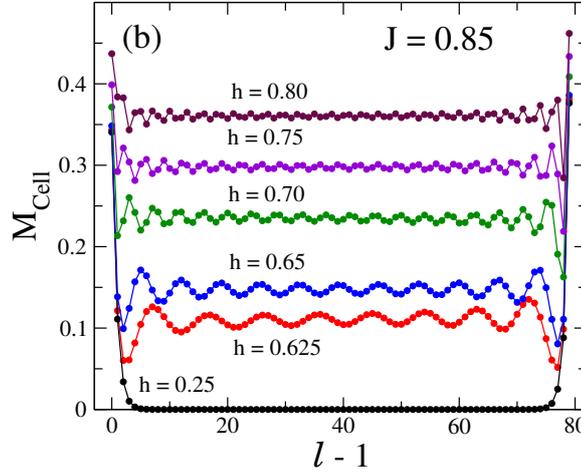


Fonte: Autor, (2023)

cadeia. É importante mencionar também que para campo nulo o sistema apresenta ainda excitações em suas bordas com orientações opostas mantendo o estado fundamental no setor de magnetização zero como era de se esperar. Então um campo magnético pequeno é necessário para excitar um modo da borda de modo a figura ficar simétrica, o que explica a escolha de campo  $h = 0.25$  na figura 5.7.

Buscando entender melhor o ordenamento magnético na fase quântica com gap zero calculamos ainda a magnetizações por célula unitária  $M_{Cell}$  e local  $M_{loc}$  para valores de interações de troca  $J = 0.4$  (abaixo de  $J_c$ ) e  $J = 0.5$  (acima de  $J_c$ ) para setores de magnetização onde possamos identificar o primeiro estado excitado do modelo. Temos na figura 5.8 as magnetizações mencionadas para o setor de magnetização  $S_{total}^z = 1$ , em (a) a magnetização por célula unitária onde vemos claramente uma excitação no interior (*bulk*) da cadeia para  $J = 0.4$  que se distribui espacialmente sendo zero das bordas (*edge*) da cadeia. Na mesma figura temos para  $J = 0.5$  um comportamento diferente, apresentando estados de borda claros que penetram o interior da cadeia seguindo uma lei que decai exponencialmente. As figuras (b) e (c) demonstram a distribuição das magnetizações locais nessas duas fases para  $J = 0.4$  em (b) e  $J = 0.5$  em (c) onde podemos ver como os spins separadamente  $s_1 - s_1$  e  $S_2 - S_2$  se orientam de maneira diferente e explica a permanência dos modos de borda na figura 5.7 quando aumentamos o campo na fase de platô de magnetização zero acima do ponto crítico  $J > J_c$ . Note que para  $J = 0.5$  não temos excitação no interior da cadeia, de modo que no limite termodinâmico os spins virtuais que surgem nas bordas do sistema são livres para condições de contorno abertas. Dessa forma precisamos computar o primeiro estado excitado considerando um estado acima dos estados tripletos compostos pelos estados possíveis entre esses dois spins virtuais  $s' = 1/2$ . Seguindo a mesma ideia computamos também as curvas de magnetizações por célula unitária e locais para o setor de magnetização  $S_{total}^z = 2$  na

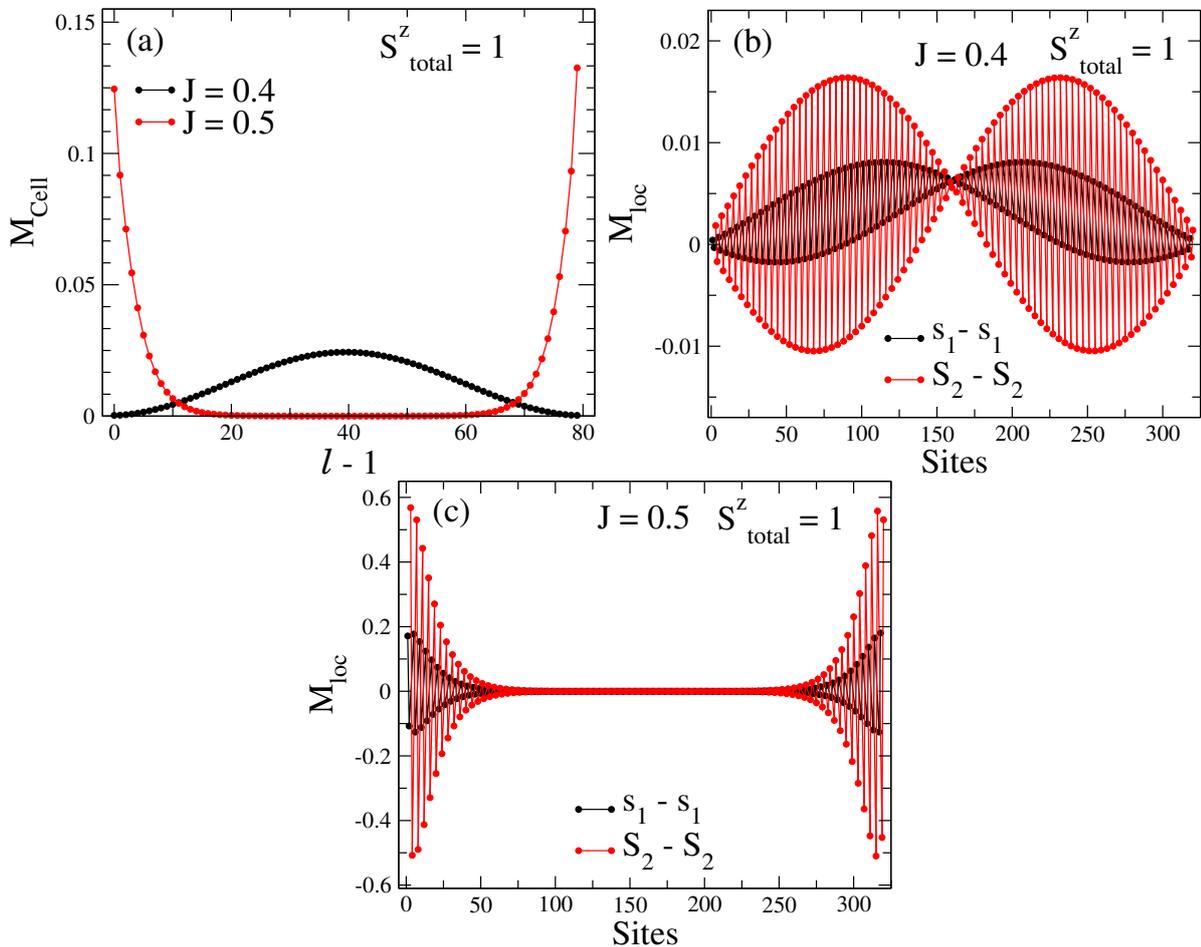
Figura 5.7: Perfil de distribuição espacial da magnetização por célula unitária  $M_{Cell}$  ao longo da cadeia para a constante  $J = J_2/J_1 = 0.85$ . Observamos claramente para campo  $h = 0.0$  o sistema apresenta excitações de borda que persiste mesmo para valores de campo onde penetramos o regime de líquido de spins. Neste regime de platô de magnetização zero então para  $J > J_c$  teremos uma fase topológica não-trivial, com excitações de borda que penetram o interior da cadeia seguindo uma lei exponencial.



Fonte: Autor, (2023)

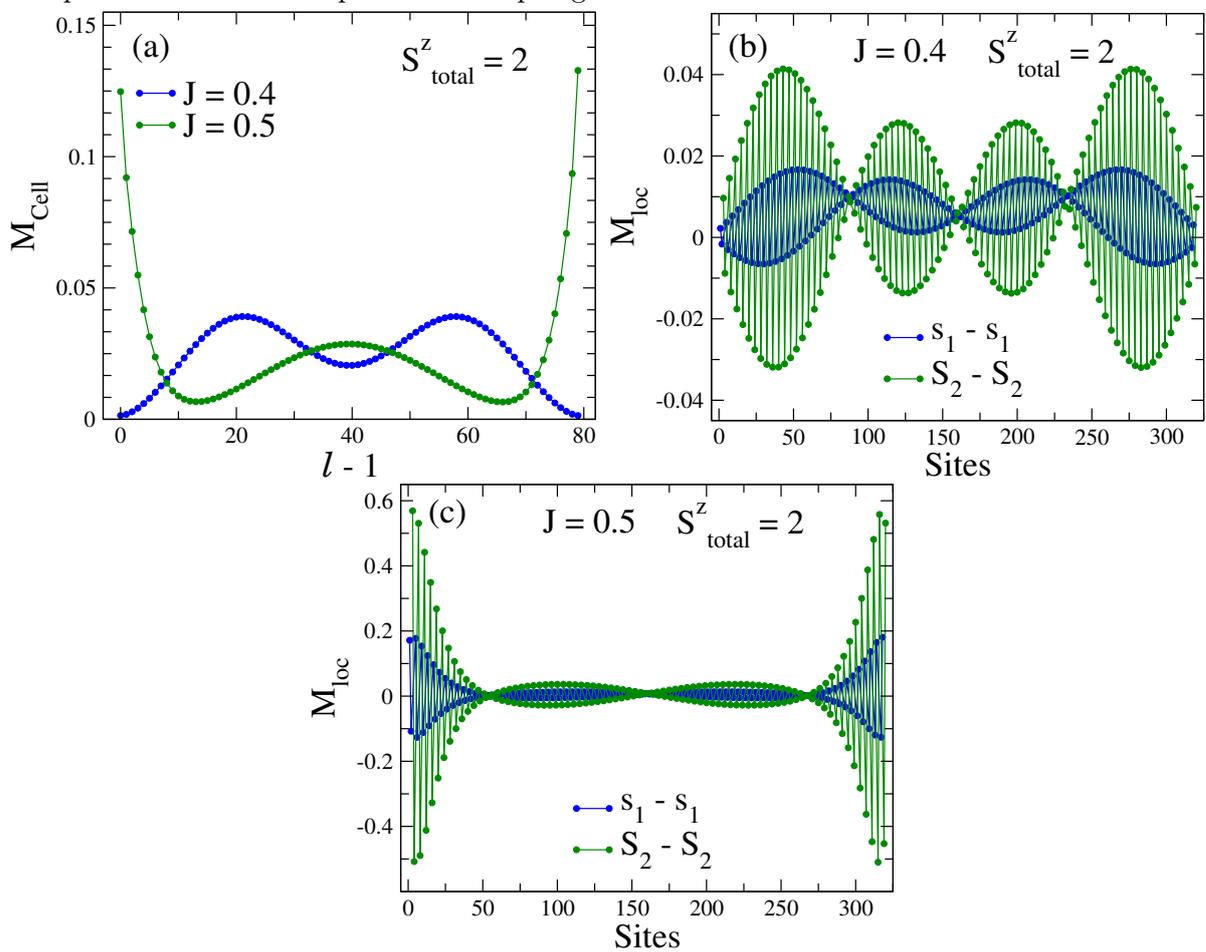
figura 5.9. Em (a) temos a distribuição da magnetização por célula unitária para  $J = 0.4$  e  $J = 0.5$ , onde vemos que a distribuição da magnetização  $M_{Cell}$  para o primeiro caso consiste em duas excitações no interior da cadeia que se distribui espacialmente enquanto no segundo caso vemos a permanência dos estados de bordas, porém agora podemos ver um modo de excitação no centro da cadeia. Em (b) e (c) temos o perfil das magnetizações apresentadas em (a) a nível de ordenamento de spin local, com as cores destacando os spins  $s_1 - s_1$  e  $S_2 - S_2$ , onde agora vemos a formação do dois modos excitados a partir da orientação dos spins locais. A partir dessa figura vemos que o primeiro estado excitado para  $J < 0.4$  parece pertencer ao primeiro setor de magnetização, onde podemos ver claramente um modo excitado no centro da cadeia. Porém para o caso  $J > 0.5$  o primeiro estado excitado aparentemente surge no segundo setor de magnetização, onde vemos um modo surgir no centro da cadeia. É preciso frizar que o primeiro estado excitado neste caso precisa ser independente dos estados dos estados de borda, pois são degenerados no limite termodinâmico [18]. Entretanto, estudando o comportamento do gap de spin para esses casos constatamos empiricamente que há na verdade um estado excitado com energia menor em relação a energia do segundo setor de magnetização, computando na verdade o primeiro estado excitado do primeiro setor de magnetização. Neste caso não há um salto de energia nas curvas de magnetização quando cruzamos o ponto crítico  $J_c$ , de modo que as curvas de gap de spin escalado para diferentes tamanhos apresentam o comportamento adequado quando temos um ponto crítico onde ocorre a transição de fases quânticas separando duas fases quânticas com gap. Esses detalhes referentes a forma adequada em como computar o gap de spin para uma transição de fases topológica ocorre em nosso caso por considerarmos condições de contorno abertas, como vimos no capítulo anterior onde condições de contorno periódicas foram consideradas o gap de spin é calculado corretamente pela diferença de energia entre o primeiro setor de magnetização

Figura 5.8: Perfis de magnetização por célula unitária  $M_{Cell}$  e magnetização local  $M_{loc}$  para valores de interação de troca  $J$  em regimes abaixo ( $J = 0.4$ ) e acima ( $J = 0.5$ ) do ponto crítico  $J_c$ . Em (a) temos a Magnetização por célula unitária obtida para o setor de magnetização  $S_{total}^z = 2$  onde podemos ver um par de excitações no interior da cadeia para  $J = 0.4$  enquanto para  $J = 0.5$  temos tanto os dois modos de borda excitados quanto uma outra excitação no interior da cadeia. Em (b) e (c) vemos as magnetizações locais para esses dois casos, em destaque os spins  $s_1 = \frac{1}{2}$  e  $S_2 = \frac{5}{2}$ , onde vemos em (b) como se distribui os spins individualmente neste caso para a fase topológica trivial enquanto em (c) a distribuição dos spins individualmente para o caso topológico não-trivial.



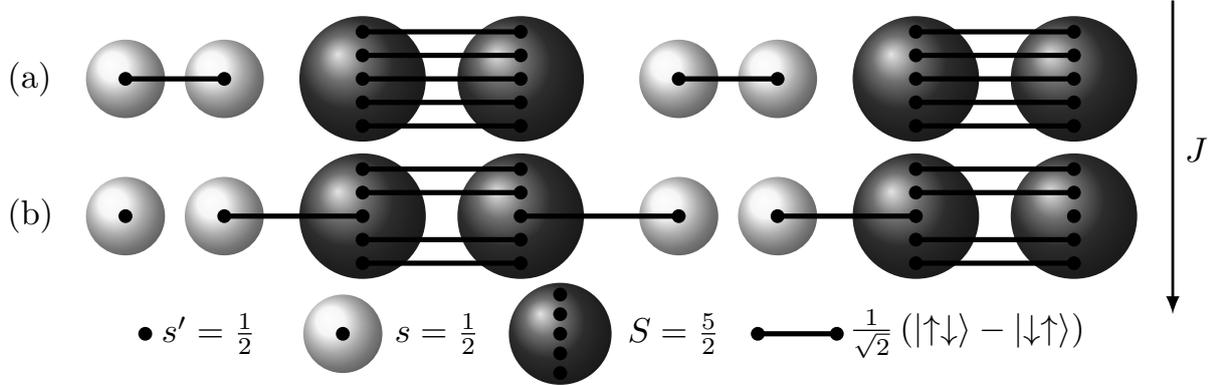
Fonte: Autor, (2023)

Figura 5.9: Perfis de magnetização por célula unitária  $M_{Cell}$  e magnetização local  $M_{loc}$  para valores de interação de troca  $J$  em regimes abaixo ( $J = 0.4$ ) e acima ( $J = 0.5$ ) do ponto crítico  $J_c$ . Em (a) temos a Magnetização por célula unitária obtida para o setor de magnetização  $S_{total}^z = 2$  onde podemos ver uma excitação no interior da cadeia para  $J = 0.4$  enquanto para  $J = 0.5$  temos apenas uma excitação na borda da cadeia. Em (b) e (c) vemos as magnetizações locais para esses dois casos, em destaque os spins  $s_1 = \frac{1}{2}$  e  $S_2 = \frac{5}{2}$ , onde vemos em (b) como se distribui os spins individualmente neste caso para a fase topológica trivial enquanto em (c) a distribuição dos spins individualmente para o caso topológico não-trivial.



Fonte: Autor, (2023)

Figura 5.10: Representação VBS dos estados de platô de magnetização zero para a interação de troca  $J < J_c$  em (a) e  $J > J_c$  em (b). No primeiro caso temos que os spins virtuais descritos pelos pontos pretos formam pares singletos de modo tal qual uma fase topológica trivial. No segundo caso temos uma estrutura de singletos entre os spins virtuais que nos permite identificar modos de borda, tal qual uma fase topológica não-trivial.



Fonte: Autor, (2023)

e o setor de magnetização zero [53].

### 5.2.3 Caracterização da transição de fase topológica

O mecanismo de formação das duas fases de platô de magnetização zero que vimos pode ser entendido a partir da construção VBS para essas fases com gap como vemos na figura 5.10. Para  $J < J_c$  as interações entre os spins de mesma natureza  $s - s$  e  $S - S$  são favorecidas energeticamente de modo que os spins iguais formam pares singletos entre si mantendo a magnetização total do sistema nula. Para os spins  $S = 5/2$  o mesmo fracionaliza em spins virtuais  $s' = \frac{1}{2}$  que formam estados singletos tal qual ocorrem na construção da fase VBS como estado fundamental do modelo AKLT e das fases de Haldane [18]. Entretanto, para o caso  $J < J_c$  temos formação de uma fase topológica trivial, onde os spins virtuais  $s'$  se organizam de modo a não formar estados de borda no sistema, como vemos na figura 5.6 da magnetização por célula  $M_{cell}$  para  $J = 0.25 < J_c$ . No caso  $J = 0.85 > J_c$  o sistema apesar de apresentar uma fase de gap magnético com magnetização total zero, apresenta modos de borda como vemos na figura 5.7 o que caracteriza nesse caso uma fase topológica não-trivial. A Figura 5.10 mostra uma representação de como os pares de spins virtuais se organizam de modo a formar duas fases de platô zero com mecanismos de formação diferentes, com (a) o caso de uma fase topológica trivial e (b) o caso de uma fase topológica não trivial. Tal qual as fases AKLT e de Haldane, essas fases quânticas da matéria compartilham propriedades de caracterização topológica a partir da função de correlação não local  $String \mathcal{O}^\alpha$ . Modelos similares ao que estamos investigando nesse capítulo foram investigados com intuito de identificar as fases topológicas a partir de medidas de  $\mathcal{O}^\alpha$  para o modelo de spin  $s = \frac{1}{2}$  Heisenberg antiferromagnético com interações alternadas [177, 178] e o modelo de spin  $S = 1$  de Heisenberg XXZ dimerizado [?, 160, 161].

Discutimos ao longo do texto o diagrama de fases 5.3 onde vimos uma transição de fases quântica a campo magnético nulo entre duas fases magnéticas com gap energético separados por um ponto crítico  $J_c$  onde o gap energético se anula. Vamos agora caracterizar essa transição de fase entre duas fases topológicas utilizando o método de escala finita tangencial que introduzimos no capítulo anterior. Para tal, primeiro vamos definir o gap de spin  $E_s$  para uma cadeia composta por  $N$  spins interagentes dado por

$$E_s = E_1(1, N) - E_0(0, N) \quad (5.3)$$

onde  $E_1(1, N)$  é a energia do primeiro estado excitado no setor de magnetização  $M^{total} = 1$  e  $E_0(0, N)$  a energia do estado fundamental no setor  $M^{setor} = 0$ . Perceba uma diferença fundamental da definição do gap de spin nesse caso para o apresentado no capítulo anterior onde o gap de spin é definido como a diferença de energias do estado fundamental entre os setores de magnetização  $M^{setor} = 1$  e  $M^{setor} = 0$ . Essa diferença se dá pelo fato de no caso anterior considerarmos condições periódicas de contorno de modo a não mais haver formações de estados de bordas "livres" nesse caso, quebrando assim a degenerescência desses modos. Para esse caso a degenerescência entre os spins efetivos  $s' = \frac{1}{2}$  é  $g = 4$  referentes aos estados singleto e tripleto para os pares  $s'$ , mas para um dado modo de borda de spin efetivo  $s' = S$  e degenerescência  $g = (2S + 1)^2$  [18]. Dessa forma para o caso de condições de contorno abertas precisamos considerar a degenerescência dos modos de borda no cálculo o gap de spin computando então o primeiro estado excitado no setor de magnetização  $S_{total}^z = 1$  que de fato é o primeiro estado excitado do modelo no limite termodinâmico.

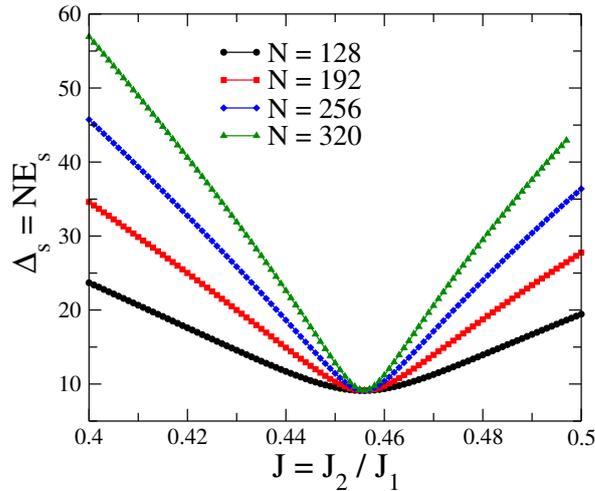
Vimos que o modelo de spin-1 com interações de troca alternadas apresenta uma linha de transição de fase quântica Gaussiana entre duas fases com gap apresenta um ponto crítico interessante que pertence a classe de universalidade de  $SU(2)_{k=1}$  Wess-Zumino-Witten com expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu = 3/2$  neste caso. Dessa forma podemos implementar o método de escala de tamanho finito tangencial introduzido no capítulo anterior para investigar a transição de fase do modelo tetrâmero apresentado onde vamos incluir as correções logarítmicas próprias desse tipo de transição. Dessa forma o comprimento de correlação incorpora a correção logarítmica sendo proporcional da distância ao ponto crítico  $\delta = (J - J_c)$  dada por  $\xi \propto |\delta|/\sqrt{\ln|\delta|}$  de modo que a forma de escala do gap escalado  $\Delta_s$  precisa ser reescrita considerando a correção logarítmica no tamanho efetivo do modelo com  $\tilde{N} = N/\sqrt{\ln N}$  onde teremos

$$\Delta_s = \delta\alpha_s^* + g \left[ \delta\tilde{N}^{1/\nu} \right] \quad (5.4)$$

onde a função de escala  $g \left[ x = \delta\tilde{N}^{1/\nu} \right]$  tem sua forma quadrática para  $x \rightarrow 0$  e diverge para  $x \rightarrow \pm\infty$ . Nesse sentido calculamos o gap spin escalado  $\Delta_s = NE_s$  para diferentes tamanhos de cadeia  $N = 128, 192, 256, 320$  spins varrendo o valor da constante de troca  $J$  no intervalo que  $[0.4, 0.5]$  compreende o ponto crítico  $J_c$ . Vemos na figura 5.11 as curvas de  $\delta_s$  são dependentes do tamanho da cadeia nas fases quânticas com gap, se

tornando independente do tamanho da cadeia somente no ponto crítico onde as curvas para diferentes tamanhos de cadeia tangenciam somente no ponto  $J_c$ . A partir da primeira derivada do gap escalado  $\alpha_s = d\Delta_s/dJ$  podemos obter o ponto crítico  $J_c$ , pois dada a forma tangencial das cruvas de gap escalado a sua primeira derivada também será independente em  $J_c$  onde as cruvas se cruzam. Obtemos ainda o valor da primeira derivada de  $\Delta_s$  em  $J_c$  dado por  $\alpha_s^* = 5.9$

Figura 5.11: O gap escalado  $\Delta_s = NE_s$  para valores da interação de troca  $J = J_2/J_1$  no intervalo  $[0.4, 0.5]$  que compreende o ponto crítico  $J_c$ . Vemos que nas fases com gap energético há uma dependência clara entre  $\delta_s$  e o tamanho de cadeia  $N$ , com as curvas apresentando diferentes comportamentos para  $N$  distintos. Somente no ponto crítico as curvas tangenciam, caracterizando justamente a invariância por transformação de escala do ponto crítico  $J_c$ .

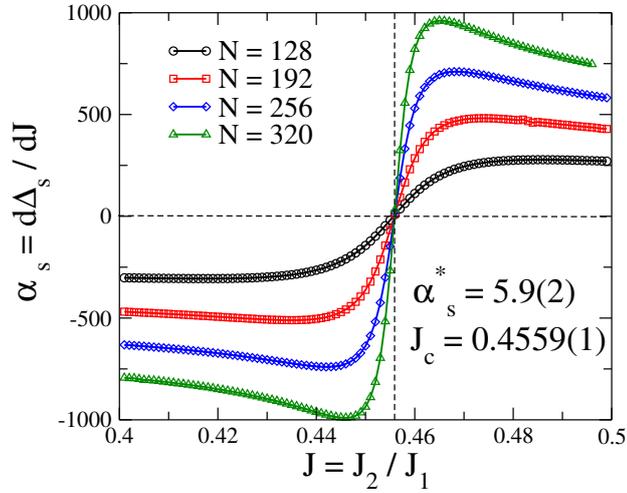


Fonte: Autor, (2023)

Obtidos o ponto crítico e o valor da derivada do gap escalado no ponto crítico, podemos seguir para o cálculo do expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu$  a partir da segunda derivada do gap escalado a partir da forma de escala dada pela equação (5.4) onde temos  $d\alpha_s/dJ = d^2\Delta_s/dJ^2 \propto \tilde{N}^{2/\nu}$  no ponto crítico  $J_c$ . Dessa forma obtemos a figura 5.13 para os tamanhos considerados na cadeia ( $N = 128, 192, 256, 320$ ) onde vemos um comportamento linear dos pontos nem Log-Log com inclinação igual a  $2/\nu = 3.0$ , o que está de acordo com o expoente crítico da transição de fase quântica pertencente a classe de universalidade  $SU(2)_1$  de Wess-Zumino-Witten. Esse resultado é interessante pois mesmo para um hamiltoniano da cadeia tetrâmera ferrimagnética a diferenças entre os spins não parece afetar o comportamento crítico nesta transição de fase quântica. Para validar os resultados obtidos seguimos com o colapso dos dados para o gap escalado em função da forma de escala  $g(x)$  dada pela equação 5.4 onde esperamos que as curvas para diferentes tamanhos de cadeia sigam uma regra universal independente do número de spins considerados. O resultado obtido demonstra comportamento universal esperado em um ponto crítico, onde todas as curvas do gap escalado consideradas para tamanhos de cadeias  $N = 128, 192, 256, 320$  seguem a forma de escala  $g(x)$  com impressionante concordância para o ponto crítico  $J_c = 0.4559$  e expoente crítico  $\nu = 3/2$ .

Os resultados obtidos nessa sessão demonstram que a cadeia tetrâmera ferrimagnética  $(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2})$  apresenta um rico diagrama de fases com destaque para a transição

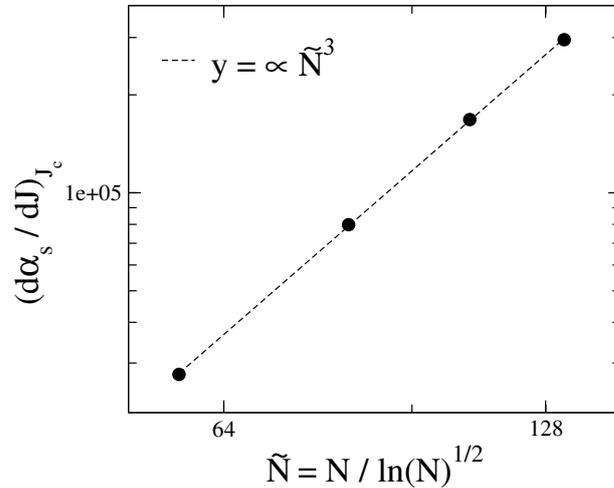
Figura 5.12: Primeira derivada  $\alpha_s$  do gap de spin escalado  $\delta_s$  em relação a interação de troca  $J$  para diferentes tamanhos de cadeia. Novamente vemos que somente no ponto crítico  $\alpha_s$  é independente do tamanho da cadeia  $N$  com um valor finito  $\alpha_s^* = 5.9(2)$ . A partir dessa figura podemos estimar o ponto crítico  $J_c = 0.4559(1)$ .



Fonte: Autor, (2023)

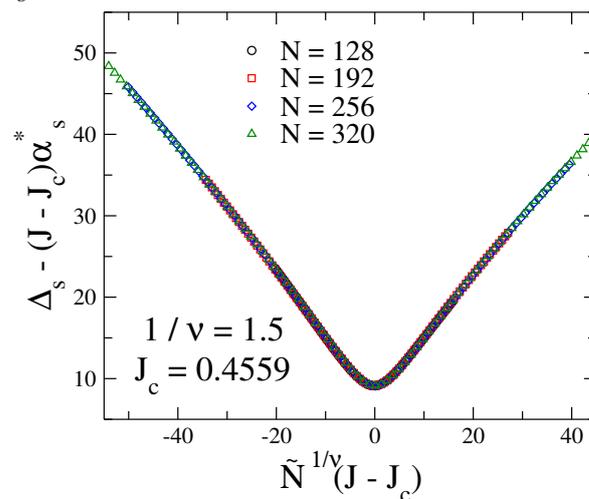
de fase topológica a campo nulo que caracterizamos utilizando o método de escala de tamanho finito tangencial onde obtivemos o expoente crítico  $\nu = 2/3$  referente a transição de fase quântica  $SU(2)_1$  Wess-Zumino-Witten. Uma pergunta que podemos fazer seria, para diferentes configurações de cadeias tetrâmeras ainda obteríamos uma transição de fases topológicas pertencentes a mesma classe de universalidade? Seria a presença do grupo de simetria  $SU(2)$  para esta classe de modelos de Heisenberg com interações de troca alternadas suficientes para esta classe de universalidade surgir? Essas questões serão discutidas na sessão seguinte onde vamos estudar as transições de fases para o modelo tetrâmetro  $s_1 - s_1 - S_2 - S_2$  com  $s_1 = \frac{1}{2}$  fixado e estudamos os casos considerando separadamente spins  $S_2$  de magnitudes diferentes.

Figura 5.13: Temos a segunda derivada no gap escalado  $\alpha_s$  em função da constante de troca  $J$  para os tamanhos de cadeias considerados incluindo a correção logarítmica  $\tilde{N} = N/\ln(N)^{0.5}$ . A linha tracejada  $y$  corresponde a regressão em lei de potências com  $d\Delta_s/dJ_c = \tilde{N}^{2/\nu}$  com  $\nu = 2/3$ .



Fonte: Autor, (2023)

Figura 5.14: Colapso dos dados do gap escalado. Claramente vemos todas as curvas apresentando um comportamento universal de acordo com a função de escala  $g(x)$ , revelando a invariância de escala no ponto crítico  $J_c$ .



Fonte: Autor, (2023)

### 5.3 Universalidade das Transições de fases em cadeias Ferrimagnéticas Tetrâmera $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$

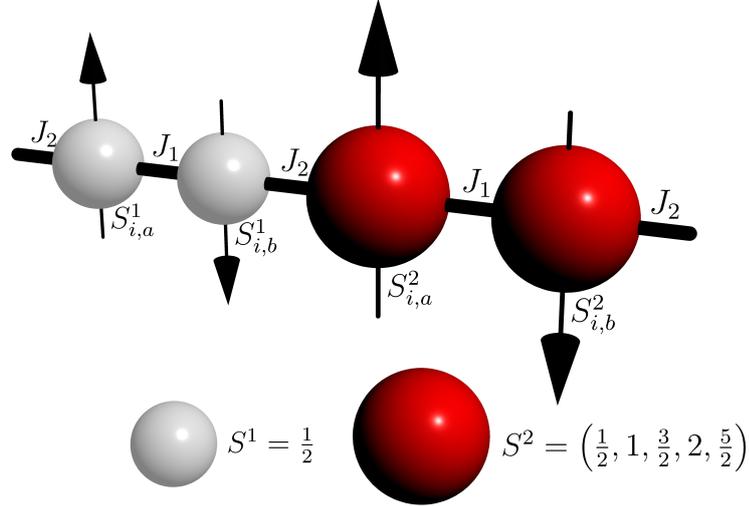
Vimos na sessão anterior que o modelo ferrimagnético tetrâmero com interações de Heisenberg alternadas foi vastamente investigado na literatura para diferentes estruturas de spins  $S^1$  e  $S^2$  compõe a cadeia, apresentando um rico diagrama de fases e transições de fases topológicas entre fases com gap formadas por diferentes mecanismos a partir do formalismo VBS. Neste capítulo vamos investigar as transições de fases para uma classe de modelos de estrutura  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$  com  $S = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2$  a fim de determinar a relação entre os fenômenos críticos que o modelo apresenta quando consideramos diferentes magnitudes de spins  $S$ . Ao final demonstramos que esses modelos compartilham fenômenos críticos, apresentando transições de fases quânticas da classe de universalidade especial equivalente a um ponto especial de bifurcação no diagrama de fases no modelo de Ashkin-Teller bidimensional [191]. Assim sendo, vamos considerar novamente as mesmas interações de Heisenberg alternadas para a cadeia ferrimagnética tetrâmérica  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$  fixando os spins  $S^1 = \frac{1}{2}$  e considerando magnitudes distintas para  $S^2 = S$  no estudo específico das transições de fases topológicas que podem ocorrer no modelo. Para tal, primeiro investigamos o diagrama de fases para o caso  $S^2 = 1$  com intuito de comparar as fases quânticas que são induzidas no modelo em comparação com caso anterior que investigamos com  $S^2 = \frac{5}{2}$ . Dessa forma temos novamente o hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N_c} [J_1(\mathbf{S}_{i,a}^1 \cdot \mathbf{S}_{i,b}^1 + \mathbf{S}_{i,a}^2 \cdot \mathbf{S}_{i,b}^2) + J_2(\mathbf{S}_{i,b}^1 \cdot \mathbf{S}_{i,a}^2 + \mathbf{S}_{i,b}^2 \cdot \mathbf{S}_{i+1,a}^1) - h(S_{i,a}^{1z} + S_{i,b}^{1z} + S_{i,a}^{2z} + S_{i,b}^{2z})], \quad (5.5)$$

onde temos que  $S_{i,\alpha}^1$  e  $S_{i,\alpha}^2$  representam os spins  $S^1 = \frac{1}{2}$  e  $S^2 = 1$  respectivamente com  $\alpha = a, b$  da  $i$ -ésima célula unitária. Vamos considerar o caso  $S^2 = 1$  como representativo na comparação com o modelo discutido na sessão anterior, uma vez que para  $S^2 = \frac{1}{2}$  não temos fases com gap não nulo [177, 178]. Novamente as interações dos spins são governadas pelos termos de troca de Heisenberg de modo isotrópico governado pelos parâmetros  $J_1$  e  $J_2$  com efeito do campo magnético aplicado no eixo Z representado no hamiltoniano (5.5) pelo termo de Zeeman, onde tomamos o campo magnético efetivo  $h = \mu_0 g B$  com  $\mu_0$  o magneton de Bohr,  $g$  o fator gyromagnético e  $B$  o campo magnético aplicado. Seguimos em nossas as mesmas condições do caso anterior, implementando o método numérico DMRG para tamanhos de cadeias distintos com  $N = 124, 198, 256, 320$  spins em nossas investigações de análise de escala de tamanho finito. Para as outras medidas que utilizamos para construir o diagrama de fases e as curvas de magnetização utilizamos novamente o maior tamanho de cadeia com 320 spins.

Vamos então investigar o diagrama de fases do modelo Ferrimagnético Tetrâmérico para  $S^1 = \frac{1}{2}$  e  $S^2 = 1$  descritos pelo hamiltoniano (5.5). Construímos o diagrama de fases para o modelo a segundo o mesmo método da sessão anterior, obtendo nossas quantidades a temperatura zero e em função do campo magnético  $h = \mu_0 g B$  e constante de troca

Figura 5.15: Representação da célula unitária que compõe a cadeia tetrâmera de Heisenberg. Temos pares de dímeros  $S_1 - S_1$  e  $S_2 - S_2$  onde  $S_1 = \frac{1}{2}$  com  $S_2$  de magnitudes distintas dadas na figura e interações de troca antiferromagnéticas inter-dímeros e intra-dímeros geridas pelas constantes  $J_1$  e  $J_2$  respectivamente.



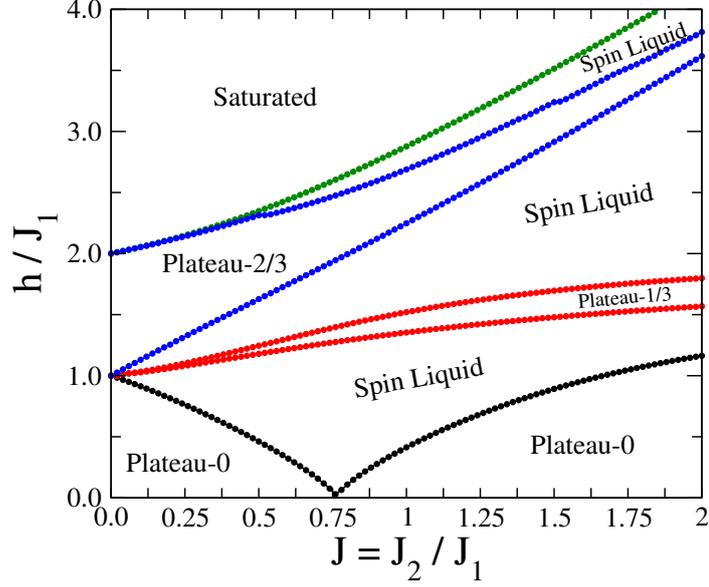
Fonte: Autor, (2023)

$J = J_2/J_1$ , onde novamente fixamos a interação  $J_1 = 1.0$  em nossas simulações.

### 5.3.1 Diagrama de fases e curvas de Magnetização

Obtivemos o diagrama de fases do modelo calculando diretamente as linhas críticas de transições de fases quânticas como descritos na sessão anterior, explorando a relação entre os setores de magnetização do modelo e o tamanho de cadeia considerado em nossas simulações ( $N = 128, 192, 256, 320$  spins). A partir do teorema de Oshikawa-Yamanaka-Affleck sabemos das possíveis fases que o modelo pode apresentar dada a estrutura dos spins em sua célula unitária. No caso que estamos lidando as possíveis fases de platô magnético  $0, 1/3, e 2/3$  em termos da magnetização reduzida ou o equivalente  $0, 1, e 2$  em termos de magnetização por célula unitária podem surgir naturalmente no diagrama de fases. Teremos então a célula unitária do modelo em neste caso apresentando uma magnetização total de saturação de  $S_{cel}^z = 3$  o que equivale a três setores de magnetização por célula unitária ignorando os setores de magnetização negativos. Assim, uma cadeia com  $80$  células unitárias ( $320$  spins) teremos um total de  $S_{cadeia}^z = 240$ . Dessa forma, podemos novamente identificar os setores de magnetização onde ocorrem cada uma das fases de platô de magnetização  $0, 1/3, 2/3$  para os setores  $S_{\alpha}^{plato} = 0, 80, 160$  para  $\alpha = 0, 1/3, 2/3$  respectivamente. De maneira análoga a o que explicamos anteriormente podemos calcular

Figura 5.16: Diagrama de fases do modelo ferrimagnético tetrâmero para  $S_1 = 1/2$  e  $S_2 = 1$  no espaço de parâmetros  $(h/J_1, J_2/J_1)$ . Vemos a emergência duas fases de platô de magnetização zero separadas por um ponto crítico. Com o aumento do campo magnético surgem as fases de platô  $1/3$  e  $2/3$  essas separadas por regimes de líquidos de spins de Tomonaga-Luttinger. Para campos suficientemente grandes temos a fase saturada.



Fonte: Autor, (2023)

as linhas críticas de transição calculando os campos críticos superiores  $h_{\gamma}^{+}$  e inferiores  $h_{\gamma}^{-}$  dados por

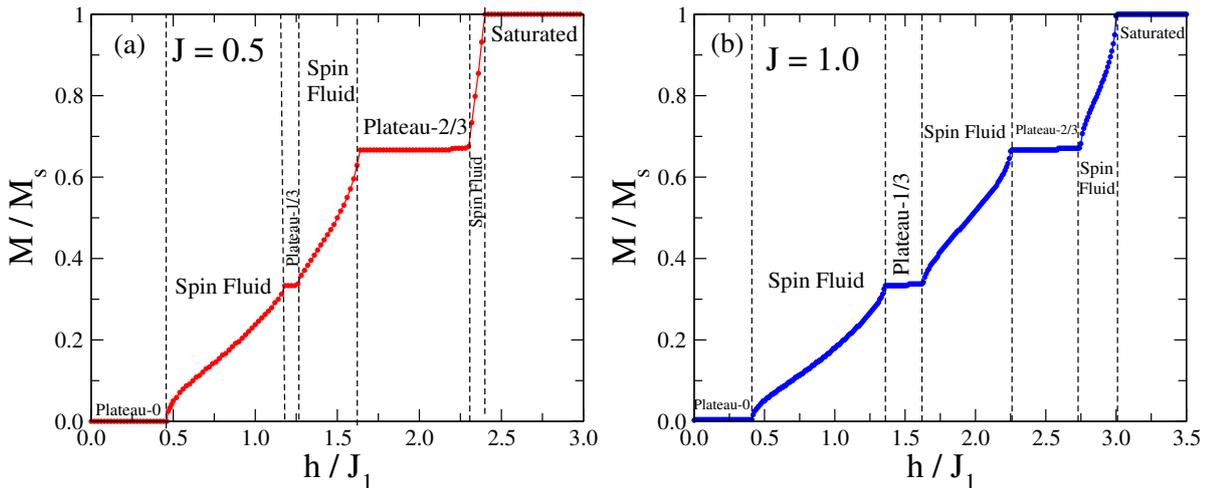
$$\begin{aligned} h_{\gamma}^{+} &= E(S_{\gamma} + 1) - E(M_{\gamma}) \\ h_{\gamma}^{-} &= E(S_{\gamma}) - E(M_{\gamma} - 1) \end{aligned} \quad (5.6)$$

com índices  $\gamma = 1/2, 2/3$  referente aos campos críticos que delimitam a fronteira inferior ( $h^{-}$ ) e superior ( $h^{+}$ ) de cada fase de platô magnético  $\gamma$ . Novamente, não incluímos a fase de platô zero nessa definição pois considerando condições de contorno abertas os modos de bordas presentes nestas fases implicam em obter o gap de spin utilizando a equação (5.3).

Construímos então o diagrama de fases do modelo ferrimagnético de Heisenberg tetrâmero com interações alternadas dada pela figura 5.15. As fases de gap magnético são delimitadas pelas curvas de campos críticos  $h_{\gamma}^{+}$  e  $h_{\gamma}^{-}$  separadas por fases de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger para interações de troca  $J$  suficientemente grandes. Temos no diagrama 5.16 a duas fases de platô de magnetização zero separadas por um ponto crítico  $J_c \approx 0.75$ , similar ao que obtemos no caso anterior. As fases de platô  $1/3$  e  $2/3$  surgem no modelo de forma contrária, com a primeira sendo promovida com o aumento das interações  $J$  a campo magnético finito enquanto a segunda é suprimida ao passo que  $J$  cresce, novamente a campo magnético finito. Para  $J$  suficientemente grande pode ocorrer no modelo um ponto terminal para a fase de platô  $2/3$  onde ocorre uma transição de fases para o regime de líquido de spins. Para campos  $h/J_1$  suficientemente grandes obtemos a fase saturada trivial.

Seguindo, calculando as curvas de magnetização em dois pontos distintos do diagrama de fases para checarmos as fases quânticas que este apresenta. Dessa forma construímos a figuras 5.17 de curvas de magnetização reduzida  $m = M/M_s$  para dois valores distintos do parâmetro de troca  $J = J_2/J_1$  para valores de campo magnético  $h/J_1 = (0.0, 4.0)$  com variação de campo  $dh = 0.025$ . Consideramos então dois pontos no diagrama de fases 5.16 fixando a interação de troca em  $J = 0.5$  e  $J = 1.0$ , logo abaixo e acima do ponto crítico  $J \approx 0.75$  respectivamente. Temos em (a) o caso  $J = 0.5$ , onde para campos  $h/J_1 < 0.5$  temos a fase de platô de magnetização zero de acordo com o diagrama de fases, onde teremos uma transição de fases para o regime de líquido de spins com o aumento do campo magnético. Identificamos ainda as fases de platô  $1/3$  e  $2/3$ , a primeira muito curta com em relação a diferença entre os campos críticos superiores e inferiores  $\Delta h = h^+ - h^-$ , em destaque com as linhas verticais na figura (5.17)(a). Ambas as fases de platô de magnetização são conectadas por fases de líquido de spins assim como o caso anterior, onde alcançamos a fase saturada para campos  $h/J_1 > 2.5$ . Em (b) temos uma situação similar, onde obtemos as fases de platô de magnetização de acordo com o diagrama de fases. A fase de platô zero permanece com o aumento do campo magnético até o valor crítico  $h/J_1 \approx 0.41$ . Vemos ainda os regimes de platô  $1/3$  e platô  $2/3$  conectados por regimes de líquidos de spins como no caso anterior, alcançando novamente a fase saturada para campos  $h/J_1 > 3.0$ .

Figura 5.17: Curvas de magnetização reduzida  $m = M/M_s$  em função de campo para valores distintos de interação de troca  $J = J_2/J_1$ . Em (a) temos a variação de  $m$  para interação  $J = 0.5$  onde temos a fase de gap zero resiste a valores de campos magnético próximos a  $h_c \approx 0.46$  onde ocorre uma transição de fases para o regime de líquido de spins. Ainda as fases de platô  $1/3$  e platô  $2/3$  surgem para valores finitos de campos magnéticos  $h/J_1$ . Em (b) temos  $m$  em função do campo magnético para interações de troca  $J = 1.0$  temos um comportamento similar ao caso anterior, com a fase de platô zero induzida para valores de campo  $h < h_c \approx 0.41$  e fases de platô de magnetização  $1/3$  e  $2/3$  conectadas por regimes de líquido de spins.



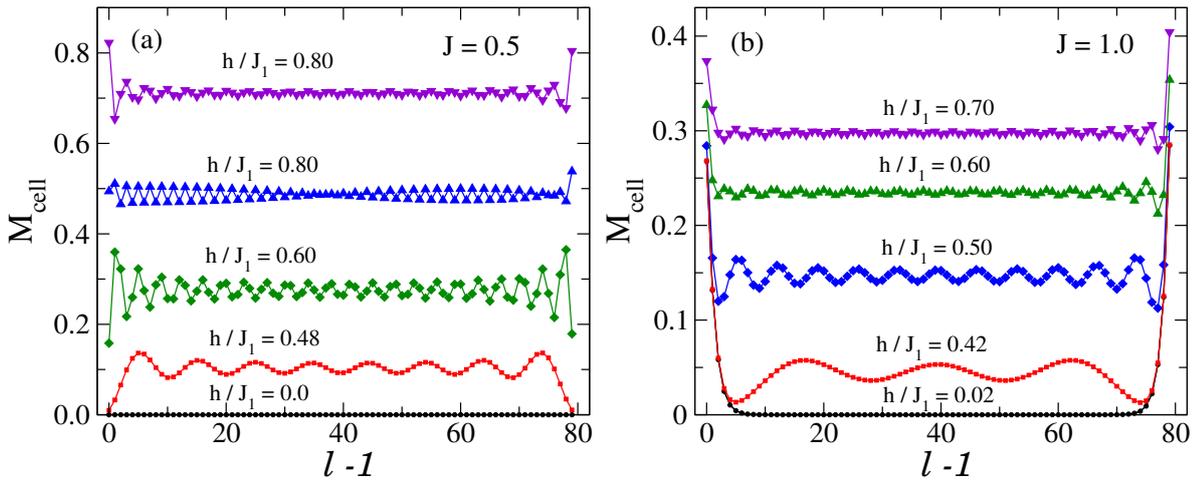
Fonte: Autor, (2023)

Vimos que as curvas de magnetização para os dois valores considerados de interação de troca  $J_2/J_1 = 0.5$  e  $J_2/J_1 = 1.0$  estão de acordo com o nosso diagrama de fase 5.16 no espaço de parâmetros  $\left(\frac{h}{J_1}, \frac{J_2}{J_1}\right)$ . Entretanto, analisando somente a magnetização reduzida  $m$  não nos dá resposta sobre o mecanismo de formação das fases de platô de magnetização zero separadas pelo ponto crítico  $J_c$ . Vamos então analisar, tal qual o caso anterior, outra medida de magnetização para o modelo que estamos investigando em busca de entender o mecanismo de formação e a diferença da fase de platô zero para  $J_2/J_1$  abaixo e acima de ponto crítico  $J_c \approx 0.75$ . Nesse sentido calculamos a distribuição espacial da magnetização por célula unitária  $M_{cell}$  em função do campo magnético externo  $h/J_1$  para os pontos no diagrama de fase 5.16  $J = J_2/J_1 = 0.5$  e  $J = J_2/J_1 = 1.0$  respectivamente. A magnetização  $M_{cell}$  da  $i$ -ésima célula unitária é dada pela expressão

$$M_{cell}^i = (s_{i,a}^z + s_{i,b}^z + S_{i,a}^z + S_{i,b}^z),$$

onde calculamos espacialmente a magnetização por célula unitária para a cadeia tetrâmera seguindo as mesmas condições do caso anterior. Na figura 5.18 temos o perfil de  $M_{cell}$  para valores de campo magnético dentro da fase de platô-0 e imediatamente acima do campo crítico  $h_c$  onde o sistema adentra a fase de líquido de spin. No eixo x temos  $l - 1$  referente ao índice da célula unitária. Temos na figura 5.18 em (a) o caso  $J = 0.5 < J_c$  em (b) o caso  $J = 1.0 > J_c$  com  $J_c \approx 0.75$ . No primeiro, vemos que o estado fundamental de gap zero não apresenta ordem magnética alguma, onde somente para campos suficientemente grandes observamos excitações magnéticas que surgem no centro da cadeia e se estendem ao longo dessa. Esse comportamento se repete ao passo que aumentamos o campo magnético  $h/J_1$  com a magnetização do sistema crescendo continuamente. Em (b) temos uma situação distinta, onde a campos ínfimos  $h/J_1 = 0.02$  observamos a presença de modos de borda excitados na fase de plato de magnetização zero. De fato, com o aumento do campo magnético vemos a excitação de modos no interior da cadeia somente para campos acima do campo crítico  $h_c \approx 0.41$ . Temos então no diagrama de fases 5.16 novamente duas fases topológicas separadas pelo ponto crítico  $J_c$ , constituindo as fases de platô zero em dois mecanismos distintos. A análise da figura 5.18 nos indica que abaixo do ponto crítico  $J_c$  teremos uma fase topológica trivial enquanto acima de  $J_c$  teremos uma fase topológica não trivial, onde vemos claramente o surgimento de modos de bordas nesse regime. Vamos então agora implementar o método de escala tangencial de tamanho finito para investigar e caracterizar o ponto crítico desse modelo.

Figura 5.18: Curvas de magnetização por célula unitária distribuídas espacialmente na cadeia com  $l$  o índice da célula unitária ( $N_c = 80$ ). Em (a) temos o caso  $J = 0.5$  onde vemos para campo magnético nulo o sistema não apresenta ordenamento magnético algum referente a fase de platô de magnetização zero, esta persistindo até o valor crítico de campo  $h_c \approx 0.46$ . Para valores de campos acima de  $h_c$  o sistema transiciona para o regime de líquido de spins, onde podemos ver excitações magnéticas no interior da cadeia. Em (b) temos a distribuição espacial da magnetização por célula unitária para interações de troca  $J = 1.0$  onde vemos para campos muito pequenos  $h/J_1 = 0.02$  ainda na fase de platô de magnetização zero a formação de modos de bordas que penetram o interior da cadeia seguindo uma lei exponencial. Acima do campo crítico  $h_c \approx 0.41$  temos novamente de líquido de spins com excitações no interior da cadeia e também nas bordas, o que se mantém para valores maiores de campo.

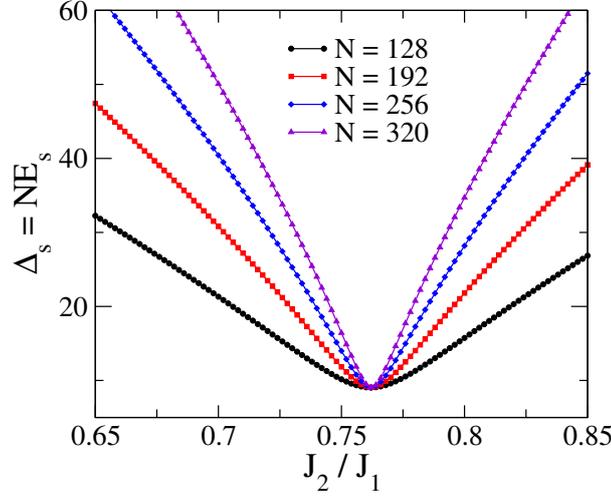


Fonte: Autor, (2023)

### 5.3.2 Transições de Fases Topológica

Nessa sessão vamos investigar transições de fases topológica para um conjunto de modelos Ferrimagnéticos tetrâmeros  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$  de interações de Heisenberg isotrópicas e alternadas com  $S = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2$ . Verificamos que todos esses para diferentes valores de spin  $S$  apresenta uma transição de fases topológica a campo nulo, apresentando um comportamento similar ao que verificamos para o caso  $S = \frac{5}{2}$  na primeira sessão desse capítulo de  $S = 1$  como vimos até agora. Dessa forma vamos tomar como caso de estudo o modelo de spin  $S = 1$  e caracterizar primeiro a transição nesse caso e depois nos casos para diferentes valores de  $S$ . Para tal, implementamos o método de escala tangencial de tamanho finito definido no capítulo anterior para caracterizar essas transições obtendo assim os pontos crítico  $J_c$  e expoentes do comprimento de correlação  $\nu$  em cada caso. O primeiro passo do método consiste em calcular o gap de spin  $E_s$  do modelo adequado para condições de contorno consideradas no problema (consideramos condições de contorno aberta em todos os modelos desse capítulo) e considerando tamanho de cadeias distintos  $N = 128, 192, 256, 320$ . Calculamos então as curvas de gap escalado  $\Delta = E_s N$  variando o parâmetro de controle da transição de fase, neste caso a interação de troca  $J = J_2/J_1$ . Assim contruímos a figura 5.19 com a curva de gap escalado para a transição de fase topológicas no pontos crítico  $J_{c1}$  para tamanhos de cadeia  $N = 128, 192, 256, 320$  spins. Vemos claramente o comportament tangencial do gap escalado na proximidade do

Figura 5.19: O gap escalado  $\Delta_s = NE_s$  para valores da interação de troca  $J = J_2/J_1$  no intervalo  $[0.0, 2.0]$  que compreende o ponto crítico  $J_c$ . Vemos novamente nas fases com gap energético uma dependência clara entre  $\delta_s$  e o tamanho de cadeia  $N$ , onde somente no ponto crítico as curvas tangenciam em  $J_c \approx 0.76$ .



Fonte: Autor, (2023)

ponto crítico que separa as duas fases com gap energético. No segundo passo do método, seguimos com as curvas de primeira derivada  $\alpha_s$  do gap de spin  $\Delta_s$  em relação a interação de troca  $J$  onde podemos identificar o pontos crítico  $J_{c1} = 0.7622$  a partir do cruzamento das curvas. Além disso identificamos o valor da primeira derivada  $\alpha_s$  do gap energético no ponto crítico  $\alpha_s^* = 4.97$ .

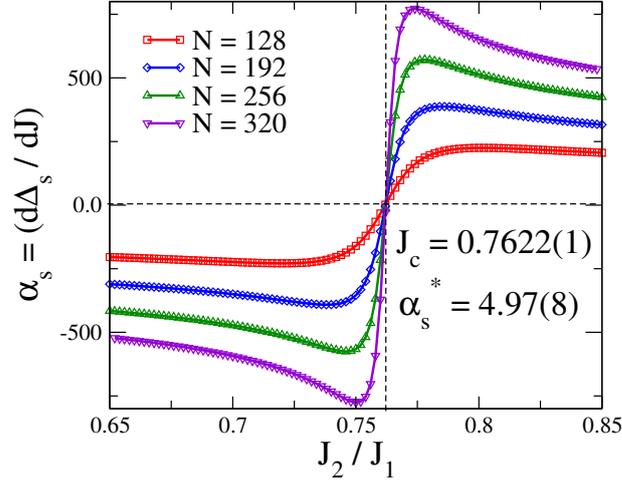
Obtidos então os valores de  $J_c$  e  $\alpha_s^*$  no ponto crítico, podemos seguir para próximo passo do método. A partir da forma de escala do gap  $\Delta_s$  no ponto crítico podemos estimar o expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu$ . Seja então a expressão [53]

$$\Delta_s = (J - J_c)\alpha_s^* + g \left[ (J - J_c)\tilde{N}^{1/\nu} \right] \quad (5.7)$$

com  $\alpha_s^*$  a derivada do gap escalado no ponto crítico e  $\tilde{N} = N/\ln(N)^{1/2}$ . Explorando a forma de escala acima podemos a partir do calculo da segunda derivada do gap escalado no ponto crítico  $J_{c1}$  obter o expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu$ . Vemos na figura 5.21 os valores de  $d\alpha_s/dJ$  no ponto crítico para diversos tamanhos de cadeia incluindo as correções logarítmicas onde obtemos o expoente crítico  $2/\nu = 3$ . O ultimo passo do método consiste em validar as medidas do ponto crítico  $J_{c1}$  e expoente crítico  $\nu$  a partir do colapso dos dados do gap escalado seguindo a forma de escala dada pela equação (5.7). De fato, temos na figura 5.22 a validação do método com o colapso dos dados do gap escalado  $\Delta_s$  nos pontos críticos  $J_{c1}$  onde vemos o comportamento universal dos dados colapsados de acordo com a forma de escala (5.10) e independente dos tamanhos de cadeia considerados para o dado expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu = 2/3$ .

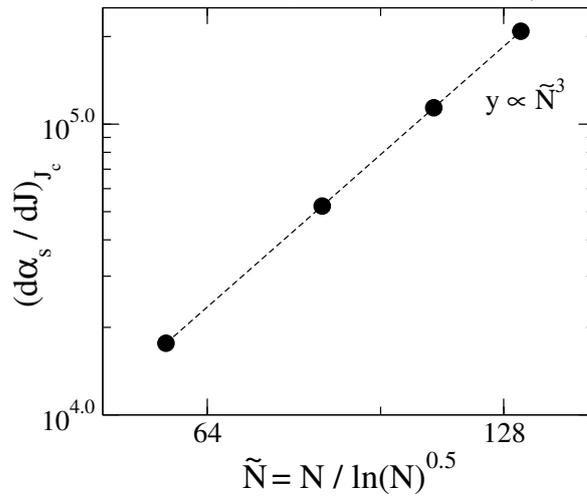
Perceba que assim como no modelo Ferrimagnético tetrâmero com  $S_1 = \frac{1}{2}$  e  $S_2 = \frac{5}{2}$  investigado na primeira sessão desse capítulo, o caso discutido nessa sessão também

Figura 5.20: Temos a primeira derivada  $\alpha_s$  do gap de spin escalado  $\delta_s$  em relação a interação de troca  $J$  para diferentes tamanhos de cadeia. Temos que somente no ponto crítico o valor de  $\alpha_s$  é independente do tamanho da cadeia  $N$ , com  $\alpha_s^* = 4.97(8)$  onde estimamos o ponto crítico  $J_c = 0.7622(1)$ .



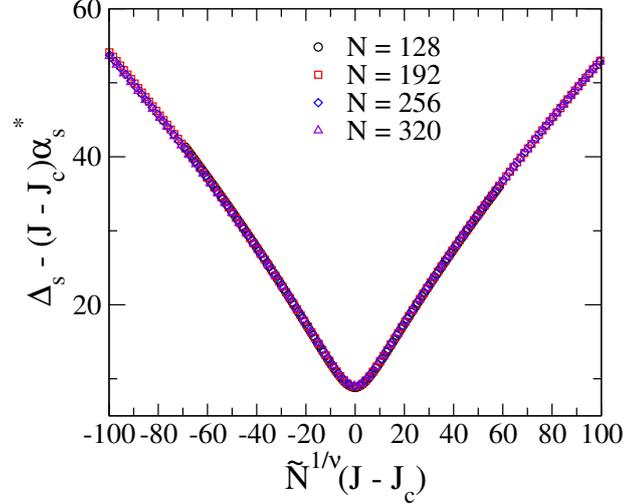
Fonte: Autor, (2023)

Figura 5.21: A segunda derivada no gap escalado  $\alpha_s$  em função da constante de troca  $J$  para os tamanhos de cadeias considerados incluindo a correção logarítmica  $\tilde{N} = N / \ln(N)^{0.5}$ . A linha tracejada  $y$  corresponde a regressão em lei de potências com  $d\Delta_s / dJ_c = \tilde{N}^{2/\nu}$  com  $\nu = 2/3$ .



Fonte: Autor, (2023)

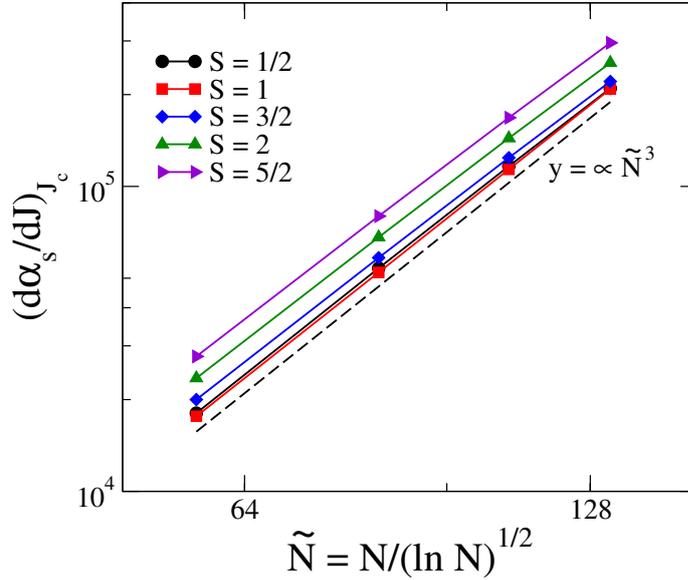
Figura 5.22: Colapso dos dados do gap escalado, para os tamanhos de cadeias considerados neste trabalho, em uma curva universal de acordo com a função de escala  $g(x)$ , revelando a invariância de escala no ponto crítico  $J_c$ .



Fonte: Autor, (2023)

apresenta uma transição de fase entre duas fases topológicas com expoente  $\nu = 2/3$ . Esse resultado sugere que a classe de modelos ferrimagnético tetrâmeros  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S$  com  $S = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2$  podem apresentar fenômenos críticos que independam da natureza do spin  $S$ . De fato o caso  $S = \frac{1}{2}$  nos leva ao modelo de Heisenberg com interações alternadas, foi amplamente investigado [177, 178] e seu diagrama de fases é conhecido por apresentar uma transição de fase topológica. Aplicamos então o método de escala tangencial de tamanho finito para tentar obter respostas sobre a possibilidade de a classe de modelos ferrimagnéticos tetrâmeros apresentar uma transição de fase comum. Temos reunidos os resultados para diferentes spins  $S$  considerados na figura 5.23 da segunda derivada do gap escalado  $\Delta_s$ , nas proximidades do ponto crítico de cada caso considerado em função do tamanho da cadeia com correção logarítmica  $\tilde{N} = N/\ln(N)^{1/2}$ . Vemos que as retas (em log-log) para diferentes  $S$  apresentam a mesma lei de potência com inclinação  $\frac{2}{\nu} = 3$  para os tamanhos de cadeia considerados com uma grande acórdância nos dados. A figura 5.23 sinaliza a universalidade das transições topológicas desse modelo, pertencendo a classe de transições  $SU(2)$  de Wess-Zumino-Witten [128, 129, 160] com expoente do comprimento de correlação  $\nu = \frac{2}{3}$  bem estabelecido. Temos ainda na tabela 5.1 os valores obtidos dos pontos críticos  $J_c$  para diferentes valores de spin  $S$  considerados. Note que com  $S$  crescente o ponto crítico  $J_c$  diminui, o que nos faz pensar o que pode acontecer se tomarmos o limite de spin clássico  $S \rightarrow 0$ . Uma das interpretações possíveis é dado o limite clássico, o ponto crítico do modelo converge para  $J_c = 0.0$  com  $J_1 \gg J_2$  o que implica em uma fase totalmente dimerizada entre os dímeros  $S_1 - S_1$  e  $S_2 - S_2$  para  $J < 0.0$  de natureza distinta do caso topológico não trivial. Neste caso eu diria que a natureza da transição de fase mudaria, havendo então um ponto crítico que separe uma fase com gap  $J > 0$  de uma fase dimerizada trivial  $J < 0$ .

Figura 5.23: Um comparativo das segundas derivadas do gap escalado no ponto crítico para a cadeia ferrimagnética tetrâmera  $(1/2, 1/2, S, S)$  com interações de Heisenberg alternadas para  $S = 1/2, 1, 3/2, 2$  e  $5/2$ . Vemos que todos os modelos considerados para magnitudes distintas de  $S$  apresentando o mesmo comportamento de lei potência com a correção logarítmica.



Fonte: Autor, (2023)

$S$	$J_c$
1/2	1.0
1	0.7622(1)
3/2	0.6209(1)
2	0.5254
5/2	0.4559(1)

Tabela 5.1: Estimativas dos valores das interações de troca no ponto contos críticos  $J_c$  para a cadeia ferrimagnética tetrâmera  $(1/2, 1/2, S, S)$  com interações de Heisenberg alternadas para  $S = 1/2, 1, 3/2, 2$  e  $5/2$ .

## 5.4 Fases Topológicas Não Triviais e Sucessivas Transições em Cadeias Ferrimagnéticas Tetrâmera $1 - 1 - \frac{3}{2} - \frac{3}{2}$

Nesta sessão vamos investigar um modelo tetrâmero ferrimagnético com célula unitária composta agora por spins de spins  $1 - 1 - \frac{3}{2} - \frac{3}{2}$  com interações de troca de Heisenberg isotrópicas e alternadas. Os efeitos de campos magnéticos são considerados a partir do termo de interação de Zeeman considerado no hamiltoniano do modelo. Como na primeira parte desse capítulo, vamos investigar as fases quânticas do modelo construindo o diagrama de fases do modelo no espaço de parâmetro  $(J_2/J_1, h/J_1)$  e discutindo as fases magnéticas analisando as curvas de magnetização do modelo. Em seguida discutimos as transições de fases topológicas que o modelo apresenta e caracterizamos o mesmo utilizando o método de escala tangencial de tamanho finito.

Construímos o modelo de forma análoga ao investigado anteriormente, considerando uma sequência de pares de dímeros de spins  $S^1 - S^1$  e  $S^2 - S^2$  com  $S^1 = 1$  e  $S^2 = \frac{3}{2}$  que se dispõe em uma cadeia alternadamente com interações de troca intra-dímero  $J_1$  e inter-dímero  $J_2$ , de modo que as interações entre os spins de mesma natureza( $J_1$ ) são diferentes das interações dos spins distintos( $J_2$ ). Assim o hamiltoniano que descreve as interações magnéticas do modelo acima é dado por

$$H = \sum_{i=1}^{N_c} [J_1(\mathbf{S}^1_{i,a} \cdot \mathbf{S}^1_{i,b} + \mathbf{S}^2_{i,a} \cdot \mathbf{S}^2_{i,b}) + J_2(\mathbf{S}^1_{i,b} \cdot \mathbf{S}^2_{i,a} + \mathbf{S}^2_{i,b} \cdot \mathbf{S}^1_{i+1,a}) - h(S^1_{i,a}{}^z + S^1_{i,b}{}^z + S^2_{i,a}{}^z + S^2_{i,b}{}^z)], \quad (5.8)$$

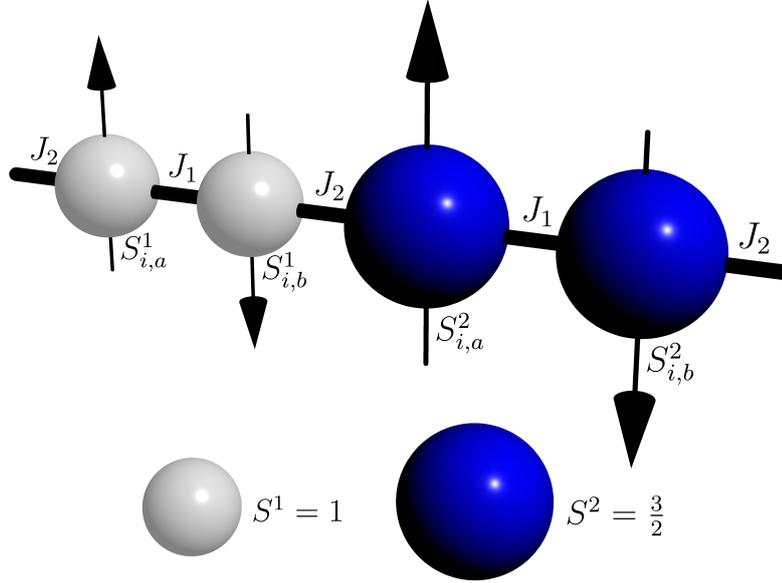
onde temos que  $\mathbf{S}^1_{i,\alpha}$  e  $\mathbf{S}^2_{i,\alpha}$  representam os spins  $S^1 = 1$  e  $S^2 = \frac{3}{2}$  respectivamente com  $\alpha = a, b$  da  $i$ -ésima célula unitária. As interações dos spins é governada pelos termos de troca de Heisenberg de modo isotrópico governado pelos parâmetros  $J_1$  e  $J_2$  ambos positivos, o que implica interações antiferromagnéticas. O efeito do campo magnético aplicado no eixo  $Z$  é representado no hamiltoniano (5.8) pelo termo de Zeeman, com  $h = \mu_0 g B$  com  $-\mu_0$  o magneton de Bohr,  $g$  o fator gyromagnético e  $B$  o campo magnético aplicado. Utilizamos também os mesmos tamanhos de cadeia que os casos anteriores, calculando nossas quantidades para  $N_c = 32, 48, 64, 80$  células unitárias para análises de tamanho finito. Para medidas as medidas de magnetização que utilizamos consideramos o maior tamanho de cadeia com  $N_c = 80(320$  spins).

### 5.4.1 Diagrama de fases e curvas de Magnetização

O diagrama de fases então foi obtido seguindo o mesmo método dos capítulos anteriores, computando diretamente as linhas de transições de fases quânticas a partir das diferenças de energias entre os setores de magnetização. Novamente vamos nos guiar a partir do teorema de Oshikawa-Yamanaka-Affleck para identifica as possíveis fases com gap representadas pelos platôs de magnetização  $0, 1/5, 2/5, 3/5, 4/5$  em termos da magnetização reduzida ou o equivalente  $0, 1, 2, 3, 4$  em termos de magnetização por célula unitária. Neste caso a célula unitária do modelo em questão apresenta uma magnetização total de saturação de  $S_{cel}^z = 5$  o que equivale a cinco setores de magnetização por célula unitária ignorando os setores de magnetização contrários ao campo magnético. Para uma cadeia com 80 células unitárias(320 spins) teremos um total de  $S_{cadeia}^z = 400$ . Dessa forma, podemos identificar os setores de magnetização onde ocorrem cada uma das fases de platô de magnetização  $0, 1/5, 2/5, 3/5, 4/5$  nos setores  $S_{\alpha}^{plato} = 0, 80, 160, 240, 320$  para  $\alpha = 0, 1/5, 2/5, 3/5, 4/5$  respectivamente. De maneira análoga a o que explicamos anteriormente podemos calcular as linhas críticas de transição calculando os campos críticos superiores  $h_{\gamma}^+$  e inferiores  $h_{\gamma}^-$  dados por

$$\begin{aligned} h_{\gamma}^+ &= E(S_{\gamma} + 1) - E(M_{\gamma}) \\ h_{\gamma}^- &= E(S_{\gamma}) - E(M_{\gamma} - 1) \end{aligned} \quad (5.9)$$

Figura 5.24: Representação da célula unitária que compõe a cadeia tetrâmera de Heisenberg. Temos pares de dímeros  $S^1 - S^1$  e  $S^2 - S^2$  onde  $S^1 = 1$  e  $S^2 = \frac{3}{2}$  com interações de troca anti-ferromagnéticas inter-dímeros e intra-dímeros geridas pelas constantes  $J_1$  e  $J_2$  respectivamente.

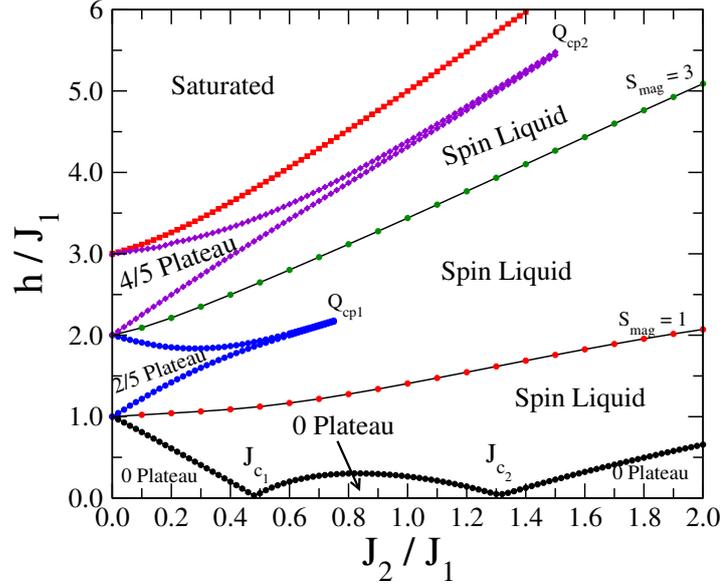


Fonte: Autor, (2023)

com índices  $\gamma = 1/5, 2/5, 3/5, 4/5$  referente aos campos críticos que delimitam a fronteira inferior ( $h^-$ ) e superior ( $h^+$ ) de cada fase de platô magnético  $\gamma$ . Novamente não incluímos a fase de platô zero nessa definição pois como vimos para condições de contorno os modos de bordas presentes nestas fases implicam computar o gap de spin utilizando a equação (5.3).

Construímos o diagrama de fases do modelo ferrimagnético de Heisenberg tetrâmero com interações alternadas dada pela figura 5.24. As fases de gap magnético são delimitadas pelas curvas de campos críticos  $h_\gamma^+$  e  $h_\gamma^-$  separadas por fases de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger como nos casos anteriores. Salta aos olhos destacar que o ordenamento magnético nesse modelo é menos favorecido em função do campo magnético am passo que aumentamos a interações de troca  $J = J_2/J_1$ . Vemos também que as fases de platô magnético  $m = 2/5$  e  $m = 4/5$  não surgem em nossa simulação numérica apresentando um regime amplo de fases de líquido de spins para  $J > 0.8$ . Destacamos em nosso diagrama de fases 5.25 com  $S_{mag} = 1$  e  $S_{mag} = 3$  as linhas críticas  $h_{2/5}^+$  e  $h_{4/5}^+$  referentes aos setores de magnetização onde as fases de plato de magnetização  $2/5$  e  $4/5$  surgiriam onde constatamos nesse caso que  $h_\alpha^+ - h_\alpha^- \propto 1/N_c$  para  $\alpha = 2/5, 4/5$  tal qual a fase de liquido de spin. Na prática as linhas coincidem entre si no limite termodinâmico, uma característica clara de excitações não massivas em líquidos quânticos. Outro aspecto que

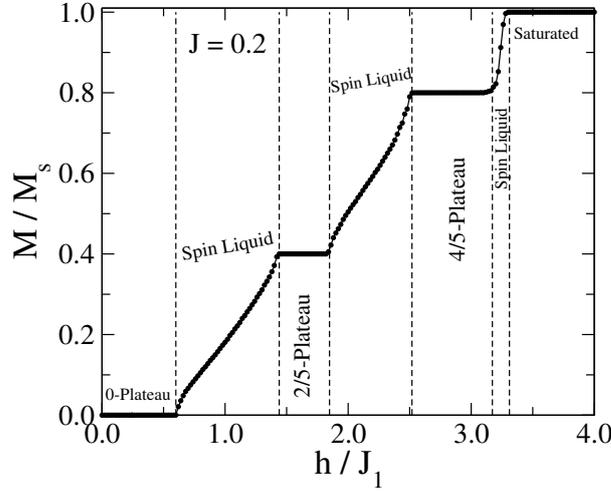
Figura 5.25: Diagrama de fases do modelo no espaço de parâmetros  $(\frac{J_2}{J_1}, \frac{h}{J_1})$ . Obtivemos cinco fases magnéticas de platô de magnetização, sendo três destas fases magnetização nula mesmo a campo magnético finito. A partir do teorema de Oshikawa-Yamanaka-Affleck [103] as fases de platô de magnetização  $1/5$  e  $3/5$  poderiam aparecer para o nosso sistema, porém em nossas simulações essas fases não foram identificadas, apresentando um regime de líquidos de spin abrangente. Com excessão do platô de magnetização 0, todos as outras fases magnéticas com gap são conectadas por fases de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger. Vemos claramente uma transição de fases quântica sucessivas entre mecanismos de formação do platô-0 diferentes com  $J_2/J_1 \approx 0.48$  e  $J_2/J_1 \approx 1.3$  respectivamente.



Fonte: Autor, (2023)

reforça a característica do modelo em apresentar fases ordenadas somente para valores intermediários de interação é notarmos a formação das fases de platô magnético  $2/5$  e  $4/5$  surgindo em função do campo magnético somente para  $J < 1.0$ . Estas duas fases se fecham em pontos críticos onde ocorrem transições de fases quânticas da classe de universalidade de Kosterlitz-Thouless [79, 80]. Referenciamos no diagrama 5.25 esses pontos como  $Q_{cp1}$  e  $Q_{cp2}$  referentes aos pontos críticos que separam as fases com gap  $2/5$  e  $4/5$  do regime de líquido de spins respectivamente. Apesar de transição de Kosterlitz-Thouless ter um expoente crítico  $\nu = 1/2$  conhecido, caracterizar o seu ponto o par  $(J_c, h_c)$  onde esta transição ocorre é um tanto desafiador pela forma de escala exponencial desta transição [49] onde teremos o comprimento de correlação proporcional  $\xi \approx \Delta^{-1} = e^{a/g^{1/2}}$  [156, 192, 193] com  $a$  um parâmetro livre e  $g = |J - J_c|$  a distância ao ponto crítico. Uma análise mais detalhada para obtermos os pares  $(J_c, h_c)$  em ambos os pontos  $Q_{cp1}$  e  $Q_{cp2}$  será feita em trabalhos futuros. Vemos ainda que para campos  $h/J_1$  pequenos temos a emergência de três fases de platô magnético zero distintas separadas pelos pontos crítico  $J_{c1}$  e  $J_{c2}$ . Uma análise mais detalhada destas fases é necessária para tentarmos entender quais mecanismos formam essas três fases quânticas e como podemos representá-las no formalismo em estados VBS. Discutiremos melhor as propriedades destas fases quando estudarmos as medidas de magnetizações locais e por célula unitária.

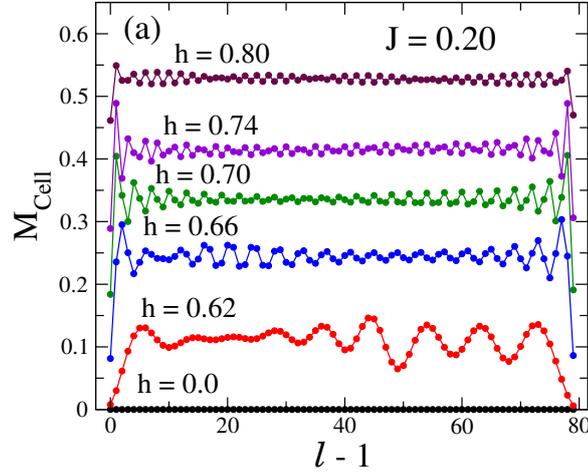
Figura 5.26: Curva de magnetização reduzida  $m$  em função do campo magnético  $h/J_1$  para  $J = 0.20$ . Vemos identificadas claramente as fases magnéticas descritas no diagrama de fases onde obtivemos as fases de platôs 0,  $2/5$  e  $4/5$  e a fase de saturação com  $m = 1.0$ . Entre as fases de platô temos o regime de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger com as linhas verticais destacando os pontos de transição entre os regimes de líquidos de spins e de platô de magnetização.



Fonte: Autor, (2023)

Obtemos a de magnetização para apenas um valor significativo de  $J = J_2/J_1$  no diagrama de fases 5.25 e verificarmos as fases quânticas que este apresenta. Dessa forma construímos a figuras 5.26 de curva de magnetização reduzida  $m = M/M_s$  em função do campo magnético externo para o interação de troca  $J = 0.2$ . Fixamos condições similares aos calculos feitos anteriores onde consideramos campos magnéticos crescentes até obtermos o valor de saturação  $h/J_1 \approx 4.0$  com variação de campo  $dh = 0.025$ . Vemos então a curva de magnetização reduzida  $m$  em função do campo magnético externo na figura 5.26, onde as linhas verticais destacam as os campos críticos que separadam fases de platô de magnetização das fases de líquidos de spins. Iniciamos com a fase de platô magnético zero a campo nulo persistindo até um campo crítico  $h/J_1 \approx 0.6$ , onde temos uma transição de fase quântica para o regime de líquido de spin de Tomonaga-Luttinger. Esse comportamento se repete para as fases de platô de magnetização seguintes, onde vemos o surgimento dos platôs de magnetização  $2/5$  e  $4/5$  separados por uma faixa de líquidos de spin. Obtemos a fase saturada onde todos os spins estão alinhados com o campo magnético externo  $h/J_1 \approx 3.28$  para o valor de interação de troca considerado.

Figura 5.27: Distribuição espacial da magnetização por célula unitária  $M_{Cell}$  para interação de troca  $J = 0.20$  e diversos valores de campos magnéticos  $h$  indicados na figura. Vemos como no caso discutido na primeira parte desse capítulo a magnetização se distribui ao longo da cadeia sem apresentar nenhum modo de borda. Esse comportamento indica fortemente que estamos diante de uma fase topológica trivial para campos pequenos e acima do campo crítico  $h_c = 0.6$  penetramos no regime de líquido de spins.

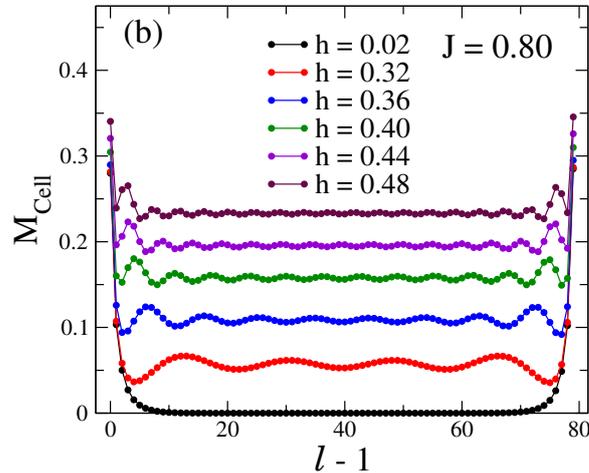


Fonte: Autor, (2023)

Vimos que as curvas de magnetização reduzida estão de acordo com o nosso diagrama de fases, porém analisar somente essa quantidade não nos dá resposta sobre a natureza das fases com gap zero e as suas diferenças. Então de maneira análoga ao que fizemos anteriormente, computamos as curvas de magnetização por célula unitária para identificarmos possíveis modos de borda para essas fases em valores distintos de campos magnéticos. Assim calculamos a distribuição espacial de magnetização por célula unitária  $M_{cell}$  para valores distintos de interação de troca  $J$ , para valores diferentes de campo magnético, de modo a identificar cada uma das três fases de gap zero. No primeiro caso consideramos  $J = 0.20$  e obtemos a distribuição da magnetização por célula unitária  $M_{cell}$  para diferentes valores de campos magnéticos. Vemos para campo nulo, onde o sistema apresenta fase de gap magnético zero, não observamos excitações magnética em seu interior ou modos de borda. Somente para valores acima do campo crítico  $h_c \approx 0.6$  observamos o surgimento de alguma ordem magnética no interior da cadeia, onde no diagrama de fases entramos o regime de líquido de spin. Com o aumento do campo magnético naturalmente observamos o crescimento da magnetização  $M_{cell}$  típico do regime de Tomonaga-Luttinger, onde obtemos valores de magnetização até campo  $h = 0.80$ . Note que como em casos anteriores, obtemos uma fase topológica não trivial que pode ser entendida a partir do formalismo VBS, com pares singletos formados entre os spins fracionalizados de modo a não apresentar ordenamento magnético algum. No segundo caso, consideramos interação de troca  $J = 0.8$  e obtemos a distribuição espacial da magnetização  $M_{cell}$  para valores diferentes de campo. Vemos na figura 5.28 um comportamento distinto do caso  $J = 0.20$ , pois vemos modos de bordas excitados para valores ínfimos de campo magnético  $h = 0.02$ , estes que penetram o interior da cadeia exponencialmente.

Para valores de campos acima de  $h_c \approx 0.30$ , temos uma transição de fases para o

Figura 5.28: Distribuição espacial da magnetização por célula unitária  $M_{Cell}$  para interação de troca  $J = 0.80$  e diversos valores de campos magnéticos  $h$  indicados na figura. Vemos neste caso claramente que o sistema apresenta modos de borda onde um campo ínfimo  $h = 0.02$  é suficiente para excitar os mesmos. Imediatamente acima do campo crítico  $h_c \approx 0.3$  o penetramos o regime de líquido de spins para diversos valores de campos magnéticos dispostos na figura. Dessa forma para  $J = 0.8$  e valores de campo abaixo do valor crítico  $h_c \approx 0.3$  temos uma fase topológica não trivial.

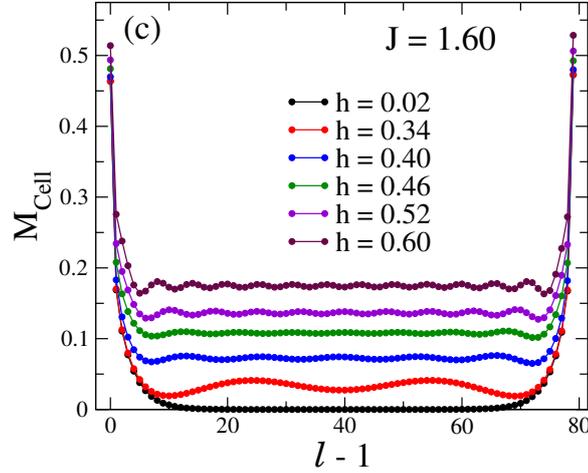


Fonte: Autor, (2023)

regime de líquido de spins onde notamos excitações magnéticas no interior da cadeia que se estendem ao longo da mesma. Para valores de campos crescentes vemos a magnetização global do sistema cresce continuamente no limite termodinâmico, com os modos de borda inclusos. Neste caso temos uma fase topológica não trivial e como já vimos em caso anterior temos uma transição de fase quântica no ponto  $J_{c_1}$  entre uma fase topológica trivial e uma fase topológica não trivial. Por ultimo analisamos as curvas de magnetização  $M_{cell}$  para o caso de interações de troca acima do ponto crítico  $J_{c_2}$ , onde consideramos  $J = 1.6$  em nossa análise. Vemos na figura 5.29 as curvas nesse caso para valores distintos de campos magnéticos, onde temos novamente o surgimento de modos de borda nesta fase mesmo para valores de campos magnéticos muito pequenos  $h/J_1 = 0.02$ . Só observamos excitações magnéticas no interior da cadeia para valores de campo acima de  $h_c \approx 0.32$ , onde novamente temos modos que se estendem ao longo da cadeia no regime de líquidos de spins. É intrigante como mesmo para valores maiores de campo vemos mais excitações magnéticas no interior da cadeia com a permanência dos modos de borda, desta vez mais pronunciados com relação ao caso anterior onde consideramos  $J = 0.80$ . De fato, temos uma outra fase topológica não trivial surgindo no modelo, porém com mecanismo de formação dos pares de spins fracionalizados de modo a termos excitações na borda mais expressivas. Esse comportamento foi sugerido em trabalho anterior [176] no mesmo modelo, porém discussão alguma sobre como se organizam os spins nestas fases topológicas não triviais distintas fora trazido no texto.

Para entendermos melhor a diferença entre essas duas fases topológicas não triviais separadas pelo ponto crítico  $J_{c_2}$ , analisamos as curvas de magnetizações locais  $M_{loc}$  para dois valores de interação de troca em cada uma das fases topológicas a campo magnético

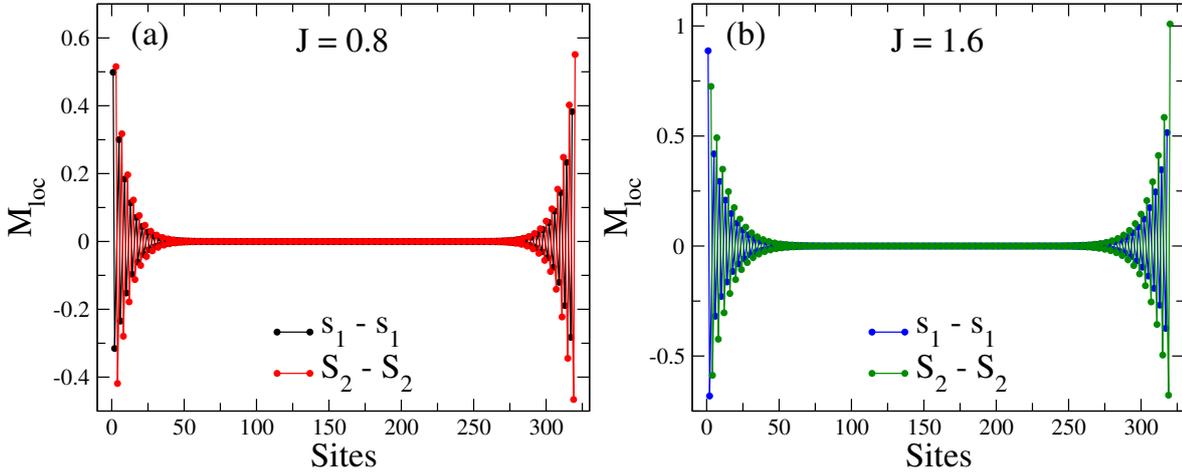
Figura 5.29: Distribuição espacial da magnetização por célula unitária  $M_{Cell}$  para interação de troca  $J = 1.60$  e diversos valores de campos magnéticos  $h$  indicados na figura. Temos um caso muito similar ao anterior, com o sistema apresentando novamente modos de bordas que permanecem mesmo para valores de campos magnéticos acima do valor crítico novamente  $h_c \approx 0.3$ . Esta também é uma fase topológica não trivial e uma análise mais aprofundada é necessária para entendermos a diferença entre esta e a fase não trivial para  $J = 0.8$ .



Fonte: Autor, (2023)

nulo. Temos a figura 5.30 em (a) a magnetização  $M_{loc}$  distribuída nos sítios da cadeia para interação de troca  $J = 0.8$ , onde destacamos com cores diferentes as sub-redes  $s_1 - s_1$  e  $S_2 - S_2$  com  $s_1 = 1$  e  $S_2 = 3/2$  respectivamente. Vemos que o sistema apresenta somente excitações magnéticas em suas bordas, com os spins individualmente se orientando anti-paralelos aos pares com magnitude que decai exponencialmente ao passo que penetramos o interior da cadeia, onde se destacamos que em ambas as bordas temos spins efetivos  $s' \approx 0.5$ . Já em (b) na mesma figura 5.30 temos uma situação similar, com excitações magnéticas em ambas as bordas que penetram o interior da cadeia com magnitude decaindo exponencialmente, novamente descanado as sub-redes  $s_1 - s_1$  e  $S_2 - S_2$ . Neste caso, vemos os modos de bordas são mais pronunciados em sua magnitude com  $S' \approx 1.0$ , o que distingue da fase topológica não trivial anterior. Temos então que a transição de fases quântica em  $J_{c_2}$  se trata de uma transição entre duas fases topológicas não triviais. Podemos então descrever as três fases de gap magnético zero no diagrama 5.16 a partir do formalismo VBS, onde temos em resumo a representação destas fases topológicas na figura 5.31, onde temos em termos dos spins virtuais  $s' = 0.5$  como as três fases podem ser descritas. Em (a) temos a fase topológica trivial induzida no diagrama de fases 5.16 pra interação de troca  $J < J_{c_1}$  onde não temos magnetização espontânea no modelo como já vimos nas curvas de magnetizações por célula para esse caso. Em (b) temos o primeiro caso de fase topológica não trivial para interações de troca  $J_{c_1} < J < J_{c_2}$ , onde temos modos de bordas  $s' = 1/2$  enquanto em (c) temos outra fase topológica não trivial para interações  $J > J_{c_2}$  com modos de bordas  $S' = 1.0$  induzidos. Vale então apontar adequadamente a diferença entre essas fases no diagrama de fases do modelo com um destaque nas fases topológicas induzidas a campo magnético nulo onde as transições topológicas de fato ocorrem, onde vemos em destaque essa região do diagrama de fases na figura 5.32.

Figura 5.30: Distribuição espacial da magnetização local  $M_{loc}$  a campo magnético nulo para  $J = 0.8$  e  $J = 1.6$  em (a) e (b). Temos em destaque as magnetizações da sub-rede  $s_1 - s_1$  e  $S_2 - S_2$  em ambos os cacos, onde em (a) temos modos de borda com magnitudes próximas a  $s' \approx 0.5$  enquanto em (b) temos modos de bordas mais expressivos, com magnitude próximas a  $S' \approx 1.0$ . Esse comportamento indica uma transição de fases entre duas fases topológicas não triviais com mecanismo de formação VBS distintos.



Fonte: Autor, (2023)

Figura 5.31: Figura representando o mecanismo de formação das três fases topológicas que surgem no modelo a partir do formalismo VBS. Em (a) temos a representação da fase topológica trivial para  $0.0 < J < J_{c1}$  onde vimos através das análises de magnetizações por célula e locais como o sistema não apresenta fases de bordas nesse regime. Para  $J_{c1} < J < J_{c2}$  temos uma fase topológica não trivial representada por (b) na figura, onde vamos poder observar modos de bordas com spins virtuais  $s' \approx 0.5$ . Em (c) temos uma outra fase topológica não trivial para  $J > J_{c2}$  onde efetivamente teremos modos de bordas distintos com spins virtuais  $S' \approx 1.0$ .

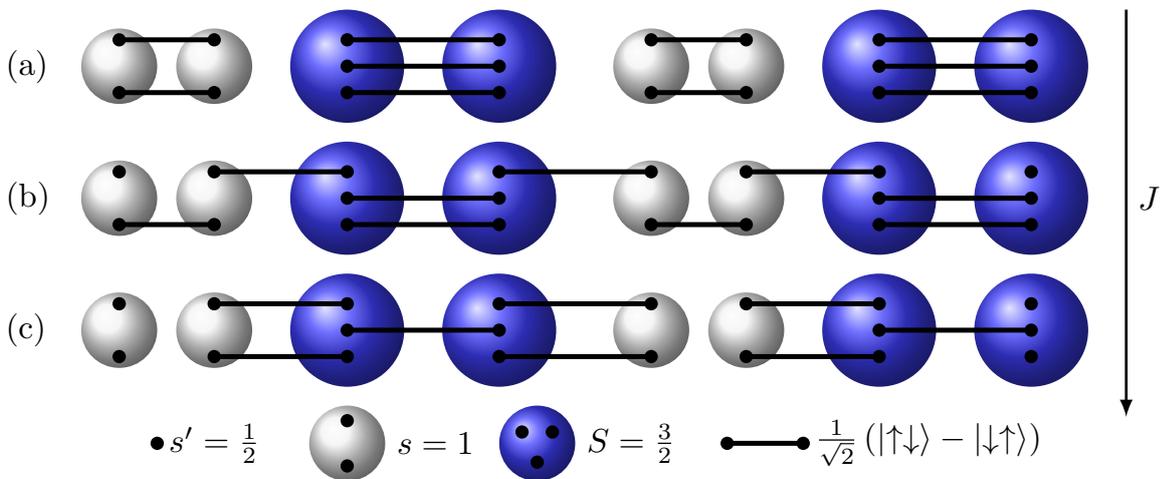
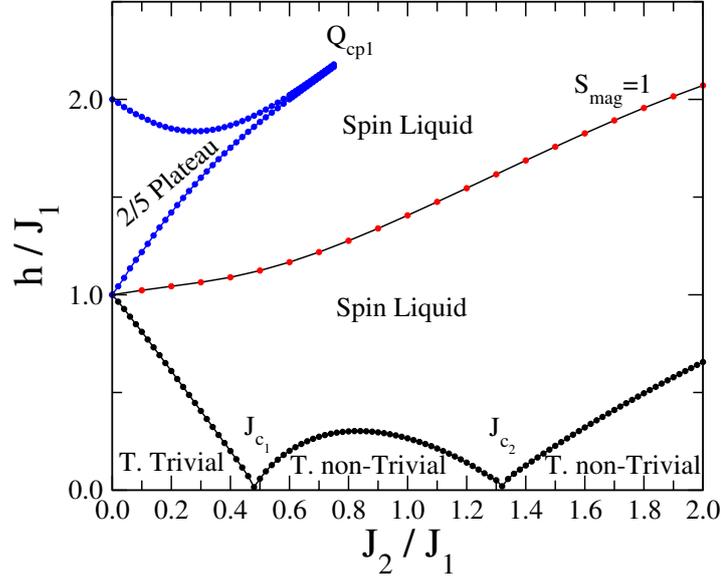


Figura 5.32: Temos acima o destaque na região do diagrama de fases 5.25 onde as fases de gap magnético zero surgem no modelo. Temos para  $J < J_{c_1}$  uma fase topológica trivial (T. Trivial), para  $J_{c_1} < J < J_{c_2}$  uma fase topológica não trivial (T. non-Trivial) e para  $J > J_{c_2}$  uma outra fase topológica não trivial (T. non-Trivial).

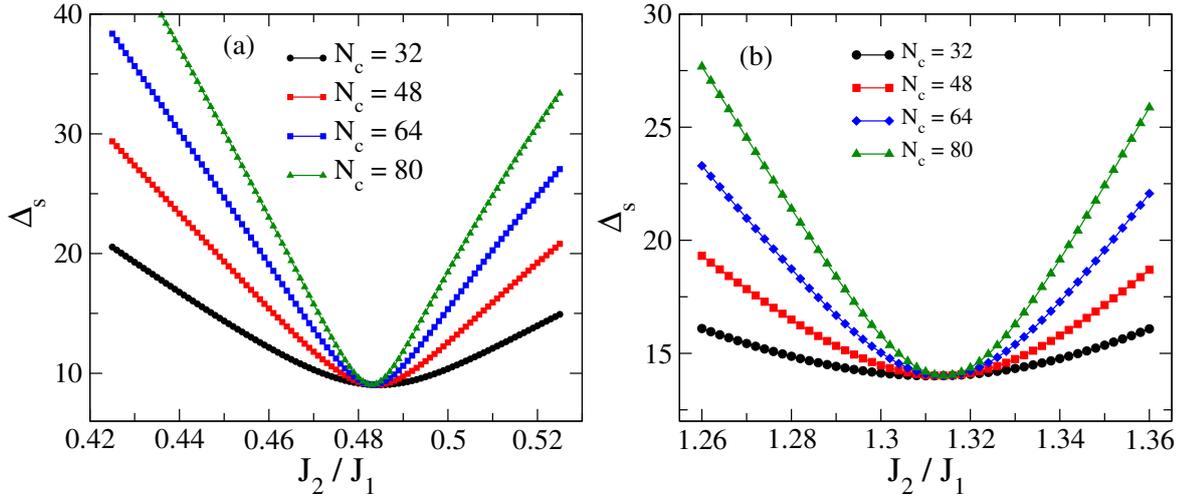


Fonte: Autor, (2023)

## 5.4.2 Caracterização das transições de fases topológicas

Discutidos nas sessões anteriores as fases quânticas que surgem no modelo Ferrimagnético tetrâmero ( $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$ ) com  $S_1 = 1$ ,  $S_2 = 3/2$  interagindo através do Hamiltoniano (5.8) onde vimos que o sistema apresenta transições de fases quânticas sucessivas entre fases topológicas distintas. Nessa sessão vamos implementar o método de escala tangencial de tamanho finito para caracterizar tais transições de fases no diagrama 5.16 nos pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$ . Como vimos, o primeiro passo do método consiste em calcular o gap de spin  $E_s$  do modelo adequado para condições abertas de contorno termos e para cadeias de tamanhos distintos em número de células unitárias  $N_c$  computamos as curvas de gap escalado  $\Delta = E_s N_c$  variando o parâmetro de controle da transição de fase, neste caso a interação de troca  $J = J_2/J_1$ . Assim contruímos a figura 5.33 com as curvas de gap escalado para as transições de fases topológicas nos pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$  em (a) e (b) respectivamente para tamanhos de cadeia  $N_c = 32, 48, 64, 80$  células unitárias. Vemos claramente que em ambos os casos as curvas de gap escalado tangenciam no ponto crítico que separa as duas fases com gap energético. No segundo passo do método, seguimos com as curvas de primeira derivada  $\alpha_s$  do gap de spin  $\Delta_s$  em relação a interação de troca  $J$  podemos identificar os pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$ . Vemos na figura 5.34 como podemos a partir do cruzamento das curvas  $\alpha_s$  nos pontos críticos determinar os valores de interação de troca  $J_{c_1} = 0.4828(3)$  e  $J_{c_2} = 1.3143(1)$  e também quantificar o valor de  $\alpha_s$  nos respectivos pontos. Lembramos que a forma de escala que introduzimos anteriormente é fundamental para validar o nosso método, onde consideramos que no ponto crítico a forma de escala de  $\Delta_s$  segue a lei [53]

Figura 5.33: Curvas de gaps escalados  $\Delta_s$  para os números de células unitárias  $N_c$  dados nos pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$  do diagrama de fases 5.25 em (a) e (b) respectivamente.

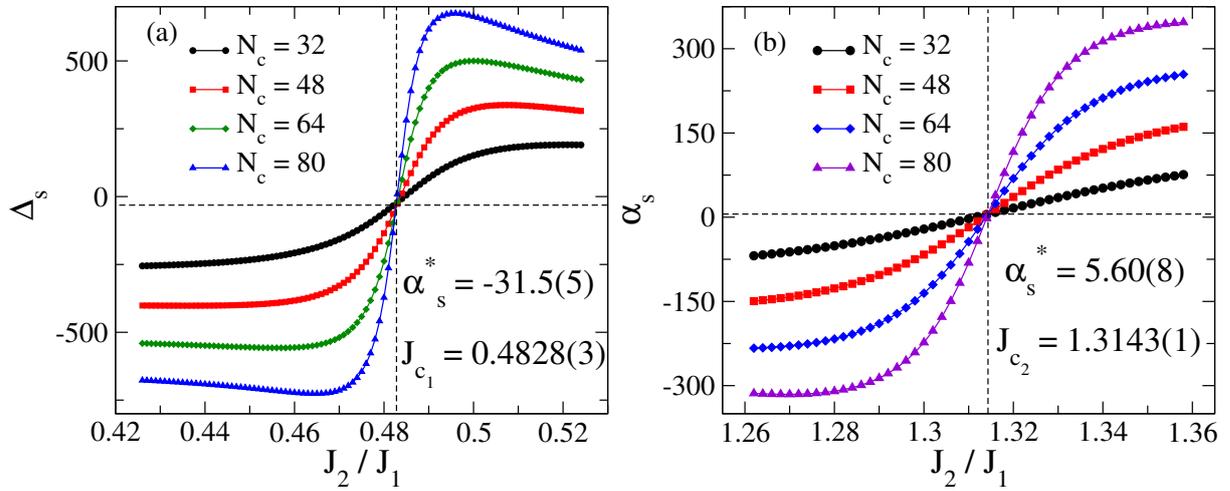


Fonte: Autor, (2023)

$$\Delta_s = (J - J_c)\alpha_s^* + g \left[ (J - J_c)\tilde{N}^{1/\nu} \right] \quad (5.10)$$

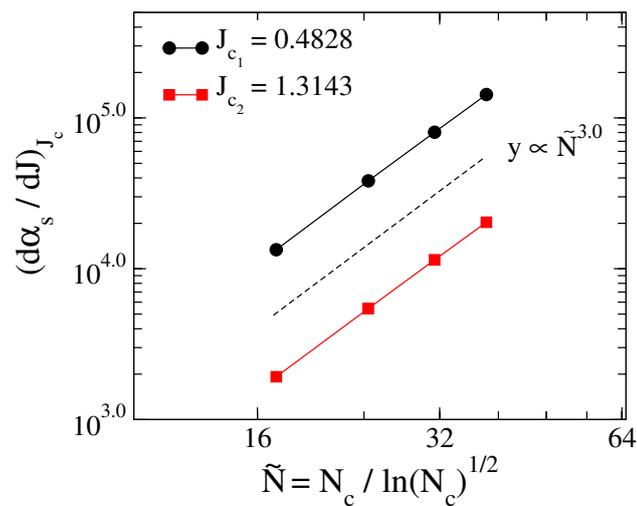
com  $\alpha_s^*$  a derivada do gap escalado no ponto crítico e  $\tilde{N} = N_c/\ln(N_c)^{0.5}$  neste caso. Explorando a forma de escala acima podemos a partir do cálculo da segunda derivada do gap escalado nos pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$  determinar individualmente cada expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu$  relacionado. Vemos na figura 5.35 os valores de  $d\alpha_s/dJ$  no ponto crítico para diversos tamanhos de cadeia incluindo as correções logarítmicas onde obtemos o expoente crítico  $2/\nu = 3$  o que é um indicativo que ambas as transições de fases topológicas pertencem a mesma classe de universalidade  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten como nos casos anteriores. O último passo do método consiste em validar as medidas de pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$  e expoentes críticos  $\nu$  a partir do colapso dos dados do gap escalado seguindo a forma de escala dada pela equação (5.10). De fato, temos na figura 5.36 a validação do método com o colapso dos dados do gap escalado  $\Delta_s$  nos pontos críticos  $J_{c_1}$  em (a) e  $J_{c_2}$  (b) onde em ambos os casos o comportamento universal em cada ponto crítico separadamente segue forma de escala (5.10) e independente dos tamanhos de cadeia considerados para o dado expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu = 2/3$ . Esta última análise valida o argumento de as transições de fases topológicas nesta classe de modelo ferrimagnético tetrâmico  $(1 - 1 - 3/2 - 3/2)$  com interações de Heisenberg alternadas independentem da natureza de seus spins.

Figura 5.34: Primeira derivada  $\alpha_s$  do gap escalado  $\Delta_s$  para os dados tamanhos de cadeia  $N_c$  nos pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$  em (a) e (b) respectivamente.



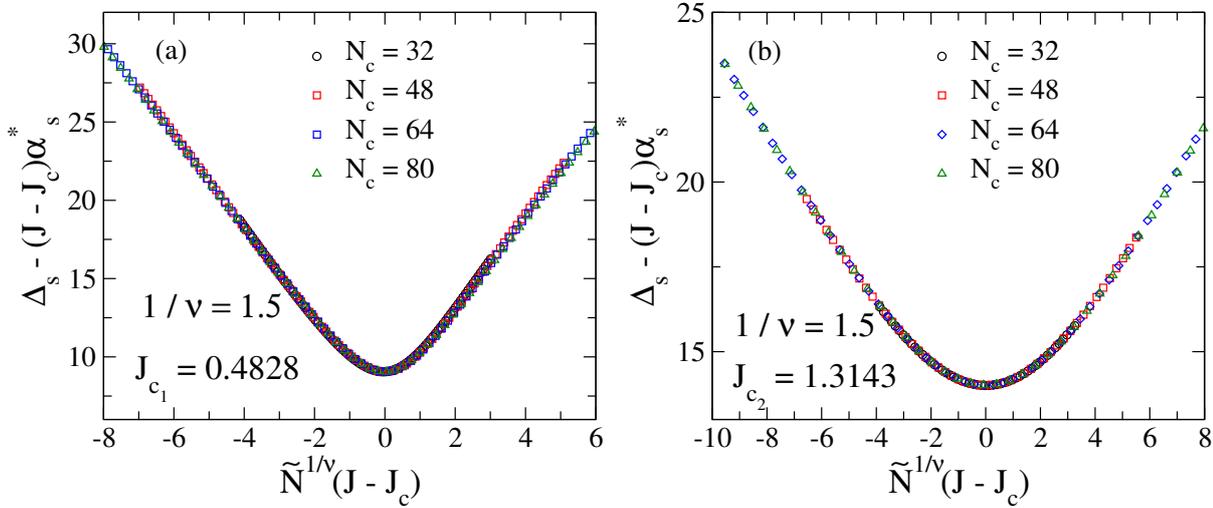
Fonte: Autor, (2023)

Figura 5.35: As segundas derivadas no gap escalado  $\alpha_s$  calculadas nos pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$  para os tamanhos de cadeias considerados incluindo a correção logarítmica  $\tilde{N} = N_c / \ln(N_c)^{0.5}$ . Temos a linha tracejada  $y$  correspondendo a regressão em lei de potências com  $d\Delta_s/dJ_c = \tilde{N}^{2/\nu}$  com  $\nu = 2/3$ .



Fonte: Autor, (2023)

Figura 5.36: As curvas de colapso dos dados do gap escalado  $\Delta_s$  quando reescritos em função da forma de escala  $g(x)$  onde vemos ambas as curvas segundo um comportamento universal independente do tamanho da cadeia  $N_c$  para o expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu = 2/3$  e os dados pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$ .



Fonte: Autor, (2023)

## 5.5 Conclusões e Perspectivas

Neste capítulo investigamos uma classe de modelos de spins Ferrimagnéticos tetrâmeros ( $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$ ) com interações de Heisenberg alternadas e isotrópicas utilizando o método numérico DMRG. Exemplos dessa classe de modelos de spins interagentes fora investigados anteriormente [174–179] onde vimos ricos diagrama de fases e fenômenos críticos, com um exemplo desses modelos sendo um modelo muito simplificado para tentar descrever as propriedades magnéticas do material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$  [89, 90, 187–189] no limite de cadeias de dímeros desacopladas. Na primeira parte do capítulo investigamos o diagrama fases 5.3 do modelo para  $S_1 = 1/2$  e  $S_2 = 5/2$  no espaço de parâmetros  $(h/J_1, J_2/J_1)$  onde identificamos fases quânticas de platô de magnetização  $0, \frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}, \frac{5}{6}$  conectadas por regimes de líquidos de spins de Tomonaga-Luttinger. Discutimos ainda os regimes distintos de formação do platô de magnetização 0 separados por um ponto crítico a campo magnético nulo onde uma transição de fases topológica ocorre, onde analisando as curvas de magnetização por célula unitária  $M_{cell}$  e magnetização local  $M_{loc}$  identificamos os mecanismos de formação dessas duas fases a partir do formalismo VBS separando as fases topológica trivial para  $J < J_c$  e topológica não trivial para  $J > J_c$ . Para entendermos melhor a natureza dessa transição de fase implementamos o método de escala tangencial de tamanho finito [53], introduzido no capítulo anterior, onde incluímos a correção logarítmica típica de modelo [194, 195] e em outros modelos de spins interagentes que que apresentam simetria  $SU(2)$  [160, 194]. Concluímos de nossa análise que a transição de fases topológica que ocorre no modelo pertence a classe de universalidade  $SU(2)_1$  Wess-Zumino-Witten, com expoente crítico do comprimento de correlação  $\nu = 2/3$  e ponto crítico  $J_c = 0.4559$ . O conjunto dos resultados desta primeira parte foi publicado na revista *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* [196]. Em seguida investigamos a possível universalidade das transições de fases quânticas para a classe de

modelos tetrâmeros  $(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S)$  com  $S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2e\frac{5}{2}$ . Tomamos como referência o modelo para  $S = 1$  e repetimos a análise feita na primeira sessão do capítulo, onde verificamos uma fenomenologia similar no diagrama de fases a campo nulo, apresentando um ponto crítico que separa a fase de platô de magnetização zero em dois regimes. Caracterizamos as fases quânticas do modelo analisando as curvas de magnetização reduzida  $m$  e a distribuição espacial da magnetização por célula  $M_{cell}$  e a partir da implementação do método de escala tangencial de tamanho finito caracterizamos a transição de fase topológica. Investigamos ainda as transições de fases topológicas para a classe de modelos considerando diferentes valores de  $S$  e verificamos a universalidade dessas transições do tipo  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten. Por fim investigamos outro modelo de cadeia tetrâmera  $(1 - 1 - \frac{3}{2} - \frac{3}{2})$ , onde obtivemos um rico diagrama de fases do modelo e discutimos as fases quânticas que este apresenta a partir de análises similares de curvas de magnetização. O diagrama desse modelo apresenta dois pontos críticos  $J_{c_1}$  e  $J_{c_2}$  que também foram caracterizados utilizando o método de escala tangencial de tamanho finito, onde demonstramos que ambas as transições também são universais e pertencentes a class de  $SU(2)_1$  Wess-Zumino-Witten.

Algumas possibilidades para trabalhos futuros é considerar adicionar termos no Hamiltoniano da cadeia ferrimagnética tetrâmera que reduza a simetria  $SU(2)$  a um grupo de simetria reduzido que estabilize as possíveis fases topológicas do modelo. Um caso que temos em mente é investigar o modelo ferrimagnético tetrâmero  $(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - 1 - 1)$  considerando anisotropias de campo cristalino  $D \sum_i S_i^{z^2}$  que preserve a simetria de inversão do modelo e atua somente no operador de spin  $S = 1$  uma vez que a interação de campo cristalino para partículas de spin  $s = \frac{1}{2}$  é irrelevante para a física do modelo. Acredito que a combinação de interações de troca isotrópicas e alternadas entre os dímeros que compõem a cadeia adicionada a anisotropia de campo cristalino para o caso citado afetaria o diagrama de fases (5.16) e os fenômenos críticos do modelo.

# Capítulo 6

## Ordem Topológica Protegida por Simetria induzidas por Dissipação.

### 6.1 Introdução

Vimos nos capítulos anteriores que ordens topológicas da matéria [109, 110] são fases quânticas distintas com emaranhamento de curto alcance. Algumas dessas fases também são protegidas por simetrias existentes no modelo, sendo assim denominadas fases topológicas protegidas por simetria (SPT). Um exemplo arquetípico é o modelo 1d AKLT [18, 197], onde  $Z_2 \otimes Z_2$  e a simetria de reversão temporal protegem um padrão de emaranhamento que dá origem a parâmetros de ordem de string diferentes de zero [104], modos de borda fracionários de spin-1/2 [18] e padrão de degenerescência no espectro de emaranhamento [198], que sobrevivem sob a ação de perturbações preservadoras de simetria para estados puros [21, 22]. A presença de modos de borda impede que tais fases topológicas sejam continuamente deformadas em uma fase topologicamente trivial sem passar por uma transição de fase quântica, onde os modos de borda penetram no interior da cadeia e o gap de energia do sistema se fecha.

Um problema importante que ganhou atenção nos últimos anos é como combinar efetivamente ordem topológica e dissipação [199–202]. Isso se deve ao enorme potencial emergente de efeitos dissipativos na computação quântica [202, 203] e na ciência dos materiais [10, 111]. Recentemente, uma proposta de fases topológicas da matéria para estados mistos foi introduzida [204] a partir da definição de evolução dissipativa rápida para Lindbladianos locais, simétricos e independentes do tempo. Com essa definição, os autores demonstram que a ordem SPT é destruída sob a dissipação. Um trabalho recente [205] buscou esclarecer a relação entre dissipação e simetria para fases topológicas protegidas por simetria, onde foi introduzida uma condição para dinâmica dissipativa que preservasse o ordenamento topológico. Essa condição é denominada "condição de simetria forte" e garante a preservação do parâmetro de ordem *string* para SPT sob dissipação satisfazendo a condição de simetria forte [205]. Vamos utilizar essa definição neste trabalho e formalmente introduzir os conceitos de condições de simetrias fraca e forte dada pelo já

citado artigo.

Seja a equação mestra de Lindblad dada por :

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}[\rho] = -i[\mathcal{H}, \rho] + \gamma \sum_{\mu} \left( L_{\mu} \rho L_{\mu}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}, \rho\} \right), \quad (6.1)$$

onde  $\rho$  é a matriz de densidade do sistema,  $\mathcal{L}$  é o superoperador de Liouville,  $\mathcal{H}$  o hamiltoniano do sistema quântico e  $L_{\mu}$  e  $L_{\mu}^{\dagger}$  são os operadores de Lindblad responsáveis em descrever a interação entre o sistema e o ambiente. O índice  $\mu$  representa o sítio onde cada operador dissipativo atua no sistema. Ainda, o termo  $\{L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}, \rho\}$  representa a relação de anti-comutação entre os operadores. Seja um dado grupo de simetria  $U$  onde teremos  $U_g$  o operador que representa a ação do grupo de simetria no sistema como um todo. Definimos o canal de simetria implementada  $\mathcal{U}_g(\rho)$  por [205]

$$\mathcal{U}_g(\rho) = U_g \rho U_g^{\dagger} \quad (6.2)$$

teremos que, na linguagem de Lindbladianos  $\mathcal{L}$  podemos definir as condições de simetrias fraca e fortes respectivamente. Seja uma dinâmica dissipativa regida pelo Lindbladiano  $\mathcal{L}$  sob dissipação global definida por operadores de linblad locais  $L_{\mu}$ . A condição simétrica fraca é satisfeita se  $\mathcal{L}$  é invariante sob a transformação

$$\mathcal{U}_g \cdot \mathcal{L} \cdot \mathcal{U}_g^{\dagger} = \mathcal{L}, \quad \forall g \quad (6.3)$$

neste caso teremos que a dinâmica dissipativa regida pelo Lindbladiano  $\mathcal{L}$  destroi o ordenamento SPTO, assim como na condição dada pelo trabalho anterior utilizando a definição de evolução dissipativa rápida [205]. Na prática essa definição satisfaz a condição de simetria fraca, o que explica a destruição do ordenamento topológico. Novamente, seja a dinâmica dissipativa regida pelo Lindbladiano  $\mathcal{L}$  sob dissipação global definida por operadores de linblad locais  $L_{\mu}$ . Definimos a condição de simetria forte quando os operadores locais do grupo de simetria  $U_g$  comutam com os operadores de Lindblad  $L_i$  e com o hamiltoniano do sistema  $\mathcal{H}$ , ou seja

$$U_g L_i = L_i U_g, \quad U_g \mathcal{H} = \mathcal{H} U_g, \quad \forall i, g \quad (6.4)$$

de modo que a dinâmica dissipativa dada por  $\mathcal{L}$  preserva a ordem SPT. Neste capítulo exploramos os conceitos de condição de simetrias fraca e forte para avaliar o ordenamento SPT em um modelo físico de interesse. Em particular, consideramos a ação da dissipação simétrica em uma fase SPT unidimensional e a avaliamos em termos de grandezas matemáticas, como a degenerescência dos coeficientes de Schmidt da representação da rede de tensores do estado misto. No caso de estados puros, tais coeficientes de Schmidt se relacionam diretamente com o espectro de emaranhamento do estado. Em estados mistos, no entanto, tais coeficientes não têm uma interpretação física que os relacione

com o emaranhamento do sistema de forma direta, mas, como veremos, oferecem também uma ferramenta matemática válida para avaliar padrões de longo alcance de correlações (clássica e quântica) no estado misto.

Em particular, consideramos o modelo unidimensional AKLT interagindo com um ambiente, onde a dinâmica Markoviana é dada por uma equação mestra de Lindblad. Os operadores de dissipação são escolhidos para manter (simétrico) ou quebrar (assimétrico) a simetria de reversão temporal. Na linguagem de condisão de simetrias, dissipação simétrica obedece a condição forte de simetria enquanto a dissipação assimétrica não obedece tal condição. Mostramos, por meio de simulações numéricas utilizando a teoria de redes de tensores, como esses dois casos levam a estados estacionários com propriedades muito diferentes em termos de correlações de longo alcance e outras assinaturas típicas de ordem SPT.

## 6.2 Métodos de Redes de Tensores para Sistemas Dissipativos

Como vimos um sistema quântico aberto é descrito pela dinâmica da matriz densidade  $\rho(t)$ . Para processos Markovianos o gerador da evolução temporal é o superoperador de Liouvillian  $\mathcal{L}$ , onde a dinâmica dissipativa do sistema quântico é governada pela equação mestra para a matriz densidade reduzida. A equação mestra é dada pela seguinte expressão

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}[\rho] = -i[\mathcal{H}, \rho] + \gamma \sum_{\mu} \left( L_{\mu} \rho L_{\mu}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}, \rho\} \right), \quad (6.5)$$

novamente teremos  $\rho$  a matriz de densidade do sistema,  $\mathcal{L}$  o superoperador de Liouville,  $\mathcal{H}$  o hamiltoniano do sistema quântico e  $L_{\mu}$  e  $L_{\mu}^{\dagger}$  os operadores de Lindblad responsáveis em descrever a interação entre o sistema e o ambiente. O índice  $\mu$  representa o sítio onde cada operador dissipativo atua no sistema. Ainda, o termo  $\{L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}, \rho\}$  representa a relação de anti-comutação entre os operadores. Com o desenvolvimento da teoria de redes de tensores e novos algoritmos naturalmente ferramentas para o estudo de sistemas quânticos abertos foram propostas. Em 2004 Verstraete *et al* [151] introduziu o conceito de operador densidade em produto de matrizes (MPDO) que é uma extensão natural da linguagem de MPS de estados puros para representar uma matriz densidade de um estado quântico misto. Seja então uma função de onda  $|\psi\rangle$  escrita no formalismo MPS dada por

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_N} A_1^{s_1} \dots A_N^{s_N} |s_1, \dots, s_N\rangle \quad (6.6)$$

como já vimos, as matrizes  $A$  são tensores com dimensão de ligação  $\chi$  limitada por um valor máximo  $\chi_{\max}$  e  $d$  é a dimensão do espaço de Hilbert local  $s_i$  associado ao sítio  $i$ . Um MPDO  $\rho$  então para um sistema de  $N$  sítios de dimensão local  $d$  é descrito por

$$\rho = \sum_{s_1, s'_1, \dots, s_N, s'_N=1}^d \left( M_1^{s_1, s'_1} \dots M_N^{s_N, s'_N} \right) |s_1, \dots, s_N\rangle \langle s'_1, \dots, s'_N| \quad (6.7)$$

onde  $M^{s_k, s'_k}$  é uma matriz  $D_k^2 \times D_{k+1}^2$  que pode ser decomposta como

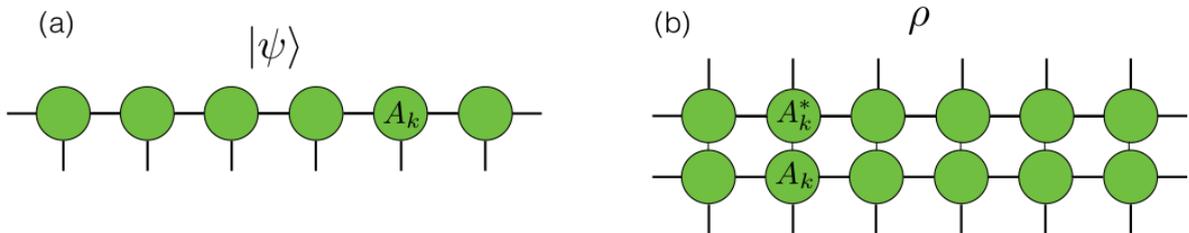
$$M_k^{s, s'} = \sum_{\alpha=1}^{d_k} A_k^{s, \alpha} \otimes \left( A_k^{s', \alpha} \right)^* \quad (6.8)$$

com  $d_k$  de dimensão mínima  $dD_kD_{k+1}$  e as matrizes  $A_k^{s, \alpha}$  matrizes  $D_k \otimes D_{k+1}$ . Tal construção da matriz densidade do modelo como um MPDO garante a positividade de  $\rho$  [151]. É possível representar uma matriz densidade na forma MPDO em termos de estados puros em MPS considerando um espaço de Hilbert expandido utilizando o conceito de purificação [71]. Esse processo é feito associando para cada sítio representando o espaço local um espaço de Hilbert auxiliar de dimensão  $d_k$ . Assim podemos escolher uma nova base ortogonal para esse sistema  $|s_k, a_k\rangle$  para o índices dos espaços locais e do espaço auxiliares. O sistema correspondente no formalismo MPS então pode ser escrito como :

$$|\Psi\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_N} \sum_{a_1, \dots, a_N} A_1^{s_1, a_1} \dots A_N^{s_N, a_N} |s_1 a_1, \dots, s_N a_N\rangle \quad (6.9)$$

A matriz densidade  $\rho$  no formalismo MPDO é obtido então fazendo o traço sob os estado auxiliares,  $\rho = Tr_a (|\Psi\rangle \langle\Psi|)$ . A evolução temporal do Hamiltoniano do estado misto então é obtida através de um método iterativo para atualizar as matrizes  $A_k$  similar ao método DMRG. O método pode ser utilizado para reconstruir a matriz densidade reduzida do sistema para qualquer tempo da evolução temporal e então seguir com as medidas de observáveis de interesse.

Figura 6.1: Em (a) um exemplo da função de onda  $|\psi\rangle$  em MPS para seis sítios com dimensão do espaço de Hilbert local  $d$ . Em (b) a matriz densidade  $\rho$  escrita em MPDO, o equivalente do formalismo MPS para operadores. Essa construção garante a positividade de  $\rho$ .



Fonte : Daniel Jaschke *et al*, (2022) [206]

Outra estratégia para investigar a dinâmica dissipativa de sistemas quânticos abertos utilizando técnicas de redes de tensores foi proposta por Zwolak e Vidal. Essa estratégia adapta o método TEBD para o estudo de dinâmica Markoviana descrita pela evolução temporal da matriz densidade  $\rho$  a partir da equação mestra (6.5). A ideia central do

método é "vetorizar" a matriz densidade a partir do isomorfismo de Choi, onde escrevermos  $\rho = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \rightarrow |\rho\rangle_{\#} = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \otimes |\Psi_i\rangle$  com  $|\rho\rangle_{\#}$  é a matriz densidade vetorizada. Na prática, o isomorfismo de Choi é somente um truque matemático que nos permite mapear os coeficientes de uma matriz  $\chi \times \chi$  em vetor  $chi^2$ , organizando os termos nas bases equivalentes. Em outras palavras, remodelamos a matriz densidade escrita na forma MPDO unindo o índice locais de dimensão  $d$  de cada tensor  $\Gamma$  referente aos estados "bra" ao índice relacionados ao estados "ket", formando um espaço de Hilbert com dimensão  $d^2$ . Dessa forma vetorizada então  $|\rho\rangle_{\#}$  é definido em um espaço de Hilbert  $\mathcal{C}_{d^2}^{\otimes N}$  e a equação mestra pode ser então escrita em uma forma vetorizada em uma equação do tipo Schrodinger. O estado misto então fica escrito na seguinte maneira

$$|\rho\rangle_{\#} = \sum_{i_1=0}^{d^2-1} \cdots \sum_{i_N=0}^{d^2-1} c_{i_1 \dots i_N} |i_1\rangle_{\#} \otimes \cdots \otimes |i_N\rangle_{\#} \quad (6.10)$$

onde  $|i_k\rangle_{\#}$  é a base ortonormal de  $\mathcal{C}_d^2$  para o sítio  $k$ . Temos na figura 6.2 a representação em diagramas de redes de tensores da construção da matriz densidade vetorizadas em termos dos tensores  $\Gamma$  e  $\lambda$ . Se considerarmos que o hamiltoniano do modelo detem apenas termos de interação de primeiros vizinhos, o superoperador de Liouville  $\mathcal{L}$  pode então decomposto em uma soma de operadores locais  $\mathcal{L}[\rho] = \sum_k \mathcal{L}_{k,k+1}$  de modo que podemos utilizar então o algoritimo TEBD para resolver a equação mestra (6.5) partindo de uma matriz densidade vetorizada  $|\rho\rangle_{\#}$ .

A equação mestra (6.5) então pode ser escrita na forma vetorizada

$$\frac{d}{dt} |\rho\rangle_{\#} = \mathcal{L}_{\#} |\rho\rangle_{\#} \quad (6.11)$$

onde o superoperador de Liouville vetorizado  $\mathcal{L}_{\#}$  tem a forma

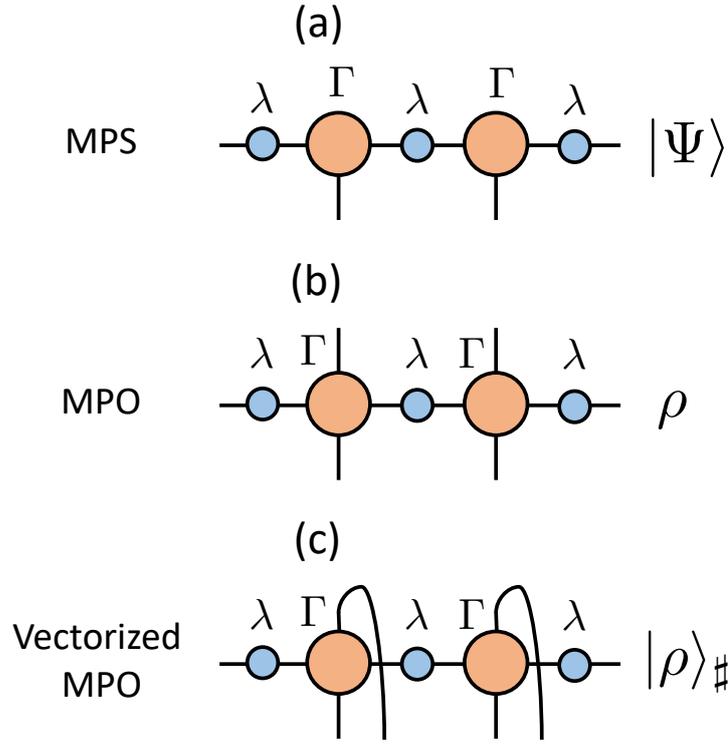
$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\#} &\equiv - (H \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes H^T) \\ &+ \sum_{\mu} \left( L_{\mu} \otimes L_{\mu}^* - \frac{1}{2} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \otimes \mathbb{1} - \frac{1}{2} \mathbb{1} \otimes L_{\mu}^* L_{\mu}^T \right). \end{aligned} \quad (6.12)$$

onde na expressão acima o produto tensor  $\otimes$  é utilizado para organizar os termos "bra" e "ket" da matriz densidade original  $\rho$ . Tomando que  $\mathcal{L}_{\#}$  é independente do tempo, podemos escrever então

$$|\rho(t)\rangle_{\#} = e^{t\mathcal{L}_{\#}} |\rho(0)\rangle_{\#} \quad (6.13)$$

que para tempos grandes o suficientes essa evolução nos leva ao ponto fixo da dinâmica Markoviana dada pelo estado estacionário

Figura 6.2: Diagrama de redes de tensores para sistemas quânticos unidimensionais com célula unitária de um sítio. Em (a) temos uma função de onda  $|\Psi\rangle$  no formalismo MPS na notação  $\Gamma, \lambda$ . Em (b) temos um MPO para a matriz densidade  $\rho$  também utilizando a mesma notação, onde os tensores  $\Gamma$  tem grau quatro de dimensões  $(\chi, d, d, \chi)$ . Após vetorizar a matriz densidade  $\rho$  a partir do isomorfismo de Choi obtemos  $|\rho\rangle_{\#}$ , um MPO onde cada tensor  $\Gamma$  tem grau três com dimensões  $(\chi, d^2, \chi)$ . As matrizes  $\lambda$  são diagonais e correspondem a os coeficientes (reais e positivos) de Schmidt das possíveis bipartições e são associados com o espectro de emaranhamento  $\xi_{\alpha} = -2 \log(\lambda_{\alpha})$  para estados puros representados em (a).



Fonte : Autor, (2022) [207]

$$|\rho_s\rangle_{\#} = \lim_{t \rightarrow \infty} |\rho(t)\rangle_{\#} \quad (6.14)$$

Podemos inferir a partir das equações acima que o estado estacionário  $|\rho_s\rangle_{\#}$  é obtido no ponto fixo da evolução dada pela equação (6.11) dado pelo autovetor de  $\mathcal{L}_{\#}$  de autovalor correspondente nulo, com

$$\mathcal{L}_{\#} |\rho_s\rangle_{\#} = 0 \quad (6.15)$$

onde podemos utilizar o resultado da equação (6.15) como critério de término de nossa dinâmica Markoviana. Assim, podemos definir o parâmetro de convergência  $\Delta = \# \langle \rho_s | \mathcal{L}_{\#} | \rho_s \rangle_{\#}$  como um critério de obtenção de uma boa aproximação para o estado estacionário com  $\Delta \approx 0$ .

O método introduzido por Zwolak e Vidal é eficiente em seu propósito, nos permitindo investigar a dinâmica de sistemas quânticos abertos a partir de adaptações do

método TEBD. Além disso o método é numericamente eficiente, uma vez que não necessitamos estudar a dinâmica da matriz densidade de interesse com um espaço de Hilbert expandido por bases auxiliares, como no método anterior. Porém, as aproximações utilizadas no método não garantem a propriedade de positividade de  $\rho$  [56]. Então podemos definir outro parâmetro de precisão numérica  $\epsilon_n$  como a soma dos autovalores negativos da matriz reduzida  $\rho_n$  do sistema, dado por

$$\epsilon_n = \sum_{i|\nu_i < 0} \nu_i(\rho_n) \quad (6.16)$$

onde  $\rho_n$  é a matriz densidade reduzida no estado estacionário para  $n$  sítios e  $\nu_i(\rho_n)$  os seus autovalores, onde somente os negativos dentro de um limite é considerado. Em um mapeamento exato da matriz densidade essa quantidade deve ser rigorosamente zero. Entretanto dada as aproximações implícitas do método podemos ter uma parte dos autovalores negativos de valores pequenos, o que pode ser quantificado como outra medida de erro. Neste trabalho implementamos o método TEBD para o estudo de dinâmica dissipativas para um sistema quântico infinito. Em nossas simulações utilizamos medidas de precisão numérica  $\Delta$  e  $\epsilon_n$  como guia do quão próximo do estado estacionário  $|\rho_s\rangle$  estamos. Ainda, utilizei a linguagem de programação Python 3 com o auxílio do pacote ncon [208] para nos auxiliar nas contrações necessárias no algoritmo TEBD. Em nossas simulações, uma dimensão de ligação  $\chi_{\max} = 10$  se mostrou suficiente na obtenção do estado fundamental do modelo AKLT e no estudo da dinâmica dissipativa de sua matriz densidade.

### 6.3 O modelo AKLT sob dissipação

Vamos considerar o modelo AKLT dado pelo hamiltoniano com interações de troca linear e bi-lineares dado por :

$$H = \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{3} \left( \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \right)^2, \quad (6.17)$$

com o operador de spin  $S = 1$ . O estado fundamental do modelo acima pode ser obtido exatamente, sendo uma fase topológica protegida por simetria [18]. De fato, três simetrias fazem um papel importante em estabelecer essa ordem topológica não trivial : simetria de reversão temporal, simetria de inversão espacial e a simetria  $\mathcal{Z}_2 \times \mathcal{Z}_2$  (rotação de  $\pi$  sob dois eixos ortogonais) [18,21,143] onde somente o estabelecimento de uma dessas simetrias é suficiente para a estabilização dessas fases para estados puros. Neste capítulo vamos investigar os efeitos de diferentes dissipações na ordem topológica do modelo AKLT investigando a dinâmica da equação mestra de Lindblad para o modelo. Para tal, consideramos dois tipos de dissipação representados pelos operadores de Lindblad  $L_\mu$  relacionados a quebra ou não da simetria de reversão-temporal. No primeiro caso vamos considerar o caso em que a dissipação quebra explicitamente a simetria de reversão-temporal do modelo tomando os operadores de Lindblad  $L_\mu S^z$ . Vamos denominar esse tipo de dissipação

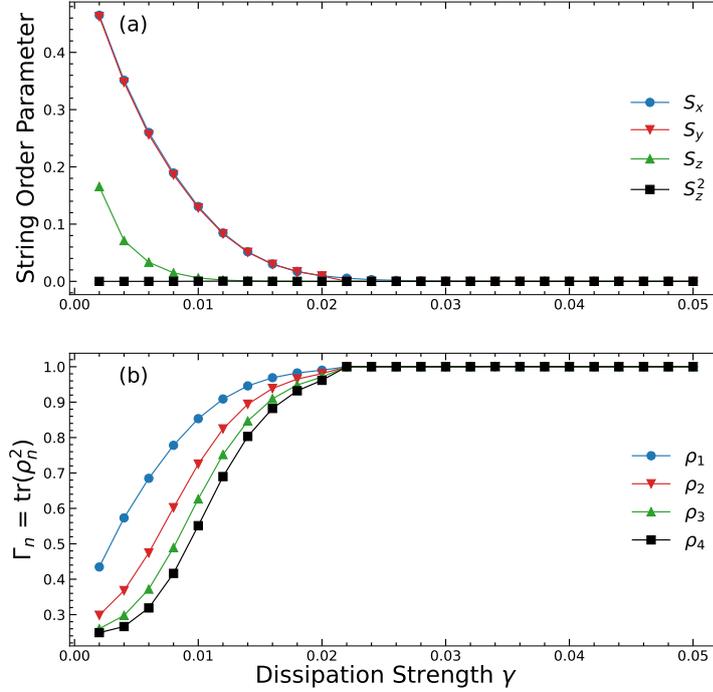
assimétrica. No segundo caso, tomamos o caso de uma dissipação que preserva a simetria de reversão-temporal, tomando  $L_\mu = S_z^2$  no qual denominamos dissipação simétrica. Dessa forma resolvemos a dinâmica Markoviana implementando o método TEBD para um sistema infinito onde ao término de nossa evolução temporal fizemos as nossas medidas de observáveis de interesse. Primeiro, calculamos a pureza  $\Gamma_n = \text{tr}(\rho_n^2)$  do estado estacionário  $|\rho_s\rangle_\#$  e ainda o parâmetro de ordem  $\mathcal{O}_S^\alpha$  já introduzido anteriormente

$$\mathcal{O}_S^\alpha = \lim_{|r| \rightarrow \infty} \left\langle S_i^\alpha e^{i\pi \sum_{l=1}^{j-1} S_l^\alpha} S_j^\alpha \right\rangle, \quad (6.18)$$

com  $S_S^\alpha$  a componente  $\alpha$  do operador de spin  $S = 1$  no sítio  $S_i$ . A quantidade acima nos permite identificar a ordem topológica em fases não triviais em sistema quânticos infinitos por exemplo, onde não temos acesso às bordas. Apesar de ser efetiva na identificação da ordem topológica como nas fases de Haldane e AKLT, a medida isolada de  $\mathcal{O}_S^\alpha$  não é suficiente para determinarmos se estamos lidando com uma fase topológica ou não, uma vez que esta quantidade tem valores finitos para outras fases não topológicas [82, 104, 108]. Por ultimo, fizemos a medida do espectro de Schmidt da matriz densidade mista do modelo  $\xi = -2\log(\lambda_\alpha)$  onde  $\lambda_\alpha$  são os  $\alpha$  valores mais relevantes no espectro de Schmidt. Para estados puros, essa quantidade é denominada espectro de emaranhamento, e apresenta um padrão degenerado em todo o seu espectro para fases topológicas não triviais [21–24, 132, 143]. Isso ocorre porque, dada a bipartição de sistema quântico em dois subgrupos em uma fase topológica não trivial, teremos a criação de um par de spins fracionários no ponto de separação da cadeia como um reflexo dos modos de borda típicos dessas fases. Então, a degenerescência do espectro de emaranhamento  $\xi_\alpha$  é um reflexo direto da fracionalização dos graus de liberdade e da presença dos modos de borda em fases topológicas não triviais, servindo como uma medida robusta de identificação dessas fases para estados puros.

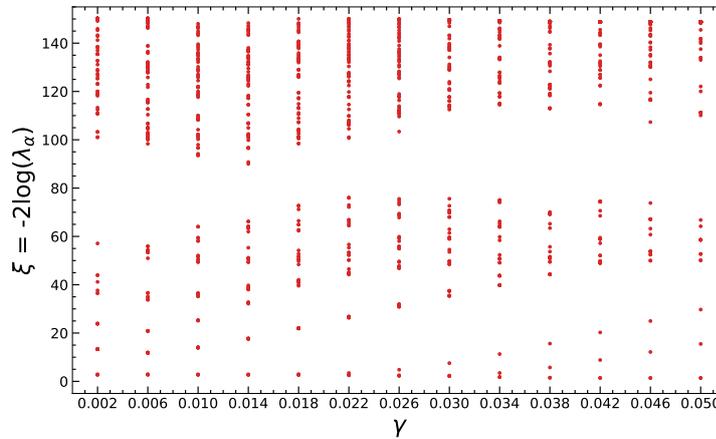
No primeiro caso consideramos a dissipação assimétrica  $L_\mu = S_z$ , partimos do estado AKLT e calculamos o estado estacionário sob dissipação para  $\gamma$  até 0.05 que, como veremos, já é grande o suficiente para nossos propósitos. O parâmetro de ordem de string  $\mathcal{O}_S^\alpha$  para  $\alpha = x, y, z, z^2$  e pureza  $\Gamma_n$  são mostrados na Fig.6.3. Nos gráficos, vemos que a ordem magnética e o parâmetro de ordem  $\mathcal{O}_S^\alpha$  decai rapidamente com a força de dissipação e se torna insignificante para  $\gamma > 0.02$ , sinalizando que a ordem topológica protegida por simetria(SPT) inicialmente presente no estado AKLT não permanece sob esse tipo de dissipação. De fato, nossos cálculos também são compatíveis com um estado estacionário puro, já que a pureza também vai para o valor trivial  $\Gamma_n = 1$  rapidamente. Ainda, o espectro  $\xi_\alpha$  é mostrado na Fig.6.4 para os diferentes valores de intensidade de dissipação  $\gamma$ . Como podemos ver na figura, o espectro não mostra os padrões típicos de degeneração da ordem SPT para qualquer valor de  $\gamma$ . Todas essas observações mostram que a ordem SPT é destruída por esse tipo de dissipação não simétrica. Este resultado está de acordo com investigações anteriores da estabilidade de fases topológicas protegidas por simetria para isolantes topológicos não interativos acoplados a um ambiente de quebra de reversão de tempo [209]

Figura 6.3: (a) Parâmetros de ordem *strings*  $\mathcal{O}_S^\alpha$  e (b) Purezas  $\Gamma_n$  para dissipação assimétrica  $L_\mu = S_z$ , para diferentes valores de intensidade de dissipação  $\gamma$ . Vemos claramente que mesmo para valores muito pequenos de dissipação a ordem topológica decai rapidamente para zero enquanto a pureza cresce para o seu valor trivial e igual a um. Concluimos então que a ordem topológica do modelo AKLT, para esse caso de dissipação assimétrica é destruída.



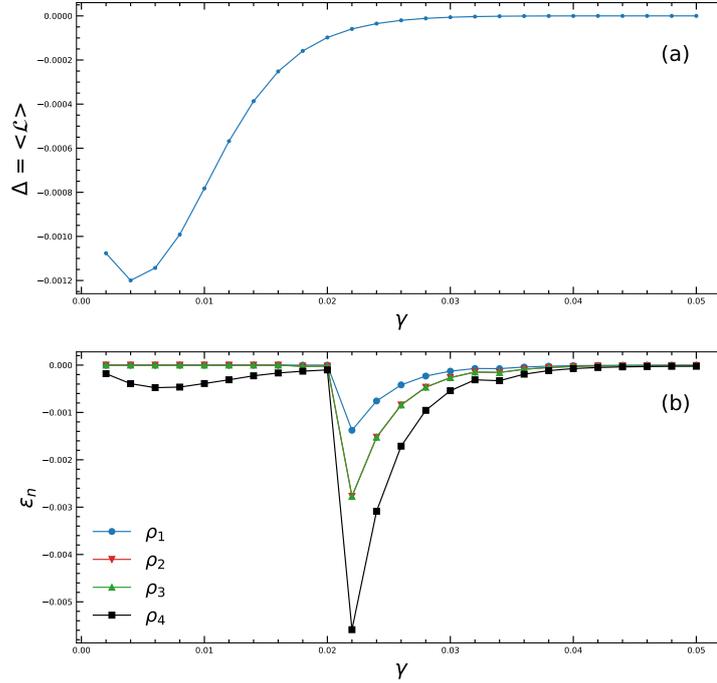
Fonte : Autor, (2022) [207]

Figura 6.4: Distribuição do espectro de Schmidt  $\xi_\alpha$  para dissipação assimétrica  $L_\mu = S_z$ , em função da intensidade de dissipação  $\gamma$ . Note que todos os valores do espectro estão distribuídos de modo a não apresentar nenhum padrão de degenerescência tal qual um estado puro não topológico.



Fonte : Autor, (2022) [207]

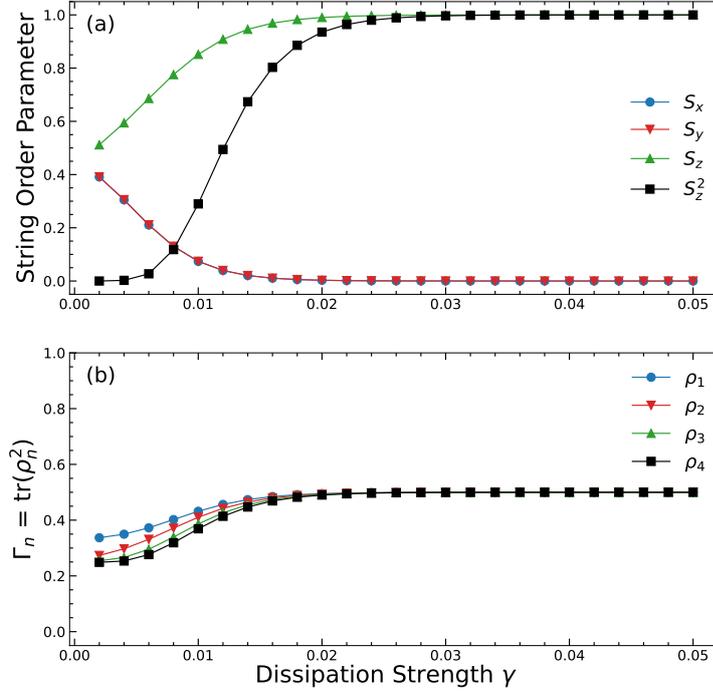
Figura 6.5: Medidas dos parâmetros de precisão numérica  $\Delta$  e  $\epsilon_n$  em (a) e (b) respectivamente para o caso de dissipação assimétrica  $L_\mu = S^z$ . As quantidades obtidas para essas variáveis de precisão numérica são suficientes para as análises feitas nesse trabalho.



Fonte : Autor, (2022) [207]

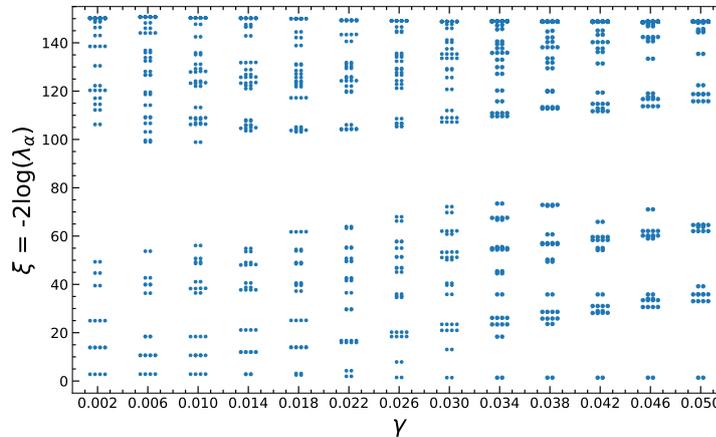
A seguir, consideramos o caso de dissipação simétrica  $L_\mu = S_z^2$ . Os resultados para parâmetros de ordem e pureza são mostrados na Fig.4.3. Como podemos ver no gráfico, as ordens de string  $\mathcal{O}_S^x$  e  $\mathcal{O}_S^y$  decaem igualmente para zero, enquanto as ordens de string  $\mathcal{O}_S^z$  e  $\mathcal{O}_S^{z^2}$  crescem com a intensidade de dissipação até seu valor máximo 1 para dissipação forte  $\gamma > 0.02$ . O valor diferente de zero desses parâmetros de ordem de cadeia sinaliza a presença de comportamento não trivial de longo alcance no estado estacionário, de acordo com discussões recentes sobre a resiliência de certos tipos de ordem topológica para estados mistos [205]. Além disso, podemos ver que a pureza cresce para 0.5 para forte dissipação, o que significa que temos estados estacionários mistos. O quadro geral é completado avaliando o espectro  $\xi_\alpha$ , que mostramos na Fig.6.8. É importante ressaltar que o espectro neste caso *é sempre organizado em termos de dupletos, não importando a intensidade da dissipação*, em analogia à degeneração típica do espectro de emaranhamento da fase Haldane SPT no caso de estado puro. Em combinação com o valor diferente de zero de alguns parâmetros de ordem de string, tomamos isso como uma indicação de que a dissipação simétrica em relação a simetria de reversão-tempoerol realmente mantém algum tipo de ordem de correlação de longo alcance no estado estacionário misto, sendo este o estado misto análogo a ordem SPT em estados puros. Para todos os propósitos práticos, podemos considerar isso como uma realização de ordem SPT dissipativa unidimensional e admite o mesmo tratamento matemático que o caso de ordem SPT para estados puros de modelos unidimensionais em termos de representações irreduzíveis de seus grupos de simetria [204, 205].

Figura 6.6: (a) Parâmetros de ordem *strings*  $\mathcal{O}_S^\alpha$  e (b) Purezas  $\Gamma_n$  para dissipação simétrica  $L_\mu = S_z^2$ , para diferentes valores de intensidade de dissipação  $\gamma$ . Neste caso vemos que mesmo com o crescimento da intensidade de dissipação  $\gamma$  o parâmetro de ordem *strings*  $\mathcal{O}_S^\alpha$  se mantém finito e satura em um para os operadores  $S^z$  e  $S^{z^2}$  além de a pureza  $\Gamma_n$  saturar em um valor igual a 0.5, valor típico de estados emaranhados de spins  $s = \frac{1}{2}$ . Concluimos então que a ordem topológica para esse caso de dissipação simétrica é mantida e obtemos ao final um estado dissipativo topológico protegido por simetria.



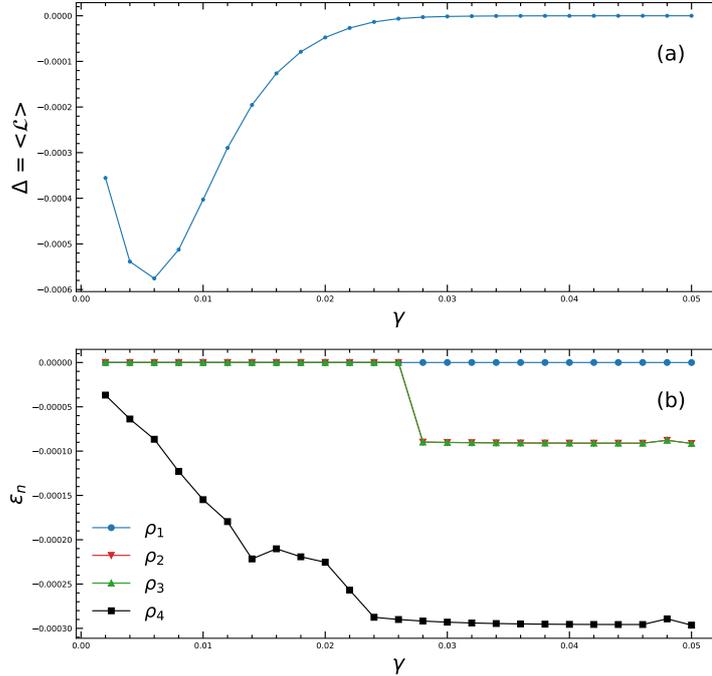
Fonte : Autor, (2022) [207]

Figura 6.7: Distribuição do espectro de Schmidt  $\xi_\alpha$  para dissipação simétrica  $L_\mu = S_z^2$ , em função da intensidade de dissipação  $\gamma$ . Note que agora temos um padrão de degenerescência em todo o espectro, apresentando-se em pares e múltiplos de pares. Esse padrão sinaliza que temos uma fase topológica não trivial induzida pela dissipação simétrica e ainda que o tratamento matemático feito para o caso SPT unidimensional de sistemas puros pode ser implementado para a sua contraparte mista.



Fonte : Autor, (2022) [207]

Figura 6.8: Medidas dos parâmetros de precisão numérica  $\Delta$  e  $\epsilon_n$  em (a) e (b) respectivamente para o caso de dissipação simétrica  $L_\mu = S^z$ . As quantidades obtidas para essas variáveis de precisão numérica são suficientes para as análises feitas nesse trabalho.



Fonte : Autor, (2022) [207]

## 6.4 Conclusões e Perspectivas

Neste artigo estudamos os efeitos de diferentes tipos de dissipação na ordem topológica protegida por simetrias. Em particular, analisamos os estados estacionários obtidos atuando dissipações simétricas e assimétricas em relação à simetria de reversão-temporal na fase Haldane do modelo AKLT. Vimos que a dissipação não simétrica quebra todas as assinaturas SPT já para valores muito pequenos da intensidade de dissipação. No entanto, a dissipação simétrica induz uma ordem de correlação de longo alcance no estado estacionário misto, que é análoga à ordem SPT em estados puros. Isso foi avaliado pelos valores diferentes de zero de alguns parâmetros de ordem de *string*, bem como pelo padrão de degenerescência no espectro dos coeficientes de Schmidt na representação MPO do estado misto, semelhante à degeneração do espectro de emaranhamento em fases SPT unidimensionais. Nossos resultados apontam para um conceito amplo de ordem SPT dissipativa unidimensional, que pode ter o mesmo tratamento matemático que ordem SPT unidimensional para estados puros, em termos de representações irredutíveis de grupos de simetrias projetivas. Isso abre a possibilidade de investigar novas fases dissipativas da matéria quântica, onde estão em jogo padrões não locais de ordem de longo alcance, e que podem ser descritos e caracterizados naturalmente usando a teoria e linguagem de redes de tensores. Denominamos esse estado como ordem topológica dissipativa protegida por simetria (DSPT) e novos trabalhos no sentido de aprofundar a investigação dessas fases serão feitos no futuro.

# Capítulo 7

## Considerações Finais e Perspectivas

Nessa trabalho investigamos o ordenamento topológico e transições de fases topológicas em um conjunto de modelos de spins interagentes distintos a partir de um método que introduzimos para caracterizar transições de fases topológicas. O método de escala tangencial de tamanho finito foi implementado em um conjunto distinto de modelos de spins interagentes e se mostrou muito eficaz em caracterizar transições de fases topológicas. Na primeiro capítulo fizemos uma introdução geral do trabalho apontando as motivações teóricas e tecnológicas para o nosso trabalho. No capítulo dois fizemos uma revisão da literatura, revisitando conceitos importantes de magnetismo quântico, fenômenos topológicos em cadeias de spins interagentes e emaranhamento quântico. No capítulo seguinte explicamos as bases dos métodos numéricos utilizando a teoria de redes de tensores, apresentando os conceitos fundamentais e explicando os métodos mais importantes para o estudo numérico de sistemas quânticos unidimensionais. No capítulo quatro, iniciamos a discussão dos nossos resultados onde introduzimos o modelo de interesse e discutimos as propriedades das fases quânticas que surgem no diagrama de fase do modelo e suas transições de fase. Focando apenas nas linhas críticas Gaussianas e do tipo Ising, discutimos o comportamento do gap energético nessas fases e como podemos utilizar a teoria de análise de escala finita e a hipótese de escala para caracterizar a transição de fase do tipo Ising. Seguimos então por fim introduzindo o método de escala tangencial de tamanho finito, onde descrevemos o método e cada passo de sua aplicação na caracterização de transições de fases topológicas em cadeias quânticas de spins interagentes, computando o expoente crítico do comprimento de correlação ao longo da linha Gaussiana e comparando com as estimativas que podemos obter a partir da teoria de campos efetiva do modelo na rede descrita pelo modelo  $(1+1)$   $O(2)$  sigma não linear. Obtivemos os nossos resultados com boa precisão numérica quando comparamos com outros métodos utilizados para computar os pontos críticos de transições de fases topológicas e obtenção dos expoentes críticos. No capítulo cinco investigamos uma classe de modelos ferrimagnéticos tetrâmeros com interações de Heisenberg isotrópicas e alternadas. Primeiro, investigamos a cadeia ferrimagnética tetrâmera  $(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2})$  onde obtivemos o diagrama de fases do modelo e discutimos as suas propriedades magnéticas. Utilizando o método de escala tangencial de tamanho finito caracterizamos o ponto crítico do modelo e mostramos que

este pertence a class de universalidade  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten com expoente crítico  $\nu = \frac{2}{3}$ . Na segunda parte investigamos os fenômenos críticos para a classe de modelos ferrimagnéticos tetrâmeros  $(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - S - S)$  com  $S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$  e interações de Heisenberg isotrópicas e alternadas. Além de discutir o diagrama de fases e as curvas de magnetização para um caso particular, demonstramos que essa classe de modelos apresenta uma transição de fases topológica universal e independente da magnitude do spin  $S$ . Por fim, na terceira parte investigamos outro modelo ferrimagnético tetramero agora com estrutura  $(1 - 1 - \frac{3}{2} - \frac{3}{2})$ . Obtivemos um rico diagrama de fases do modelo onde as fases quânticas foram analisadas a partir de medidas distintas de curvas de magnetização. Ainda, o modelo apresenta sucessivas transições de fases topológicas que foram caracterizadas a partir do método de escala tangencial de tamanho finito, onde obtivemos a surpresa de ambas as transições também serem universais pertencendo a class  $SU(2)$  Wess-Zumino-Witten com expoente crítico  $\nu = \frac{2}{3}$ .

Por fim, no capítulo seis investigamos os efeitos de dissipações distintas com relação a preservação da simetria de reversão-temporal atuam em um estado topológico simetricamente protegido em uma dimensão. Para tal, investigamos a dinâmica Markoviana do estado fundamental do modelo AKLT utilizando o método TEBD para sistemas infinitos. Nossos resultados demonstram que para o caso de dissipação assimétrica, a ordem topológica é destruída mesmo para valores muito pequenos de intensidade de dissipação  $\gamma$ , com os parâmetros de ordem  $\mathcal{O}_S^\alpha$  decaindo para zero e a pureza  $\Gamma_n$  crescendo para um valor trivial igual a um, o que caracteriza um estado puro. Além disso analisamos o espectro de Schmidt da matriz densidade do estado estacionário, onde não detectamos nenhum padrão de degenerescência. Em seguida, consideramos o caso de dissipação simétrica onde vimos que neste caso temos valores finitos do operador  $\mathcal{O}_S^{S_z}$  e  $\mathcal{O}_S^{S_z^2}$  e uma saturação da pureza  $\Gamma_n = 0.5$  com o crescimento da intensidade de dissipação  $\gamma$ . Além disso, analisando o espectro de Schmidt neste caso vemos um padrão de degenerescência que permeia todo o espectro que obtivemos para diversos valores de dissipação  $\gamma$ . Esses resultados em conjunto sinalizam que obtivemos uma fase topológica não trivial induzida por dissipação que pode ser caracterizada utilizando ferramentas criadas para o estudo de estados puros.

Como perspectiva pretendo continuar aprofundando os estudos dos algoritmos numéricos de redes de tensores, absorvendo outros métodos de modo a ampliar o leque de problemas que posso abordar. Ainda, continuar a implementar o método de escala finita tangencial para outros modelos distintos que apresentam transições topológicas e as caracterizar validando o método. Um dos meus interesse também é partir para o estudo de sistemas quânticos bidimensionais, onde o método de rede de tensores *projected entangled pair states* se mostra extremamente eficiente e versátil, nos permitindo inclusive o estudo de fenômenos fora de equilíbrio e dinâmicas Markovianas em modelos quânticos bidimensionais. Ainda, continuar a discussão sobre fases topológicas dissipativas protegidas por simetria considerando a preservação de outros grupos de simetria, como por exemplo  $\mathcal{Z}_2 \times \mathcal{Z}_2$ . Alguns resultados preliminares que obtive aponta para a obtenção novamente de fases topológicas não triviais induzidas por dissipação, acredito que uma discussão mais ampla pode ser feita em um estudo comparativo entre essas duas fases.

O fato de o espectro de Schmidt, relacionado ao espectro de emaranhamento para o caso de estado puros, apresentar o padrão de degenerescência para o estado estacionário nos faz questionar se outras quantidades utilizadas para caracterizar fases topológicas em estados puros podem apresentar também o mesmo comportamentos. Uma proposta seria investigar se invariantes topológicos também possam ser utilizados para fases mistas.

# Referências Bibliográficas

- [1] S. Blundell, *Magnetism in Condensed Matter*. Oxford University Press, 2001.
- [2] P. W. Anderson, “More is Different. Broken symmetry and the nature of the hierarchical structure of science.,” *Science*, 1972.
- [3] M. Swan, R. P. Dos Santos, and F. Witte, “Quantum matter overview,” *J*, vol. 5, no. 2, pp. 232–254, 2022.
- [4] A. Kitaev, “Anyons in an exactly solved model and beyond,” *Annals of Physics*, vol. 321, no. 1, pp. 2–111, 2006. January Special Issue.
- [5] A. Kitaev and C. Laumann, “Topological phases and quantum computation,” 2009.
- [6] T. D. Stanescu, *Introduction to Topological Quantum Matter Quantum Computation*. CRC Press, Taylor Francis Group, 2017.
- [7] Roderich Moessner, Joel E. Moore, *Topological Phases of Matter. New Particles, Phenomena, and Ordering Principles*. Cambridge University Press, 2020.
- [8] János K. Asbóth, László Oroszlány, András Pályi, *A Short Course on Topological Insulators. Band Structure and Edge States in One and Two Dimensions*. Springer, 2016.
- [9] S.-Q. Shen, *Topological Insulators. Dirac Equation in Condensed Matter*. Springer, 2017.
- [10] M. Z. Hasan and C. L. Kane, “Colloquium: Topological insulators,” *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [11] Y. Ren, Z. Qiao, and Q. Niu, “Topological phases in two-dimensional materials: a review,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 79, p. 066501, may 2016.
- [12] M. M. H. Polash, S. Yalameha, H. Zhou, K. Ahadi, Z. Nourbakhsh, and D. Vashaee, “Topological quantum matter to topological phase conversion: Fundamentals, materials, physical systems for phase conversions, and device applications,” *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 145, p. 100620, 2021.
- [13] V. Bonbien, F. Zhuo, A. Salimath, O. Ly, A. Abbout, and A. Manchon, “Topological aspects of antiferromagnets,” *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 55, p. 103002, nov 2021.

- [14] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2011.
- [15] M. Vojta, “Quantum phase transitions,” *Rep. Prog. Phys.* **66** 2069 (2003).
- [16] H. Nishimori and G. Ortiz, *Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 2010.
- [17] John Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 1996.
- [18] H. Tasaki, *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems*. Springer (2020).
- [19] F. D. M. Haldane, “Nonlinear field theory of large-spin heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis néel state,” *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [20] F. D. M. Haldane, “Continuum dynamics of the 1-d heisenberg antiferromagnet: Identification with the o(3) nonlinear sigma model,” *Phys. Lett. A* **93**, 1153 (1983).
- [21] F. Pollmann and A. M. Turner, “Detection of symmetry-protected topological phases in one dimension,” *Phys. Rev. B* **86** (2012).
- [22] A. M. Turner, F. Pollmann, and E. Berg, “Topological phases of one-dimensional fermions: An entanglement point of view,” *Phys. Rev. B* **83** (2011).
- [23] R. Verresen, N. G. Jones, and F. Pollmann, “Topology and edge modes in quantum critical chains,” *Phys. Rev. Lett.* **120** (2018).
- [24] R. Verresen, R. Moessner, and F. Pollmann, “One-dimensional symmetry protected topological phases and their transitions,” *Phys. Rev. B* **96** (2017).
- [25] H.-H. Tu and R. Orús *Phys. Rev. B*. *Phys. Rev. B* **84** (2011).
- [26] A. Kshetrimayum, H.-H. Tu, and R. Orús *Phys. Rev. B*. *Phys. Rev. B* **91** (2015).
- [27] Y.-C. Tzeng, H. Onishi, T. Okubo, and Y.-J. Kao, “Quantum phase transitions driven by rhombic-type single-ion anisotropy in the s=1 haldane chain,” *Phys. Rev. B*, vol. **96**, 6 (2017).
- [28] J. Ren, Y. Wang, and W.-L. You, “Quantum phase transitions in spin-1 xxz chains with rhombic single-ion anisotropy,” *Phys. Rev. A*, vol. **97**, 4 (2018).
- [29] E. Meier, F. An, and B. Gadway, “Observation of the topological soliton state in the su–schrieffer–heeger model,” *Nat. Commun.* **7** (2016).
- [30] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, “Solitons in polyacetylene,” *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979).
- [31] S. Mandal and A. M. Jayannavar, “An introduction to kitaev model,” arXiv:2006.11549 (2020).

- [32] A. Läuchli, G. Schmid, and S. Trebst, “Spin nematics correlations in bilinear-biquadratic  $s=1$  spin chains,” *Phys. Rev. B*, vol. **74**, 14 (2006).
- [33] J. Sólyom, “Competing bilinear and biquadratic exchange couplings in spin-1 heisenberg chains,” *Phys. Rev. B*, vol. **36**, 16 (1987).
- [34] Anders W. Sandvik, “Computational Studies of Quantum Spin Systems,” *AIP Conf. Proc.*, 2010.
- [35] A. Avella and F. Mancini, eds., *Strongly Correlated Systems. Numerical Methods*, vol. 176 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer, 2013.
- [36] R. S. A. W. H. Fehske, ed., *Computational Many-Particle Physics*. Springer, 2008.
- [37] R. Orús, “Tensor networks for complex quantum systems,” *Nat Rev Phys* **1**, 538-550 (2019) .
- [38] R. Orús, “A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states,” *Annals of Physics*, **349**, (2014).
- [39] J. I. Cirac, D. Pérez-García, N. Schuch, and F. Verstraete, “Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems,” *Rev. Mod. Phys.* **93**, 045003 (2021) .
- [40] G. Vidal, “Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations,” *Phys. Rev. Lett* **91** (2003).
- [41] G. Vidal, “Efficient simulation of one-dimensional quantum many-body systems,” *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004).
- [42] G. Vidal, “Entanglement renormalization,” *Phys. Rev. Lett.* **99** (2007).
- [43] G. Vidal, “Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in one spatial dimension,”
- [44] R. Orús and G. Vidal, “Infinite time-evolving block decimation algorithm beyond unitary evolution,” *Phys. Rev. B* **78** (2008).
- [45] T. density-matrix renormalization group, “U. Schollwöck,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 77, 2005.
- [46] “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states,” *Annals of Physics*, **326**, (2011).
- [47] J. Jordan, R. Orús, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac, “Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in two spatial dimensions,” *Phys. Rev. Lett* **101** (2008).
- [48] R. Orús and G. Vidal, “Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited: Corner transfer matrix for tensor contraction,” *Phys. Rev. B* **80** (2009).

- [49] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*. Clarendon Press - Oxford, 2003.
- [50] Alexander Atland, Ben Simons, *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2010.
- [51] Naoto Nagaosa, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*. Springer, 1999.
- [52] Naoto Nagaosa, *Quantum Field Theory in Strongly Correlated Electronic Systems*. Springer, 1999.
- [53] L. M. Veríssimo, M. S. S. Pereira, and M. L. Lyra, “Tangential finite-size scaling at the gaussian topological transition in the quantum spin-1 anisotropic chain,” *Phys. Rev. B*, **104**, 024409 (2021).
- [54] B. Bauer, L. D. Carr, H. G. Evertz, A. Feiguin, J. Freire, S. Fuchs, L. Gamper, J. Gukelberger, E. Gull, S. Guertler, A. Hehn, and R. Igarashi, “The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2011.
- [55] M. Fishman, S. R. White, and E. M. Stoudenmire, “The itensor software library for tensor network calculations,” arXiv:2007.14822(2021).
- [56] M. Zwolak and G. Vidal, “Mixed-state dynamics in one-dimensional quantum lattice systems: A time-dependent superoperator renormalization algorithm,” *Phys. Rev. Lett* **93** (2004).
- [57] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism Made Simple. An Introduction to Physical Concepts and to Some Useful Mathematical Methods*. World Scientific, 2006.
- [58] J. M. D. Coey, *Magnetism and Magnetic Materials*. Cambridge University Press, 2009.
- [59] P. Bernstein and J. Noudem, “Superconducting magnetic levitation: principle, materials, physics and models,” *Supercond. Sci. Technol.* **33**, 033001 (2020).
- [60] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. World Scientific, 1999.
- [61] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*. WILEY, 1987.
- [62] W. Heisenberg, “Zur theorie des ferromagnetismus,” *Z. Physik*, vol. 49, (1928).
- [63] F. Bloch, “Zur Theorie des Ferromagnetismus,” *F. Z. Physik*, 1930.
- [64] H. Bethe, “Zur Theorie der Metalle,” *Z. Physik*, vol. 71, p. 21, 1931.
- [65] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. (Springer-Verlag, New York, 1994).
- [66] T. C. L. P. M. Chaikin, *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge Uni-

- versity Press, 1995.
- [67] I. Bose, “Low-dimensional quantum spin systems,” *arXiv:cond-mat/0011262v1*, 2000.
- [68] P. S. Giuseppe Morandi and V. T. Arturo Tagliacozzo, *Field Theories for Low-Dimensional Condensed Matter Systems. Spin Systems and Strongly Correlated Electrons*. Springer, 2000.
- [69] M. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems: An Approach to Quantum Phase Transitions*. (Cambridge University Press, Cambridge, 2017).
- [70] B. Zeng, X. Chen, D.-L. Zhou, and X.-G. Wen, *Quantum Information Meets Quantum Matter. From Quantum Entanglement to Topological Phase in Many-Body Systems*. Springer, 2018.
- [71] I. L. C. Michael A. Nielsen, *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2010.
- [72] A. Bayat, S. Bose, and H. Johannesson, *Entanglement in Spin Chains. From Theory to Quantum Technology Applications*. Springer, 2022.
- [73] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Ghmman, A. Klümper, and V. Korepin, *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press, 2005.
- [74]
- [75] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, 2013.
- [76] H. W. N. D. Mermin, “Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models,” *Physical Review Letters*, vol. 17, no. 22, 1966.
- [77] A. K. Hans Mikeska, “One-dimensional magnetism,” in *Quantum Magnetism*, edited by Ulrich Schollwöck, Johannes Richter, Damian Farnell, Raymond Bishop (Springer, 2004) pp. 1-83.
- [78] K. Huang, *Statistical Mechanics*. John Wiley Sons, 1987.
- [79] J. M. Kosterlitz, “The critical properties of the two-dimensional xy model,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1974.
- [80] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, “Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems,” *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1973.
- [81] T. soluble models of an antiferromagnetic chain, “Elliot Lieb, Theodore Schultz, Daniel Mattis,” *Annals of Physics*, vol. 16, 1961.
- [82] I. Affleck, “Quantum spin chains and the haldane gap.,” *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, (1989) 3047.

- [83] W. J. L. Buyers, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach, and K. Hirakawa, "Experimental evidence for the haldane gap in a spin-1 nearly isotropic, antiferromagnetic chain," *Physical Review Letters*, 1986.
- [84] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, J. Ribas, W. G. Stirling, and C. Vettier, "Quantum energy gap in two quasi-one-dimensional  $s=1$  heisenberg antiferromagnets," *Journal of Applied Physics*, vol. 63, no. 3538, 1988.
- [85] W. P. Wolf, "Ferrimagnetism," *Reports on Progress in Physics*, 1961.
- [86] N. B. Ivanov, "Spin models of quasi-1d quantum ferrimagnets with competing interactions," *Condensed Matter Physics*, vol. 12, no. 03, 2009.
- [87] R. R. Montenegro-Filho and M. D. Coutinho-Filho, "Quasi-One-Dimensional Quantum Ferrimagnets," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2005.
- [88] H. Wang, L.-F. Zhang, Z.-H. Ni, W.-F. Zhong, L.-J. Tian, and J. Jiang, "Synthesis, Crystal Structures, and Magnetic Properties of One-Dimensional Mixed Cyanide- and Phenolate-bridged Heterotrimetallic Complexes," *Crystal Growth and Design Communication*, vol. 10, 2010.
- [89] T. Masuda, K. Kakurai, M. Matsuda, K. Kaneko, and N. Metoki, "Indirect magnetic interaction mediated by a spin dimer in  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$ ," *Phys. Rev. B* **75**, 220401(R) (2007).
- [90] T. Masuda, A. Zheludev, B. Sales, S. Imai, K. Uchinokura, and S. Park, "Magnetic excitations in the weakly coupled spin dimers and chains material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$ ," *Phys. Rev. B* **72**, 094434 (2005).
- [91] O. V. Maximova, S. V. Strltsov, and A. N. Vasiliev, "Long range ordered, dimerized, large-d and haldane phases in spin 1 chain compounds," *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, (2020).
- [92] T. M. R. E. Dagotto, "Surprises on the way from 1d to 2d quantum magnets: the novel ladder materials," *P. Review*, 1995.
- [93] R. Feyerherm, C. Mathoniere, and O. Kahn, "Magnetic anisotropy and metamagnetic behaviour of the bimetallic chain  $\text{MnNi}(\text{NO}_2)_4(\text{en})_2$ ," *J. Phys.: Condens. Matter* **13** (2001).
- [94] T. Sakai and S. Yamamoto, "Critical behaviour of anisotropic Heisenberg mixed-spin chains in a field," *Physical Review B*, vol. 60, no. 6, 1999.
- [95] S. Yamamoto, S. Brehmer, and H. J. Mikeska, "Elementary excitations of Heisenberg ferrimagnetic spin chains," *Physical Review B*, vol. 57, no. 21, 1998.
- [96] S. Yamamoto, T. Fukui, and T. Sakai, "Characterization of ferrimagnetic Heisenberg chains according to the constituent spins," *The European Physical Journal B*, 2000.

- [97] T. Sakai and K. Omakoto, “Quantum magnetization plateaux of an anisotropic ferrimagnetic spin chain,” *Physical Review B*, vol. 65, 2002.
- [98] R. R. Montenegro-Filho, F. S. Matias, and M. D. Coutinho-Filho, “Topology of many-body edge and extended quantum states in an open spin chain:  $1/3$  plateau, kosterlitz-thouless transition, and luttinger liquid,” *Phys. Rev. B*, vol. **102**, 3 (2020).
- [99] W. M. da Silva, R. R. Montenegro-Filho, “Magnetic field - temperature phase diagram of ferrimagnetic alternating chains: spin-wave theory from a fully polarized vacuum,” *Physical Review B*, 2017.
- [100] W. M. da Silva and R. R. Montenegro-Filho, “Role of density-dependent magnon hopping and magnon-magnon repulsion in ferrimagnetic spin- $(1/2, s)$  chains in a magnetic field,” *Phys. Rev. B* **103**, 054432 (2021).
- [101] Y. Noriki and S. Yamamoto, “Modified spin-wave theory on low-dimensional heisenberg ferrimagnets: A new robust formulation,” .
- [102] E. Lieb and D. Mattis, “Ordering energy levels of interacting systems,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 3, no. 4, 1962.
- [103] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck, “Magnetization plateaus in spin chains: "haldane gap" for half-integer spins,” *Physics Review Letters*, vol. 78, 1997.
- [104] M. den Nijs and K. Rommelse, “Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains,” *Phys. Rev. B*, vol. **40**, 7 (1989).
- [105] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).
- [106] F. D. M. Haldane, “Nobel lecture: Topological quantum matter,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 89, p. 040502, Oct 2017.
- [107] M. V. Rakov and M. Weyrauch, “Bilinear-biquadratic spin-1 rings: an  $su(2)$ -symmetric mps algorithm for periodic boundary conditions,” *J. Phys. Commun.*, **1** (2017).
- [108] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, “Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets,” *Commun.Math. Phys.* **115**, 477–528 (1988).
- [109] X.-G. Wen, “Colloquium: Zoo of quantum-topological phases of matter,” *Rev. Mod. Phys.* **89**, 041004 (2017).
- [110] F. D. M. Haldane, “Nobel lecture: Topological quantum matter,” *Rev. Mod. Phys.* **89**, 040502 (2017).
- [111] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “Topological insulators and superconductors,” *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [112] M. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B. I. Halperin, and J. P. Renard, “Observation of  $s=1/2$  degrees of freedom in an  $s=1$  linear-chain heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 65, pp. 3181–3184, Dec 1990.

- [113] S. Miyashita and S. Yamamoto, “Effects of edges in  $s=1$  heisenberg antiferromagnetic chains,” *Phys. Rev. B*, vol. 48, pp. 913–919, Jul 1993.
- [114] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, “Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?,” *Physical Review*, vol. 47, no. 777, 1935.
- [115] J. S. Bell, *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, (2004).
- [116] N. Laflorencie, “Quantum entanglement in condensed matter systems,” *Physics Reports* **646**, (2016).
- [117] L. Aminco, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, “Entanglement in many-body systems,” *Rev. Mod. Phys.* **80**, (2008).
- [118] T. J. Osborne and M. A. Nielsen, “Entanglement in a simple quantum phase transition,” *Phys. Rev. A* **66**, (2003).
- [119] X. Wang, “Entanglement in the quantum heisenberg XY model,” *Phys. Rev. A* **64**, (2001).
- [120] A. Osterloh, L. Amico, and G. e. a. Falci, “Scaling of entanglement close to a quantum phase transition,” *Nature* **416**, (2002).
- [121] S.-J. Gu, S.-S. Deng, Y.-Q. Li, and H.-Q. Lin, “Entanglement and quantum phase transition in the extended hubbard model,” *Phys. Rev. Lett.* **93**, (2004).
- [122] S. Nishimoto, “Tomonaga-luttinger-liquid criticality: Numerical entanglement entropy approach,” *Phys. Rev. B*, vol. **84**, 19 (2011).
- [123] C. Degli Esposti Boschi, E. Ercolessi, F. Ortolani, and M. Roncaglia, “On  $c = 1$  critical phases in anisotropic spin-1 chains,” *Eur. Phys. J. B* **35** (2003).
- [124] W. Chen, K. Hida, and B. C. Sanctuary, “Ground-state phase diagram of  $s=1$  xxz chains with uniaxial single-ion-type anisotropy,” *Phys. Rev. B* **67**, (2003).
- [125] S. Ejima, F. H. L. Essler, F. Lange, and H. Fehske, “Ising tricriticality in the extended hubbard model with bond dimerization,” *Phys. Rev. B*, vol. **93**, 23 (2016).
- [126] K. Sugimoto, S. Ejima, F. Lange, and H. Fehske, “Quantum phase transitions in the dimerized extended bose-hubbard model,” *Phys. Rev. A*, vol. **99**, (2019).
- [127] N. Chepiga, I. Affleck, and F. Mila, “Dimerization transitions in spin-1 chains,” *Phys. Rev. B* **93** 241108(R), (2016) .
- [128] N. Chepiga, I. Affleck, and F. Mila, “Floating, critical, and dimerized phases in a frustrated spin- $\frac{3}{2}$  chain,” *Phys. Rev. B* **101**, (2020).
- [129] N. Chepiga, I. Affleck, and F. Mila, “From  $su(2)_5$  to  $su(2)_3$  wess-zumino-witten transitions in a frustrated spin- $\frac{5}{2}$  chain,” *Phys. Rev. B* **105** 174402 (2022) .
- [130] P. Calabrese and J. Cardy, “Entanglement entropy and conformal field theory,”

- Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **42**.
- [131] L. Traglecozzo, T. R. de Oliveira, S. Iblidir, and J. I. Latorre, “Scaling of entanglement support for matrix product states,” *Phys. Rev. B* **78**, 024410 (2008).
- [132] F. Pollmann, S. Mukerjee, A. M. Turner, and J. E. Moore, “Theory of finite-entanglement scaling at one-dimensional quantum critical points,” *Phys. Rev. Lett* **102** (2009).
- [133] G. Vidal, “Class of quantum many-body states that can be efficiently simulated,” *Phys. Rev. Lett* **101** (2008).
- [134] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, “Colloquium: Area laws for the entanglement entropy,” *Rev. Mod. Phys* **82** (2010).
- [135] D. Gottesman and M. B. Hastings, “Entanglement versus gap for one-dimensional spin systems,” *New J. Phys.* **12** (2010).
- [136] N. Schuch, M. M. Wolf, F. Verstraete, and J. I. Cirac, “Entropy scaling and simulability by matrix product states,” *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008).
- [137] R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism. Magnetic Properties of Materials*, vol. 32 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer, 2007.
- [138] S.-J. Ran, E. Tirrito, C. Peng, X. Chen, L. Tagliacozzo, G. Su, and M. Lewenstein, *Tensor Network Contractions. Methods and Applications to Quantum Many-Body Systems*. Springer Cham (2020) .
- [139] Karen A. Hallberg, “New trends in density matrix renormalization,” *Advances in Physics*, 2006.
- [140] J. Hauschild and F. Pollmann, “Efficient numerical simulations with tensor networks: Tensor network python (tenpy),” .
- [141] M. B. Hastings, “An area law for one-dimensional quantum systems,” *J. Stat. Mech* (2007).
- [142] I. Frérot and T. Roscilde, “Area law and its violation: A microscopic inspection into the structure of entanglement and fluctuations,” *Phys. Rev. B* **92**(2015).
- [143] J. A. Kjäll, M. P. Zaletel, R. S. K. Mong, J. H. Bardarson, and F. Pollmann, “Phase diagram of the anisotropic spin-2 xxz model: Infinite-system density matrix renormalization group study,” *Phys. Rev. B* **87** (2013).
- [144] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M. Wolf, and J. Cirac, “Matrix product state representations,” *Quantum Information Computation* **7** (2007).
- [145] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992).
- [146] S. R. White, “Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups,”

- Phys. Rev. B **48** (1993).
- [147] S. Östlund and S. Rommer, “Thermodynamic limit of density matrix renormalization,” Phys. Rev. Lett. **75** (1995).
- [148] R. O. Augustino Kshetrimaaym, Hendrik Weimer, “A simple tensor network algorithm for two-dimensional steady states,” Nature Communications, **8**, (2017).
- [149] J. Cui, J. I. Cirac, and M. C. Bañuls, “Variational matrix product operators for the steady state of dissipative quantum systems,” Phys. Rev. Lett. **114**, 220601 (2015).
- [150] A. A. Gangat, T. I, and Y.-J. Kao, “Steady states of infinite-size dissipative quantum chains via imaginary time evolution,” Phys. Rev. Lett. **119**, 010501 (2017).
- [151] F. Verstraete, J. J. García-Ripoll, and J. I. Cirac, “Matrix product density operators: Simulation of finite-temperature and dissipative systems,” Phys. Rev. Lett. **93** 207204 (2004) .
- [152] A. H. Werner, D. Jaschke, P. Silvi, M. Kliesch, T. Calarco, J. Eisert, and S. Montanero, “Positive tensor network approach for simulating open quantum many-body systems,” Phys. Rev. Lett. **116**, 010501 (2016).
- [153] S. Paeckel, T. Köhler, A. Swoboda, S. R. Manmana, U. Schollwöck, and C. Hubig, “Time-evolution methods for matrix-product states,” Annals of Physics **411** (2019).
- [154] I. P. McCulloch, “From density-matrix renormalization group to matrix product states,” J. Stat. Mech. P10014 (2007).
- [155] A. I. to numerical methods in low-dimensional quantum systems, “André Luiz Malvezzi,” *Brazilian Journal of Physics*, vol. 33, Mar. 2003.
- [156] L. M. Veríssimo, M. S. S. Pereira, J. Strečka, and M. L. Lyra, “Kosterlitz-thouless and gaussian criticalities in a mixed spin-(1/2, 5/2, 1/2) heisenberg branched chain with exchange anisotropy,” Phys. Rev. B, **99**, 134408 (2019).
- [157] F. Souza, L. M. Veríssimo, J. Strečka, M. L. Lyra, and M. S. S. Pereira, “Exact and density matrix renormalization group studies of two mixed spin-(1/2, 5/2, 1/2) branched-chain models developed for a heterotrimetallic fe-mn-cu coordination polymer,” Phys. Rev. B, **102**, 064414 (2020).
- [158] U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop, eds., *Quantum Magnetism*. No. 645 in Lect. Notes Phys., Springer, 2004.
- [159] C. Degli Esposti Boschi, E. Ercolessi, and G. Morandi in *Symmetries in Science XI* (B. J. Gruber, G. Marmo, and N. Yoshinaga, eds.), (Springer Netherlands, Dordrecht 2005), pp. 145-173.
- [160] A. Kitazawa, K. Nomura, and K. Okamoto, “Phase Diagram of  $S = 1$  Bond-Alternating XXZ Chains,” *Physical Review Letters*, vol. 76, no. 21, 1996.
- [161] A. Kitazawa and K. Nomura, “Critical properties of  $s=1$  bond-alternating xxz chains

- and hidden  $z_2 \otimes z_2$  symmetry,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. **66**, 12 (1997).
- [162] A. Kitazawa, “Twisted boundary conditions of quantum spin chains near the Gaussian fixed points,” *J. Phys. A: Math. Gen.* **30** L285 (1997).
- [163] T. Holstein, H. Primakoff, “Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet,” *Physical Review*, vol. 58, 1940.
- [164] E. W. P. Jordan *Z. Phys*, vol. 47, p. 631, 1928.
- [165] C. Degli Esposti Boschi and F. Ortolani, “Investigation of quantum phase transitions using multi-target dmrg methods,” vol. **41**, (2004).
- [166] S. Hu, B. Normand, X. Wang, and L. Yu, “Accurate determination of the gaussian transition in spin-1 chains with single-ion anisotropy,” *Phys. Rev. B*, vol. **84**, 22 (2011).
- [167] Y.-C. Tzeng, H.-H. Hung, Y.-C. Chen, and M.-F. Yang, “Fidelity approach to gaussian transitions,” *Phys. Rev. A*, vol. **77**, 6 (2008).
- [168] Y.-C. Tzeng and M.-F. Yang, “Scaling properties of fidelity in the spin-1 anisotropic model,” *Phys. Rev. A*, vol. **77**, 1 (2008).
- [169] Y. Wang, H. Zhang, and A. Kamenev, “Finite-size scaling at a topological transition: Bilinear-biquadratic spin-1 chain,” *Phys. Rev. B*, vol. **101**, 23 (2020).
- [170] T. Gulden, M. Janas, Y. Wang, and A. Kamenev, “Universal finite-size scaling around topological quantum phase transitions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. **116**, 2 (2016).
- [171] E. J. König, A. Levchenko, and N. Sedlmayr, “Universal fidelity near quantum and topological phase transitions in finite one-dimensional systems,” *Phys. Rev. B*, vol. **93**, 23 (2016).
- [172] Y. Wang, T. Gulden, and A. Kamenev, “Finite-size scaling of entanglement entropy in one-dimensional topological models,” *Phys. Rev. B*, vol. **95**, 7 (2017).
- [173] K. Wang and T. A. Sedrakyan, “Universal finite-size scaling around tricriticality between topologically ordered, symmetry-protected topological, and trivial phases,” *Phys. Rev. B*, vol. **101**, 3 (2020).
- [174] K. Takano, “Phase diagrams of mixed-spin chains with period 4 using the nonlinear  $\sigma$  model,” *Phys. Rev. B* **611**, 8863 (2000).
- [175] S.-B. Li, Z.-X. Xu, J.-H. Dai, and J.-B. Xu, “Entanglement and quantum phase transitions in quantum mixed spin chains,” *Phys. Rev. B* **73**, 184411 (2006).
- [176] Z. Xu, J. Dai, H. Ying, and B. Zheng, “Successive valence-bond-state transitions in quantum mixed spin chains,” *Phys. Rev. B*, **67**, 214426 (2003).
- [177] H. T. Wand, B. Li, and S. Y. Chi, “Topological quantum phase transition in bond-

- alternating spin-1/2 heisenberg chains,” *Phys. Rev. B*, **87** 054403 (2013).
- [178] W.-X. Chen, J. Ren, W.-L. You, X. Hao, and Y.-Z. Wu, “Phase diagram of the spin-1/2 heisenberg alternating chain in a magnetic field,” *Commun. Theor. Phys.*, **71**, 1029 (2019).
- [179] S. Yang and J.-B. Xu, “Quantum phase transition of a quantum mixed spin chain by employing density matrix renormalization group method,” *ANNALEN DER PHYSIK*, **533** 2100011, (2021).
- [180] H. Hu, C. Cheng, Z. Xu, H.-G. Luo, and S. Chen, “Topological nature of magnetization plateaus in periodically modulated quantum spin chains,” *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 035150, Jul 2014.
- [181] Y. Kuno and Y. Hatsugai, “Plateau transitions of a spin pump and bulk-edge correspondence,” *Phys. Rev. B*, vol. 104, p. 045113, Jul 2021.
- [182] M. Nakamura and S. Todo, “Novel order parameter to characterize valence-bond-solid states,” *Progress of Theoretical Physics Supplement*, **145** (2002).
- [183] M. Nakamura and J. Voit, “Lattice twist operators and vertex operators in sine-gordon theory in one dimension,” *Phys. Rev. B*, **65** 153110 (2002).
- [184] J. Almeida, M. A. Martin-Delgado, and G. Sierra, “Twisted-order parameter applied to dimerized ladders,” *J. Phys. A: Math. Theor.*, **141** (2008).
- [185] M. Nakamura and S. C. Furuya, “Extraction of topological information in tomonaga-luttinger liquids,” *Phys. Rev. B*, **99** 075128 (2019).
- [186] T. Masuda, A. Zheludev, B. Grenier, S. Imai, K. Uchinokura, E. Ressouche, and S. Park, “Cooperative ordering of gapped and gapless spin networks in  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$ ,” *Phys. Rev. Lett.* **93**, 077202 (2003).
- [187] T. Masuda, K. Kakurai, and A. Zheludev, “Spin dimers under staggered and random field in  $\text{cu}_2\text{fe}_2\text{ge}_4\text{o}_{13}$ ,” arXiv:0909.2402 (2009).
- [188] T. Masuda, A. Zheludev, B. Sales, S. Imai, and K. Uchinokura, “Magnetic excitations in  $\text{cu}_2\text{fe}_2\text{ge}_4\text{o}_{13}$ ,” *Progress of Theoretical Physics Supplement* **159**, (2005)
- .
- [189] M. M. et al, “Theory of magnetic excitation for coupled spin dimer and spin chain system  $\text{cu}_2\text{fe}_2\text{ge}_4\text{o}_{13}$ ,” *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, (2010).
- [190] J. Bezanson, A. Edelman, S. Karpinski, and V. B. Shah, “Julia: A fresh approach to numerical computing,” *SIAM review* **59** (2017).
- [191] M. Kohmoto, M. den Nijs, and L. P. Kadanoff, “Hamiltonian studies of the  $d = 2$  ashkin-teller model,” *Phys. Rev. B*, **24**, 5229 (1981).
- [192] M. Dalmonte, J. Carrasquilla, L. Taddia, E. Ercolessi, and M. Rigol, “Gap scaling at berezinskii-kosterlitz-thouless quantum critical points in one-dimensional hubbard

- and heisenberg models,” *Phys. Rev. B* **91**, 165136 (2015).
- [193] Y.-Z. Huang and G. Su, “Quantum monte carlo study of the spin-1/2 honeycomb heisenberg model with mixed antiferromagnetic and ferromagnetic interactions in external magnetic fields,” *Phys. Rev. B* **95**, 052147 (2017).
- [194] R. Bischof and P. Crompton, “Leading corrections to finite-size scaling for mixed-spin chains,” *Jetp Lett.* **84** (2007).
- [195] G. Spronken, B. Fourcade, and Y. Lépine, “Finite-size study of the one-dimensional spin-(1/2) dimerized heisenberg chain,” *Phys. Rev. B* **38** (1986).
- [196] L. M. Veríssimo, M. S. S. Pereira, J. Strečka, and M. L. Lyra, “Topological quantum phase transition in a mixed-spin heisenberg tetramer chain with alternating spin-1/2 and spin-5/2 dimers,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **571** 170595 (2023).
- [197] T. Kennedy and H. Tasaki, “Hidden symmetry breaking and the haldane phase in  $s=1$  quantum spin chains,” *Communications in Mathematical Physics*, **147**, (1992).
- [198] H. Li and F. D. M. Haldane, “Entanglement spectrum as a generalization of entanglement entropy: Identification of topological order in non-abelian fractional quantum hall effect states,” *Phys Rev. Lett.* **101**, 010504 (2008).
- [199] M. A. B. Sebastian Diehl, Enrique Rico and P. Zoller, “Topology by dissipation in atomic quantum wires,” *Nature Physics* **7**, (2011).
- [200] C. E. Bardyn, M. A. Baranov, C. V. Kraus, E. Rico, A. Imamoglu, P. Zoller, and S. Diehl, “Topology by dissipation,” *New Journal of Physics* **15**, (2013).
- [201] Y. C. Tian-Shu Deng, Lei Pan and H. Zhai, “Stability of time-reversal symmetry protected topological phases,” *Phys. Rev. Lett.* **127**, 086801 (2021).
- [202] M. M. W. Frank Verstraete and J. I. Cirac, “Quantum computation and quantum-state engineering driven by dissipation,” *Nature Physics* **5**, 633-636 (2009).
- [203] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma, “Non-abelian anyons and topological quantum computation,” *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1083 (2008).
- [204] A. Coser and D. Pérez-García, “Classification of phases for mixed states via fast dissipative evolution,” *Quantum* **3**, 174 (2019).
- [205] A. T. Caroline de Groot and N. Schuch, “Symmetry protected topological order in open quantum systems,” *Quantum* **6**, 856 (2022).
- [206] H. Weimer, A. Kshetrimayum, and R. Orús, “Simulation methods for open quantum many-body systems,” *Rev. Mod. Phys.* **97**, 015008 (2021).
- [207] L. M. Veríssimo, M. L. Lyra, and R. Orus, “Dissipative symmetry-protected topological order,” *Phys. Rev. B* **107**, L241104 (2023).

- [208] R. N. C. Pfeifer, G. Evenbly, S. Singh, and G. Vidal, “Ncon: A tensor network contractor for matlab,” arXiv:1402.0939v3 (2015).
- [209] N. R. C. M. McGinley, “Fragility of time-reversal symmetry protected topological phases,” *Nature Physics*, **16**, 1181–1183 (2020).

# Apêndice A

## Lista de Artigos Publicados e Submetidos

Aqui listamos os artigos publicados e os artigos submetidos durante o período de doutorado 2019 - 2023

- **Luan M. Veríssimo**, Maria S. S. Pereira, Jozef Strecka and Marcelo L. Lyra, "Kosterlitz-Thouless and Gaussian criticalities in a mixed spin- $(\frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2})$  Heisenberg branched chain with exchange anisotropy", [Physical Review B 99 \(2019\)](#).
- Fabiana Souza, **Luan M. Veríssimo**, Jozef Strecka, Marcelo L. Lyra and Maria S. S. Pereira, "Exact and density matrix renormalization group studies of mixed spin- $(\frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{1}{2})$  branched-chain models developed for a heterotrimetallic Fe-Mn-Cu coordination polymer", [Physical Review B 102 \(2020\)](#).
- **Luan M. Veríssimo**, Maria S. S. Pereira and Marcelo L. Lyra, "Tangential finite-size scaling at the Gaussian topological transition in the quantum spin-1 anisotropic chain", [Physical Review B, 104 \(2021\)](#).
- Onofre Rojas, S. M. de Souza, Jordana Torrico, **Luan M. Veríssimo**, M. S. S. Pereira and M. L. Lyra, "Low-temperature pseudo-phase-transition in an extended Hubbard diamond chain", [Physical Review E, 102 \(2021\)](#).
- **Luan M. Veríssimo**, Maria S. S. Pereira, Jozef Strecka and Marcelo L. Lyra, "Topological phase transition in double dimers  $s = 1/2$ - $S = 5/2$  bond-alternating quantum spin chains", [Journal of Magnetism and Magnetic Materials 571 \(2023\)](#)
- **Luan M. Veríssimo**, Marcelo L. Lyra and Roman Orus, "Dissipative Symmetry-Protected Topological Order", [Physical Review B, L241104 \(2023\)](#)

- **Luan M. Veríssimo**, Maria S. S. Pereira, Jozef Strecka and Marcelo L. Lyra, "Universality of the topological phase transition in mixed-spin tetramer Heisenberg chains", (2023) (Aceito para publicação no jornal *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* )
- **Luan M. Veríssimo**, Maria S. S. Pereira, Jozef Strecka and Marcelo L. Lyra, "Ground-state phase diagram and universality of topological valence-bond-solid quantum phase transitions in a ferrimagnetic Heisenberg tetramer chain", (artigo sob revisão)

# Apêndice B

## Artigos Publicados da Tese

Aqui dispomos os artigos publicados que compõem o corpo desta tese de doutorado.

## Tangential finite-size scaling at the Gaussian topological transition in the quantum spin-1 anisotropic chain

Luan M. Veríssimo , Maria S. S. Pereira, and Marcelo L. Lyra *Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-900 Maceió, Alagoas, Brazil*

(Received 13 May 2021; accepted 29 June 2021; published 7 July 2021)

Scaling aspects of Gaussian topological phase transitions in quantum spin chains are investigated using the prototypical one-dimensional spin-1 XXZ Heisenberg model with uniaxial single-ion anisotropy  $D$ . This model presents a critical line separating the gapped Haldane and large- $D$  phases, with the relevant energy gap closing at the transition point. We show that a proper tangential finite-size scaling analysis is able to accurately locate the Gaussian critical line and to probe the continuously varying set of correlation length critical exponents. The specific features of the tangential scaling are highlighted, in contrast to the standard scaling holding in the Ising-like transition between the gapless antiferromagnetic Néel and gapped Haldane phases. Our results are compared with field-theoretic predictions and available high-accuracy data for specific points along the Gaussian line.

DOI: [10.1103/PhysRevB.104.024409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.024409)

### I. INTRODUCTION

Quantum spin models have been vastly investigated in several physical contexts. They are able to capture several interesting properties and the outstanding collective behavior of strongly correlated electron systems. Interacting quantum spin models usually exhibit appealing physical phenomena, especially in one dimension due to strong quantum fluctuation effects. The one-dimensional Heisenberg model describes localized spins interacting through exchange coupling between neighbors. It can be viewed as the strong-interaction limit of a more complex Hubbard model for itinerant electrons [1]. The isotropic antiferromagnetic Heisenberg model can exhibit distinct spin phases for integer or semi-integer spins. The spin- $\frac{1}{2}$  chain, for example, has a unique critical (massless) ground state, with gapless excitations and power-law decaying correlation functions. On the other hand, the spin-1 chain has a disordered (massive) ground state, gapped excitations, and exponential decay of correlations [1,2]. The fundamental physical mechanism leading to such intriguing distinct behaviors was conjectured by Haldane in seminal works [3,4]. Nowadays, the Haldane phase is understood as a symmetric protected topological phase of matter [5,6], characterized by a nonvanishing string order parameter [7] and the full breaking of a hidden  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  symmetry [8].

Since Haldane's conjecture, quantum spin-1 chains, as well as several closely related models [9], have been deeply studied. A rich scenario of quantum phases of matter has emerged with quantum phase transitions as a central issue [10–12]. An interesting model which supports Haldane's conjecture was introduced by Affleck, Kennedy, Lieb, and Tasaki (AKLT) [13,14] in which the ground state was obtained exactly by mapping the spin-1 operator into the subspace of two half spins for each site. The ground state spin configuration follows the construction of valence-bound states. The

AKLT model features a Haldane gapped ground state and can be interpreted as a particular case of a more general spin-1 model with bilinear and biquadratic interactions [15,16]. It features a phase diagram with ferromagnetic, dimerized, Haldane, and critical phases. Another important class of quantum spin model emerges when one considers two kinds of anisotropies, “Ising” and uniaxial single ion, parameterized by  $\lambda$  and  $D$ , respectively. The Heisenberg XXZ spin-1 model with single-ion anisotropy was extensively studied [17–24]. Its zero-temperature phase diagram is well understood nowadays, featuring an interesting type of topological quantum phase transition between two gapped phases (Haldane and large  $D$ ) separated by a gapless critical point that belongs to the Gaussian universality class.

Indeed, the Gaussian class of topological quantum phase transitions occurs in several interesting interacting quantum spin model. However, the associated critical exponents are not universal. As such, the determination of critical Gaussian points and exponents is a challenging task. The twisted boundary conditions technique [25], for example, was implemented to determine the Gaussian critical point that separates Haldane and large- $D$  phases in a Heisenberg spin-1 XXZ chain with single-ion anisotropy. This technique explores the different values of eigenvalues of space inversion and time-reversal operators in these phases [21]. The so-called multitarget density matrix renormalization group method (DMRG) [26] combined with finite-size scaling theory [22] was also implemented in the same model, focusing on the precise determination of the Gaussian critical line. Another interesting aspect is the possibility to investigate Gaussian quantum phase transitions in a one-dimensional lattice model through a mapping transformation onto a Gaussian free two-dimensional field theory, with deep connections with conformal field theories [22]. Recently, a rhombic-type single-ion anisotropy spin-1 model was considered [27,28], in which

the phase diagram features three Gaussian critical points that were investigated using the numerical density renormalization group method [29,30] and the level spectroscopy method [25,31,32], including a discussion of the topological aspects of the Gaussian transitions.

From the quantum information perspective, several kinds of measurements of entanglement were proposed to localize critical points where the quantum phase transition occurs (see, e.g., [33]). The fidelity approach [34,35] was implemented to localize the critical points in anisotropic spin-1 model, for which the fidelity susceptibility fails to detect the Gaussian transition in the  $(D - \lambda)$  plane for  $\lambda = 0.5$ . The scaling behavior of von Neumann entropy has been used to determine accurately the central charge of the associated conformal field theory and the phase boundaries of the Gaussian topological quantum phase transitions in several models, including an extended Bose-Hubbard model [36–38], dimerized spin-1 XXZ with uniaxial single-ion anisotropy [39], and topological aspects of spin-2 quantum chains [40,41]. An improved error protocol method for the DMRG was introduced [42], for which the critical Gaussian points were obtained with high accuracy by exploring the von Neumann entropy behavior for large system sizes. Recently, a finite-size scaling analysis of the energy gaps in the vicinity of Gaussian transitions was introduced [43,44] in prototype models of heterotrimetallic compounds described as branched chains with alternate  $S = 1/2$  and larger spins. It was shown that the closing of the gap on both phases meeting at the Gaussian critical point requires a proper tangential scaling form. Such adapted tangential finite-size scaling analysis was shown to provide accurate estimates of the Gaussian critical point, as well as of the associated correlation length critical exponent.

In this work, we aim to detail the tangential finite-size scaling technique and to demonstrate its capability and accuracy. To reach this goal, we will apply this technique to investigate the quantum critical behavior of the spin-1 Heisenberg XXZ chain with uniaxial single-ion anisotropy. This model is known to display a Gaussian critical line with continuously varying critical exponents [19,21]. Using a proper tangential scaling form of the scaled gap in the vicinity of the Gaussian quantum critical points, we will estimate their location along the full transition line. The collapse of data obtained from density matrix renormalization group calculations on finite chains into the tangential scaling form will be used to provide accurate values of the correlation length critical exponent along the Gaussian line. The estimated correlation length critical exponents will be compared to analytical predictions based on the mapping transformation in an effective continuum  $O(2)$  nonlinear field-theoretic nonlinear  $\sigma$  model [22,45], as well as with previous high-precision numerical estimates [42].

## II. MODEL AND THE $O(2)$ NONLINEAR $\sigma$ MODEL MAPPING

The XXZ spin-1 chain with uniaxial single-ion anisotropy is described by the following Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N J[(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \lambda S_i^z S_{i+1}^z)] + D \sum_{i=1}^N (S_i^z)^2, \quad (1)$$

where  $S_i^\alpha$  denotes the component  $\alpha = x, y, z$  of the spin-1 operator. The parameters  $\lambda$  and  $D$  represent the Ising-like and uniaxial single-ion anisotropies, respectively. The isotropic antiferromagnetic exchange parameter  $J$  here will be fixed as the energy scale ( $J = 1.0$ ). The ground state phase diagram of the above model features several quantum phases [21] such as Haldane, large- $D$ , ferromagnetic, and antiferromagnetic (AF) Néel phases, as well as two critical XY phases distinguished by their low-lying spin excitations [19]. Several kinds of quantum phase transitions takes place. Here we feature three of those: a Gaussian topological transition between the gapful Haldane and large- $D$  phases that have opposite parity symmetries, Kosterlitz-Thouless transitions between gapless XY and gapful Haldane or large- $D$  phases, and an Ising transition between Haldane and Néel phases. Here we will focus on the absolute positive ( $\lambda > 0$  and  $D > 0$ ) parameter space of the phase diagram where the Haldane, large- $D$ , and AF Néel phases appear.

From the quantum field theory point of view, the lattice spin-1 model described by Eq. (1) along the Gaussian transition critical line can be mapped onto a free Gaussian model in Euclidean space by using the path-integral representation of the partition function and spin coherent states [1]. The procedure described in Refs. [22,45] leads to an effective continuum  $O(2)$  nonlinear  $\sigma$  model (NL $\sigma$ M):

$$\mathcal{L}_{O(2)} = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{v} (\partial_\tau \Theta)^2 + v (\partial_x \Theta)^2 \right] \quad (2)$$

and

$$g = \frac{1}{s} \sqrt{2(1 + D + \lambda)}, \quad (3)$$

$$v = s \sqrt{2(1 + D + \lambda)}, \quad (4)$$

with  $\Theta$  being the bosonic field compactified in a circle of radius  $\frac{1}{\sqrt{g}}$  and  $v$  being the spin-wave velocity of the theory. This procedure establishes a direct connection of the lattice model parameters with  $g$  and  $v$  of the continuum model, which allows us to compare numerical calculations for this lattice model with the field-theoretic predictions. It is described by the conformal field theory with central charge  $c = 1$  [45] and a nonuniversal radius compactification parameter  $K = \pi/g$ . The cases  $K = 1/2$  and  $K = 1$  correspond to special self-dual and free Dirac points [22,39]. The Kosterlitz-Thouless quantum phase transition has  $K = 2$ , as demonstrated, for example, in the Tomonaga-Luttinger regime of anisotropic spin chains [46] after a phenomenological bosonization transformation [47].

## III. FINITE-SIZE SCALING: ISING AND GAUSSIAN POINTS

The scaling behavior of excitation energy gaps is usually explored in the determination of phase boundaries and critical points in several quantum spin models [48]. However, some challenging aspects are involved in nonconventional classes of quantum phase transitions, such as Kosterlitz-Thouless and Gaussian critical points. The scaling form of the excitation gaps depends on the nature of the specific quantum phase transitions. For example, the Ising class features a crossing

behavior of the scaled excitation gap curves in the vicinity of the critical point. On the other hand, the scaled excitation gap curves behave differently at Gaussian critical points, presenting a tangential scaling in the vicinity of the transition [43,44]. Exploring these ideas, we develop a simple method to determine the critical points and correlation length critical exponents directly from the scaled excitation gap data for the Gaussian class of quantum phase transitions. Data were obtained by employing the tensor network [49,50] formulation of the numerical DMRG method [29,30]. All data we report were obtained using the open-source code from the Algorithms and Libraries for Physics Simulations (ALPS) project [51]. We considered periodic boundary conditions and several system sizes up to  $N = 100$ . The bond dimension  $\chi$  inherent in DMRG calculations was chosen seeking truncation errors of the order of  $10^{-9}$ .

In general, the spin gap  $E_s$  is defined by

$$E_s = E_0(1, N) - E_0(0, N), \quad (5)$$

where  $E_0(M, N)$  is the ground state energy with  $N$  spins in the total magnetization sector  $M = \sum_i^N S_i^z$ . Since Haldane and large  $D$  are gapped phases, we expect the spin gap to remain finite in both phases. At the Gaussian transition point, such an energy gap decreases as  $1/N$  with increasing system sizes.

The AF Néel to Haldane phase transitions belong to the Ising class of phase transitions. The proper quantity to explore such a critical point is the neutral gap  $E_n$ , given by

$$E_n = E_1(0, N) - E_0(0, N), \quad (6)$$

corresponding to the difference between the first excited and ground state energies in the total magnetization sector  $M = 0$ . Here the energy gap differs from the spin gap in the quantum number  $M$ , calculating the energy difference in the same magnetization sector for two low-lying eigenvalues. While in the Haldane phase this energy gap remains finite in the thermodynamic limit, it vanishes as  $1/N$  at the Ising critical point and faster within the AF Néel phase.

Exploring the vanishing behavior of the energy gaps at the critical points for several systems sizes, we expect the curves for scaled gaps  $\Delta_s = NE_s$  or  $\Delta_n = NE_n$  for diverse systems sizes to meet only at the critical point. Exploring this feature, we built the phase diagram of the model, as reported in Fig. 1. Details of the scaling procedure will be given below. Our results give reliable estimates of some representative features of the phase diagram that have been previously raised using other techniques [21]. For example, the extrapolation to the tricritical point where the Gaussian and Ising lines meet is ( $D \simeq \lambda \sim 3.0$ ). Further, we could capture with good agreement the critical point  $D_c = 0.3493$  at the axis  $\lambda = 0$  corresponding to the interface of Haldane, large- $D$ , and XY phases. This point represents a Kosterlitz-Thouless transition between a critical phase and a gapped phase. We also got the critical point  $\lambda_c = 1.1862$  at the axis  $D = 0.0$  for the Ising curve separating Haldane and AF Néel phases.

#### A. Ising transition: Standard finite-size scaling

We start the description of the finite-size scaling technique by recalling its main features that hold in the vicinity of the usual Ising phase transition between Haldane and AF Néel

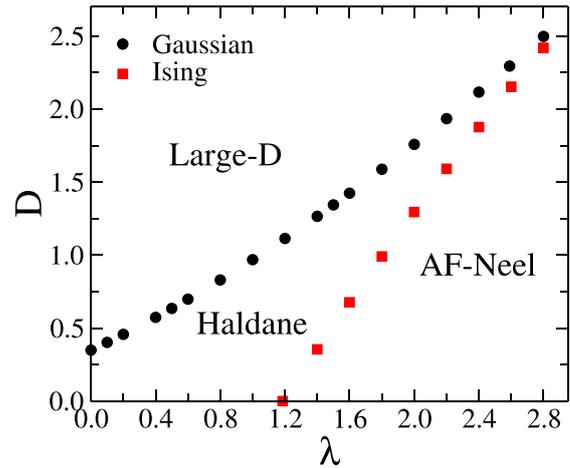


FIG. 1. Ground state phase diagram of the Hamiltonian (1) for positive  $\lambda$  and  $D$ . Black circles denote the Gaussian transition critical line between Haldane and large- $D$  phases. Red squares represent the Ising critical line separating Haldane and AF Néel phases.

phases. The correlation length  $\xi$  is the only relevant length scale in the thermodynamic limit that diverges at the critical point. For a fixed value of  $\lambda$ , the correlation length scales as  $\xi \propto |D - D_c|^{-\nu}$ , with the well-known critical exponent  $\nu = 1.0$ . For finite chains, the single-parameter scaling hypothesis implies that the relevant physical quantities will depend only on the ratio  $\xi/N$ , at least in the vicinity of the critical point where  $\xi \gg 1$ . According to this reasoning, data for the scaled neutral gap  $\Delta_n$  obtained for distinct values of chain sizes and anisotropies will obey the universal scaling form:

$$\Delta_n = f\left(\frac{\xi}{N}\right) = g[(D - D_c)N^{1/\nu}], \quad (7)$$

with  $g(x \rightarrow -\infty) \rightarrow 0$ .  $g(x \rightarrow +\infty) \propto x^\nu$  guarantees that the neutral energy gap becomes size independent in the thermodynamic limit within the Haldane phase. To account for the size independence of the scaled neutral gap at the transition, one might have  $g(0)$  be a constant. At the critical point, the first derivative of (7) scales as  $d\Delta_n/dD \propto N^{1/\nu}$ . The main steps of the above finite-size scaling analysis are summarized in Fig. 4 below. These results were obtained for  $\lambda = 2.0$  and sweeping the values of  $D$  around the critical point. First, we explore the crossing behavior of the scaled gap  $\Delta_n$  curves for several systems sizes, which allows us to identify the critical point  $D_c = 1.2956(2)$  in Fig. 2(a). After that, we compute the first derivatives of  $\Delta_n$  at  $D = D_c$  for each chain size. When plotted as a function of  $N$  in log-log scale, as shown in Fig. 2(b), the slope gives the correlation length critical exponent  $1/\nu = 1.0$ . Further, we evaluate the accuracy of the above estimates of the critical point and correlation length exponent by plotting the scaled neutral gap  $\Delta_n$  versus the proper scaling variable using the scaling form for the Ising universality class given by Eq. (7). The collapse of all data from distinct chain sizes into a single curve corroborates the estimated critical parameter and the validity of the single-parameter scaling hypothesis. The above procedure was performed along the entire Ising critical line. As expected, the correlation length exponent  $\nu = 1$  was found to be universal.

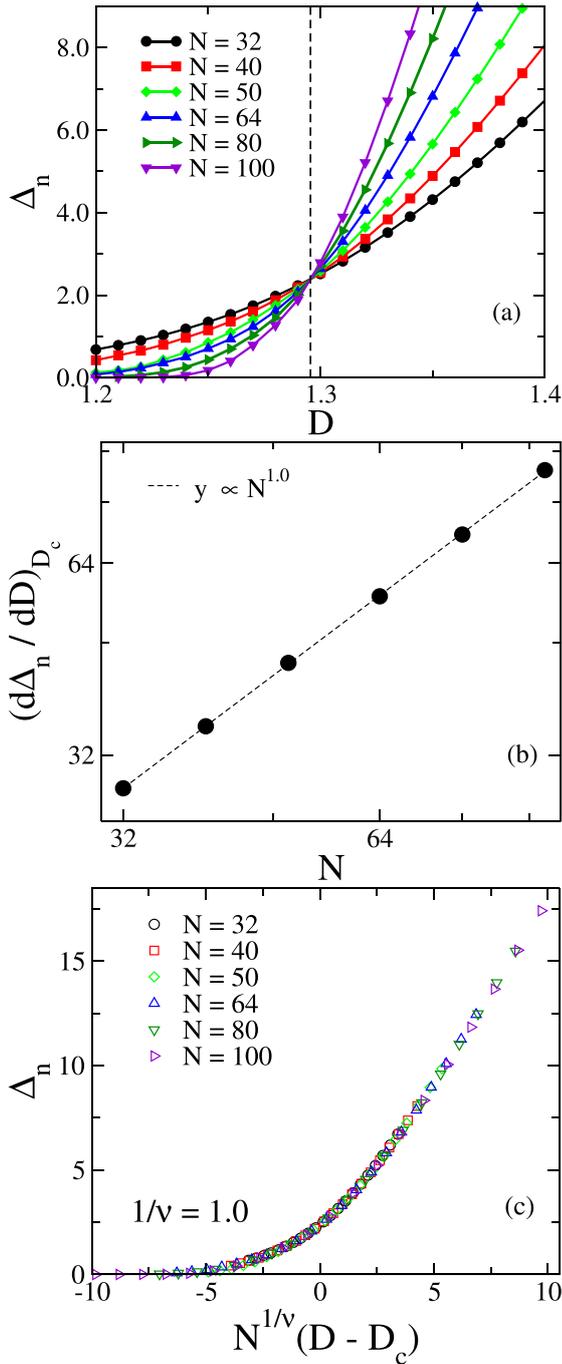


FIG. 2. Standard finite-size scaling in the vicinity of the Ising-like transition. In (a) we report the crossing behavior of the scaled neutral gap  $\Delta_n$  in the vicinity of the critical point  $D_c$ . In (b) we plot  $d\Delta_n/dD$  at the critical point as a function of the chain size  $N$ , which is consistent with the correlation length critical exponent  $1/\nu = 1$ . (c) shows the universal scale invariant behavior of the scaled neutral gap against the proper scaling variable, endorsing the accuracy of our estimates of the critical point and critical exponent and the validity of the single-parameter scaling hypothesis.

### B. Gaussian transition: Tangential finite-size scaling

The Néel-Haldane phase transition discussed above involves phases with null (AF Néel) and diverging (Haldane) scaled neutral gaps as  $N \rightarrow \infty$ . In contrast, the proper scaled

spin gap diverges on both Haldane and large- $D$  phases. Scale invariance still holds at the Gaussian transition point between these phases. Therefore, a different scaling analysis will be developed for this specific phase transition for which curves of the scaled gap from distinct system sizes do not cross but, rather, touch each other tangentially at the critical point.

Let us describe in detail the tangential finite-size scaling procedure that is appropriate to characterize the Gaussian critical point. Using the fact that the energy gap  $E_s$  closes just at the critical point, the scale invariant behavior of the system at the quantum Gaussian critical point emerges naturally. We will illustrate the method for two points along the Gaussian line, namely,  $\lambda = 0.5$  and  $\lambda = 2.0$ . The first step of the method is to compute the scaled spin gap curves for several systems sizes in the vicinity of the Gaussian transition point between Haldane and large- $D$  phases at a given  $\lambda$  by sweeping the anisotropy  $D$  values. We can see in Figs. 3(a) and 4(a) the typical behavior of the scaled spin gap. In each case, we used data from several system sizes up to chains with  $N = 100$  spins. The scaled spin gap  $\Delta_s$  indeed exhibits a quite different size dependence compared to the scaled neutral gap  $\Delta_n$  for the Ising transition. Instead of crossing at a single point, curves from distinct system sizes touch tangentially at the critical Gaussian point, as previously inferred. Therefore, not just the scaled spin gap but also its derivative  $\alpha_s = d\Delta_s/dD$  become scale invariant at the Gaussian transition.

The second step is to precisely locate the Gaussian critical point computing numerically the first derivative of the scaled spin gap  $\alpha_s$  as a function of the anisotropy parameter  $D$ , as shown in Figs. 3(b) and 4(b). These are the quantities that cross at the Gaussian critical point because the scaled spin gap and its derivative are both scale invariant but the curvature increases with the chain size. From the crossing at the critical points, we estimate  $D_c = 0.6352(2)$  and  $D_c = 1.7582(2)$  for  $\lambda = 0.5$  and  $\lambda = 2.0$ , respectively.

To estimate the correlation length critical exponent, we need to extract the scale invariance of the first derivative of the scaled spin gap at the critical point from the single-parameter finite-size scaling hypothesis. To account for this feature, the finite-size scaling form of the scaled spin gap is written as

$$\begin{aligned} \Delta_s &= (D - D_c)\alpha_s^* + f\left(\frac{\xi}{N}\right) \\ &= (D - D_c)\alpha_s^* + g[(D - D_c)N^{1/\nu}], \end{aligned} \quad (8)$$

where  $g(x)$  is quadratic at  $x = 0$ , diverging for  $x \rightarrow \pm\infty$ . Here  $\alpha_s^* = d\Delta_s/dD|_c$ . This scaling form ensures that the first derivative of the scaled spin gap at the critical point is scale invariant. The second derivative,  $d^2\Delta_s/dD^2 = d\alpha_s^*/dD = d^2g/dD^2$ , computed at the Gaussian critical point becomes proportional to  $N^{2/\nu}$ . The third step of the method, therefore, corresponds to plotting these values as a function of the system size and extracting the correlation length critical exponent, as shown in Figs. 3(c) and 4(c). Notice that the correlation length critical exponent is nonuniversal, as expected along the Gaussian critical line [21,22].

To complete the tangential finite-size scaling analysis, we perform a data collapse to evaluate the accuracy of the single-parameter scaling hypothesis (8). The proper quantity to be rescaled is  $\Delta_s - (D - D_c)\alpha_s^*$  whose values, when

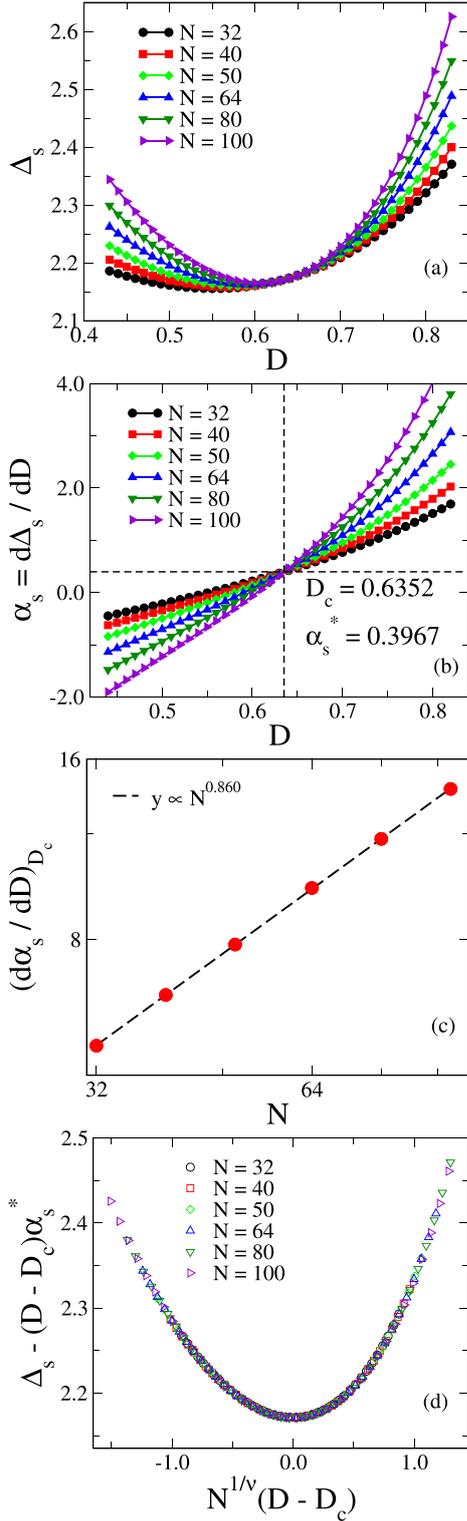


FIG. 3. (a) shows the scaled spin gap  $\Delta_s$  for  $\lambda = 0.5$  considering several system sizes around the Gaussian critical point. The tangential behavior at the critical point is evidenced. (b) features the first derivative of the scaled gap  $\alpha_s$ . The crossing point identifies precisely the Gaussian critical point  $D_c = 0.6352(2)$  and  $\alpha_s^* = d\Delta_s/dD|_c = 0.3967(6)$ . In (c) the power-law behavior of the second derivative of the scaled gap at the critical point allows us to extract the correlation length critical exponent  $1/\nu = 0.430(4)$ . In (d) we provide the data collapse of scaled spin gap curves using the estimated critical parameters onto the tangential finite-size scaling form.

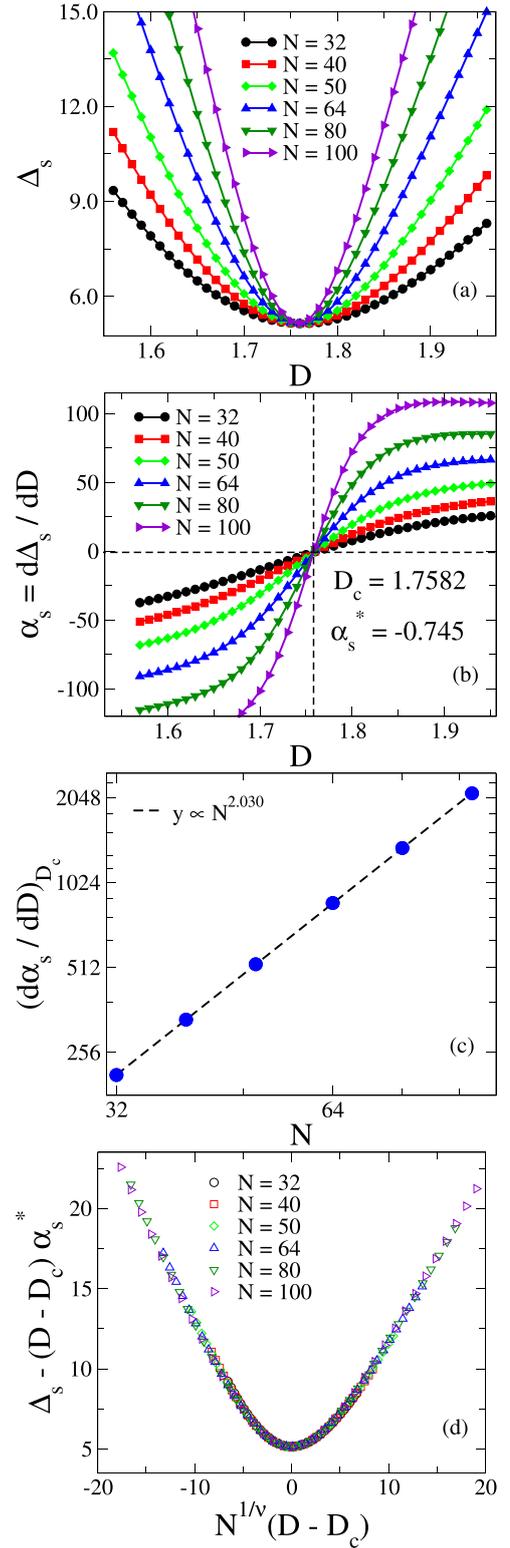


FIG. 4. (a) shows the scaled spin gap  $\Delta_s$  for  $\lambda = 2.0$  considering several system sizes around the Gaussian critical point. (b) features the first derivative of the scaled gap  $\alpha_s$ . The crossing point identifies the Gaussian critical point  $D_c = 1.7582(2)$  and  $\alpha_s^* = d\Delta_s/dD|_c = -0.745(9)$ . In (c) the power-law behavior of the second derivative of the scaled gap at the critical point allows us to extract the correlation length critical exponent  $1/\nu = 1.015(5)$ . In (d) we provide the data collapse of the scaled gap curves using the estimated critical parameters onto the tangential finite-size scaling form.

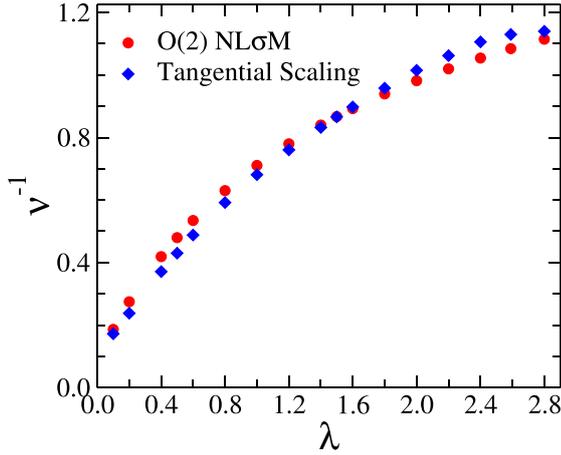


FIG. 5. Inverse of the nonuniversal correlation length critical exponent along the Gaussian critical line. Data from the tangential finite-size scaling as well as the theoretical  $O(2)$   $NL\sigma M$  prediction are shown. Error bars are of the order of the symbol size.

plotted against  $x = N^{\frac{1}{\nu}}(D - D_c)$ , will collapse onto a single universal curve  $g(x)$  independent of the chain size. Such a data collapse process is shown in Fig. 3(d) for  $\lambda = 0.5$  and Fig. 4(d) for  $\lambda = 2.0$  using the critical parameters estimated from the previous steps. The quadratic form of the scaling function  $g(x)$  at  $x = 0$  is a signature of the tangential finite-size scaling.

#### IV. DISCUSSION

Although the spin gap tangential scaling functions slightly differ along the Haldane to large- $D$  transition line [see Figs. 3(d) and 4(d)], the data collapse is successful and reveals the Gaussian character of this critical line. The protocol put forward in the previous section was implemented for a wide range of  $\lambda$  values. Besides the location of the critical line reported in Fig. 1, we also report the estimated correlation length exponents in Fig. 5, as well as the scale invariant derivative of the scaled spin gap  $\alpha_s^* = d\Delta_s/dD|_c$  along the critical line (see Fig. 6). All results are gathered in Table I.

The estimated critical parameters  $D_c$  and  $\nu$  can be compared with available values found in the literature. In the Gaussian free quantum field model (a  $NL\sigma M$ ), the compactification radius parameter  $K$  values are important in the determination of the universality class of a quantum phase transition. It is related to the effective central charge  $c = 1$  of the Gaussian theory and the critical exponent  $\nu = \frac{1}{(2-K)}$  [22]. Since  $K = \pi/g$  and  $g$  is given by Eq. (3), the Gaussian quantum field theory predicts that the correlation length exponent can be obtained if the location of the critical point is known, i.e., that these two critical quantities are not independent. Considering that the tangential finite-size scaling analysis provides independent measures of  $D_c$  and  $\nu$ , we tested the  $NL\sigma M$  prediction by computing the values of  $\nu$  from the expected values of the compactification radius  $K$ . The values of  $1/\nu_{NL\sigma M}$  predicted by the  $NL\sigma M$  are also reported in Fig. 5 and listed in the last column of Table I. The agreement is fairly good, supporting the mapping on the  $NL\sigma M$ . The slight deviations at the ends of the critical line may indicate either

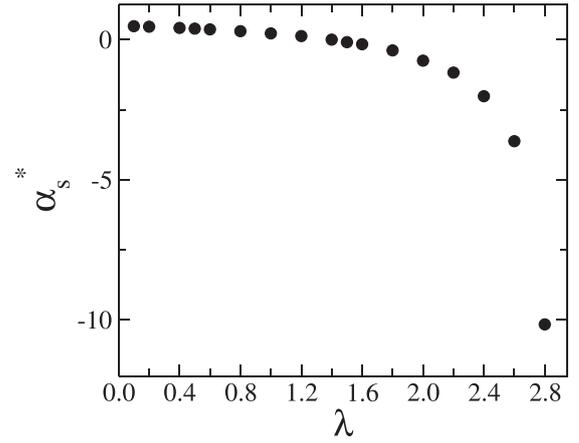


FIG. 6. The first derivative of the scaled spin gap  $\alpha_s^* = d\Delta_s/dD|_c$  along the Gaussian critical line. The values of  $\alpha_s^*$  are positive for small  $\lambda$ , approaching  $\alpha_s^* = 1/2$  as  $\lambda \rightarrow 0$ . Above  $\lambda = 1.4$ ,  $\alpha_s^*$  becomes negative and diverges as the Gaussian critical line ends at a tricritical point [22].

the possible presence of relevant corrections to scaling due to the proximity of other critical points or that higher-order terms in the field-theoretic functional are needed to fully capture the critical behavior at the Haldane to large- $D$  transition. As one decreases  $\lambda$ , the inverse of the correlation length exponent  $1/\nu \rightarrow 0$ , which indicates the Kosterlitz-Thouless nature of the transition at  $\lambda = 0$  with the compactification ratio  $K = 2.0$  [21,22].

The derivative of the scaled spin gap along the Gaussian critical line shows some features that deserve attention, as

TABLE I. Estimated values of the critical anisotropy  $D_c$ , first derivative of the scaled gap at the critical point  $\alpha_s^*$ , and inverse of the correlation length critical exponent  $\nu^{-1}$  obtained using the tangential finite-size scaling hypothesis for distinct values of  $\lambda$  along the Haldane to large- $D$  transition. We also include the field-theoretic prediction of the correlation length critical exponent  $\nu_{NL\sigma M}^{-1}$  based on the mapping on a  $NL\sigma M$  given by  $\nu^{-1} = 2 - \pi/\sqrt{2(1 + D_c + \lambda)}$ . For this, we used the estimated pairs  $(\lambda, D_c)$ .

$\lambda$	$D_c$	$\alpha_s^*$	$\nu^{-1}$	$\nu_{NL\sigma M}^{-1}$
0.10	0.4025(4)	0.4831(1)	0.172(3)	0.1877(3)
0.20	0.4575(3)	0.4648(4)	0.238(6)	0.2745(1)
0.40	0.5741(2)	0.4221(2)	0.371(4)	0.4189(1)
0.50	0.6352(2)	0.3967(6)	0.430(4)	0.4797(1)
0.60	0.6982(3)	0.3691(2)	0.488(2)	0.5346(1)
0.80	0.8298(4)	0.3055(7)	0.592(1)	0.6301(1)
1.00	0.9685(2)	0.2262(2)	0.681(1)	0.7107(1)
1.20	1.1139(3)	0.1305(5)	0.760(1)	0.7797(1)
1.40	1.2658(1)	0.0046(5)	0.832(1)	0.8397(1)
1.50	1.3440(2)	-0.092(8)	0.866(1)	0.8670(1)
1.60	1.4239(2)	-0.161(6)	0.898(1)	0.8926(1)
1.80	1.5881(1)	-0.381(8)	0.958(1)	0.9395(1)
2.00	1.7582(2)	-0.745(9)	1.015(5)	0.9816(1)
2.20	1.9343(1)	-1.171(9)	1.062(3)	1.0196(1)
2.40	2.1162(1)	-2.015(6)	1.106(3)	1.0542(1)
2.59	2.2944(2)	-3.62(8)	1.130(5)	1.0850(1)
2.80	2.4976(3)	-10.5(9)	1.14(1)	1.1148(1)

shown in Fig. 6. For small  $\lambda$ ,  $\alpha_s^*$  has small, but positive, values, approaching  $\alpha_s^* = 1/2$  for  $\lambda \rightarrow 0$ . Above  $\lambda \simeq 1.4$ , the critical scaled spin gap derivative changes sign and starts to diverge. It is interesting to recall that the Gaussian line meets the Ising critical line at a tricritical point. The precise location of the tricritical point is still not completely settled [21,22], although it is estimated to be close to  $D = 3.20$  and  $\lambda = 2.90$ . The tricritical point is described by the superposition of two conformal field theories with  $c = \frac{1}{2}$  and  $c = 1.0$  with the parameter  $K$  approaching 0.5 from above [22]. The divergence of the scaled spin gap derivative as one approaches the tricritical point can be explored to obtain its precise location. However, due to the proximity of Gaussian and Ising critical points, system sizes larger than those considered in the present work would be required to properly deal with possible corrections to scaling. This specific topic will be left for a future larger-scale computational effort.

In order to assess the accuracy of the present estimates of the Gaussian critical parameters based on the tangential finite-size scaling hypothesis, we compare some of our results with available high-precision estimates. A variant of the density matrix renormalization group method was used to study the Gaussian critical point at  $\lambda = 1.0$  and  $\lambda = 0.5$  for the spin-1 model described by (1), reaching system sizes up to  $N = 10\,000$  spins [42]. Exploring the peak behavior of von Neumann entropy, the critical point for  $\lambda = 1.0$  was estimated to be  $D_c = 0.96845(8)$ . The approach of the gap to zero at  $D_c$  from both the Haldane and large- $D$  sides provided  $\nu = 1.472(4)$ . Both estimates are fully compatible with those found using the present tangential finite-size scaling, namely,  $D_c = 0.9685(2)$  and  $\nu = 1.468(2)$ . It is interesting to note that the field-theoretic relation  $\nu_{NL\sigma M} = 1/(2 - K)$ , with  $K = \pi/\sqrt{1 + D + \lambda}$ , predicts the correlation length exponent  $\nu_{NL\sigma M} = 1.407$  for ( $\lambda = 1, D_c = 0.9685$ ). For  $\lambda = 0.5$ , the critical point was estimated in Ref. [42] to be  $D_c = 0.6355(6)$ , also in excellent agreement with the present estimate of  $D_c = 0.6352(1)$ . In this case, the previous estimate of the correlation length exponent  $\nu = 2.387(5)$  was not derived using the scaling analysis of the closing gap but indirectly through the estimate of the compactification ratio  $K$ . This value is slightly above our present estimate of  $\nu = 2.325(22)$  based on the tangential scaling. Both estimates are above the field-theoretic prediction  $\nu_{NL\sigma M} = 2.08$  for ( $\lambda = 0.5, D_c = 0.6352$ ). Our results are also compatible with the critical point ( $\lambda = 2.59, D_c = 2.30$ ) at which  $1/\nu = 1.15$  reported in Ref. [22].

## V. CONCLUDING REMARKS

In summary, we revisited the spin-1 XXZ Heisenberg model with uniaxial single-ion anisotropy, aiming to characterize the Gaussian critical line using a specially tailored tangential finite-size scaling hypothesis. To clearly expose the distinct features of standard and tangential finite-size scaling, we focused on two transition lines.

The first one was the Ising-like transition line between the gapless AF Néel and gapped Haldane phases for which standard finite-size scaling of the scaled neutral energy gap holds. The usual scaling hypothesis was shown to provide precise estimates of the critical line and the universal correlation length critical exponent  $\nu = 1$ .

The second transition investigated in the present work was between the gapped Haldane and large- $D$  phases. It is a topological Gaussian phase transition with the relevant energy spin gap closing at the critical point. The scaled energy gap and its derivative at the critical point are both scale invariant. To account for this specific feature, a tangential finite-size scaling hypothesis was implemented to properly write the scaled gap as a single function of the ratio between the chain size  $N$  and the correlation length  $\xi \propto |D - D_c|^{-\nu}$ .

Exploring the tangential scaling, we were able to locate the Gaussian transition and to estimate the nonuniversal correlation length critical exponent along the Gaussian critical line. The estimated values of the critical exponents were shown to be in good agreement with a field-theoretic prediction based on a mapping to a nonlinear  $\sigma$  model [22]. The estimated  $D_c$  and  $\nu$  values are also compatible with available data from the twisted boundary conditions method [25,32] and high-accuracy calculations based on large-scale DMRG studies using chains up to  $N = 10^4$  sites [42]. Considering that the tangential finite-size scaling analysis requires data from relatively small chains sizes, it appears to be a powerful procedure that adds to recent efforts aiming to investigate Gaussian topological quantum phase transitions in general spin chains [52–56].

## ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nivel Superior), CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), and FAPEAL (Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Alagoas).

- 
- [1] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer, New York, 1994).
  - [2] H. Tasaki, *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems* (Springer, New York, 2020).
  - [3] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
  - [4] F. D. M. Haldane, *Phys. Lett. A* **93**, 464 (1983).
  - [5] Z.-C. Gu and X.-G. Wen, *Phys. Rev. B* **80**, 155131 (2009).
  - [6] F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. B* **85**, 075125 (2012).
  - [7] M. den Nijs and K. Rommelse, *Phys. Rev. B* **40**, 4709 (1989).
  - [8] T. Kennedy and H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* **147**, 3 (1992).
  - [9] I. Affleck, *J. Phys.: Condensed Matter* **1**, 19 (1989).
  - [10] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 2011).
  - [11] M. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems: An Approach to Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 2017).
  - [12] M. Vojta, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 12 (2003).
  - [13] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).

- [14] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* **115**, 3 (1988).
- [15] J. Sólyom, *Phys. Rev. B* **36**, 8642 (1987).
- [16] A. Läuchli, G. Schmid, and S. Trebst, *Phys. Rev. B* **74**, 144426 (2006).
- [17] R. Botet, R. Jullien, and M. Kolb, *Phys. Rev. B* **28**, 3914 (1983).
- [18] J. Sólyom and T. A. L. Ziman, *Phys. Rev. B* **30**, 3980 (1984).
- [19] H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **34**, 6372 (1986).
- [20] O. Golinelli, Th. Jolicoeur, and R. Lacaze, *Phys. Rev. B* **45**, 9798 (1992).
- [21] W. Chen, K. Hida, and B. C. Sanctuary, *Phys. Rev. B* **67**, 104401 (2003).
- [22] C. D. E. Boschi, E. Ercolessi, F. Ortolani, and M. Roncaglia, *Eur. Phys. J. B* **35**, 465 (2003).
- [23] A. F. Albuquerque, C. J. Hamer, and J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **79**, 054412 (2009).
- [24] S. Ejima and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **91**, 045121 (2015).
- [25] A. Kitazawa, *J. Phys. A* **30**, 1088 (1997).
- [26] C. D. E. Boschi and F. Ortolani, *Eur. Phys. J. B* **41**, 503 (2004).
- [27] Y.-C. Tzeng, H. Onishi, T. Okubo, and Y.-J. Kao, *Phys. Rev. B* **96**, 060404(R) (2017).
- [28] J. Ren, Y. Wang, and W.-L. You, *Phys. Rev. A* **97**, 042318 (2018).
- [29] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [30] Y.-C. Tzeng, *Phys. Rev. B* **86**, 024403 (2012).
- [31] K. Nomura, *J. Phys. A* **28**, 5451 (1995).
- [32] A. Kitazawa and K. Nomura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 3944 (1997).
- [33] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
- [34] Y.-C. Tzeng, H.-H. Hung, Y.-C. Chen, and M.-F. Yang, *Phys. Rev. A* **77**, 062321 (2008).
- [35] Y.-C. Tzeng and M.-F. Yang, *Phys. Rev. A* **77**, 012311 (2008).
- [36] S. Nishimoto, *Phys. Rev. B* **84**, 195108 (2011).
- [37] S. Ejima, F. H. L. Essler, F. Lange, and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **93**, 235118 (2016).
- [38] K. Sugimoto, S. Ejima, F. Lange, and H. Fehske, *Phys. Rev. A* **99**, 012122 (2019).
- [39] S. Ejima, T. Yamaguchi, F. H. L. Essler, F. Lange, Y. Ohta, and H. Fehske, *SciPost Phys.* **5**, 059 (2018).
- [40] H.-H. Tu and R. Orús, *Phys. Rev. B* **84**, 140407(R) (2011).
- [41] A. Kshetrimayum, H.-H. Tu, and R. Orús, *Phys. Rev. B* **91**, 205118 (2015).
- [42] S. Hu, B. Normand, X. Wang, and L. Yu, *Phys. Rev. B* **84**, 220402(R) (2011).
- [43] L. M. Veríssimo, M. S. S. Pereira, J. Strečka, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **99**, 134408 (2019).
- [44] F. Souza, L. M. Veríssimo, J. Strečka, M. L. Lyra, and M. S. S. Pereira, *Phys. Rev. B* **102**, 064414 (2020).
- [45] C. D. E. Boschi, E. Ercolessi, and G. Morandi, in *Symmetries in Science XI*, edited by B. J. Gruber, G. Marmo, and N. Yoshinaga (Springer, Dordrecht, 2005), pp. 145–173.
- [46] R. R. Montenegro-Filho, F. S. Matias, and M. D. Coutinho-Filho, *Phys. Rev. B* **102**, 035137 (2020).
- [47] T. Giamarch, *Quantum Physics in One Dimension* (Clarendon, Oxford, 2003).
- [48] A. Kolezhuk and H. Mikeska, in *Quantum Magnetism*, edited by U. Schollwöck, J. Richter, D. Farnell, and R. Bishop (Springer, Berlin Heidelberg, 2004), pp. 1–83.
- [49] R. Orús, *Ann. Phys. (NY)* **349**, 117 (2014).
- [50] U. Schollwöck, *Ann. Phys. (NY)* **326**, 96 (2011).
- [51] M. Dolfi, B. Bauer, S. Keller, A. Kosenkov, T. Ewart, A. Kantian, T. Giamarchi, and M. Troyer, *Comput. Phys. Commun.* **185**, 3430 (2014).
- [52] Y. Wang, H. Zhang, and A. Kamenev, *Phys. Rev. B* **101**, 235145 (2020).
- [53] T. Gulden, M. Janas, Y. Wang, and A. Kamenev, *Phys. Rev. Lett.* **116**, 026402 (2016).
- [54] E. J. König, A. Levchenko, and N. Sedlmayr, *Phys. Rev. B* **93**, 235160 (2016).
- [55] Y. Wang, T. Gulden, and A. Kamenev, *Phys. Rev. B* **95**, 075401 (2017).
- [56] K. Wang and T. A. Sedrakyan, *Phys. Rev. B* **101**, 035410 (2020).



## Research article

# Topological quantum phase transition in a mixed-spin Heisenberg tetramer chain with alternating spin-1/2 and spin-5/2 dimers

Luan M. Veríssimo<sup>a</sup>, Maria S.S. Pereira<sup>a</sup>, Jozef Strečka<sup>b</sup>, Marcelo L. Lyra<sup>a,\*</sup><sup>a</sup> Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, 57072-900, Maceió - AL, Brazil<sup>b</sup> Department of Theoretical Physics and Astrophysics, Faculty of Science, P. J. Šafárik University, Park Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovakia

## ARTICLE INFO

## Keywords:

Ferrimagnetic quantum spin chain  
 Topological phase transition  
 Valence-bond solid states  
 Tangential finite-size scaling

## ABSTRACT

We investigate magnetic quantum phases and the topological quantum phase transition between two distinct valence-bond solid (VBS) phases of a minimal interacting spin-chain model that captures a magnetic behavior of the novel low-dimensional quantum ferrimagnetic material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$ . The studied mixed-spin Heisenberg tetramer chain consists of a 4-period array of spins involving two types of dimers  $s_a - s_a$  ( $s_a = 1/2$ ) and  $S_b - S_b$  ( $S_b = 5/2$ ) under the assumption of unique intra- and inter-dimer coupling constants  $J_1$  and  $J_2$ , respectively. Using the tensor-network formulation of the density-matrix renormalization group method, we have constructed the ground-state phase diagram in the parameter space magnetic field versus the interaction ratio  $J = J_2/J_1$ , whereby all ground states are in accordance with the Oshikawa–Yamanaka–Affleck theorem for a given period. In addition, we have implemented the recent tangential finite-size scaling method in order to characterize the critical behavior of the topological VBS transition through calculation of the critical point  $J_c$  and the critical exponent of the correlation length  $\nu$ . Our results are consistent with the topological quantum phase transition from the SU(2) Wess–Zumino–Witten universality class with the critical exponent of correlation length  $\nu = 2/3$  by assuming the proper logarithmic correction.

## 1. Introduction

Interacting quantum spin models are an intriguing playground to investigate emergent quantum many-body phenomena such as exotic quantum orders, quantum phase transitions, and criticality [1–4]. In recent years one observes a growing interest in understanding a new type of quantum order called topological phases of matter [5–8] within new concepts falling beyond the Landau–Ginzburg–Wilson paradigm on the classification of phases of matter such as symmetry breaking and local order parameter [3,9].

Beyond the noninteracting topological insulators, quantum Heisenberg spin models provide playground for emergent quantum many-body phenomena including topologically nontrivial phases. The spin-1 Heisenberg chain, for instance, has a unique ground state with a hidden string order and gapped excitations as pointed out in the seminal works of Haldane [10,11]. Compared to this, the spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg chain exhibits totally different behavior when displaying a critical ground state with gapless excitations [3,4]. Another intriguing example represents the antiferromagnetic spin-1 Heisenberg chain with the bilinear–biquadratic interactions referred to as the Affleck–Kennedy–Lieb–Tasaki (AKLT) model [12–14], which exhibits for a special ratio of

the bilinear and biquadratic coupling constants an exact valence-bond-solid (VBS) ground state being continuously connected to the Haldane phase [3,14]. The AKLT model was thus the first exactly solved model confirming the Haldane conjecture about a finite gap in the energy spectrum above the unique ground state and exponentially decaying correlation functions [3].

The ground states of both aforementioned models display a special kind of topological order and are therefore called as symmetry-protected topological phases [15,16], whereby presence of a symmetry group protects the topological order to be adiabatically connected to a trivial phase [3,9]. Non-trivial topological phases in one dimension have long-range patterns of entanglement [17] following the area-law [18] and are characterized by den Nijs–Rommelse string order [19], edge states emergent for open-boundary conditions, and the doublet pattern in the entanglement spectrum [16,20]. Additionally, the detection of symmetry-protected topological phases is possible by computing the topological index associated with the projective representations of the spatial-inversion, time-reversal, and  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  symmetries [21].

The phenomenon of fractionalization of the spin degree of freedom, which is responsible for unconventional properties of topological

\* Corresponding author.

E-mail addresses: [luan.martins@fis.ufal.br](mailto:luan.martins@fis.ufal.br) (L.M. Veríssimo), [marcelo@fis.ufal.br](mailto:marcelo@fis.ufal.br) (M.L. Lyra).

phases, also occurs in mixed-spin Heisenberg chains [22–26]. The emergence of fractional magnetization plateaus in one-dimensional quantum spin chains can be for instance explained according to the Oshikawa–Yamanaka–Affleck theorem as the topological quantization of the magnetization [27]. Exotic quantum phases of a subtle nature such as distinct magnetic gapped phases [28,29] and VBS phases [30] are alluring subjects of theoretical studies including magnetic-field-driven quantum phase transitions between them [30–34].

The class of quantum Heisenberg tetramer bond-alternating spin chains with four-period  $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$  unit cell was extensively studied under the assumption of isotropic exchange interactions [30–33,35,36], which may be tuned at zero magnetic field in order to achieve a quantum critical point between distinct topological phases separated by the quantum phase transition from the Wess–Zumino–Witten SU(2) universality class [37,38]. This type of quantum critical behavior is in general difficult to characterize due to logarithmic corrections in the physical quantities of interest, which are inherent to the topological quantum phase transition. It is noteworthy that the phase diagram of quantum Heisenberg tetramer bond-alternating spin chain was proposed using field theoretic predictions based on the nonlinear  $\sigma$  model [35]. The nature of topological quantum phase transition was investigated also using the twist operator [33,34], while the quantum critical points of successive VBS topological phase transitions were obtained for the particular choice of  $S_1 = 1$  and  $S_2 = 3/2$  using quantum Monte Carlo simulations [30]. Entanglement measures were implemented for an investigation of the VBS quantum phase transition by assuming the spin magnitudes  $S_1 = 1/2$  and  $S_2 = 1$ , for which the logarithmic negativity at finite temperatures located the quantum critical point at  $\alpha_c = 0.768$  [32], the scaling form of the fidelity susceptibility gave locus of the quantum critical point at  $\alpha_c = 0.7625$  and the critical exponent of correlation length  $\nu = 0.733$  [31]. It has been also previously suggested that the combination of spin magnitudes  $S_1 = 1/2$  and  $S_2 = 5/2$  affords a minimal one-dimensional quantum Heisenberg model capturing magnetic properties of the quantum ferrimagnetic material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$  [39–41]. Along one crystallographic axis, this bicomponent insulating metal oxide compound contains an alternate sequence of Cu–O–Cu dimers and edge-sharing octahedra  $\text{FeO}_6$  dimers. Consequently, the unit cell size is quadrupled along this chain direction. Inelastic neutron scattering data suggest this compound is a prototype to study the effect of randomness-free RKKY-like interaction in insulating metal oxides displaying unusual cooperative ordering phase transitions at low temperatures.

In the present paper, we aim to investigate the magnetic phases and critical phenomena for the mixed-spin Heisenberg tetramer chain composed from the regularly alternating  $s_a = 1/2$  and  $S_b = 5/2$  dimers. First, we will examine the magnetic quantum phases of the investigated quantum spin chain by exploring the ground-state phase diagram established within the framework of density-matrix renormalization group (DMRG) method. Our particular attention will be focused on the quantum critical point emergent at zero magnetic field, which corresponds to the topological quantum phase transition between two gapped phases. Recently introduced tangential finite-size scaling method will be implemented in order to characterize this quantum critical point by computing the critical exponent of the correlation length [42]. An efficiency of this calculation procedure will be verified by determining the expected critical exponent  $\nu$  of the correlation length for the SU(2) Wess–Zumino–Witten universality class [37,38] as well as a typical logarithmic correction on the leading power-law behavior of the correlation length for this special type of universality class [43].

This paper is organized as follows. In the next section, we will present the model Hamiltonian of the mixed-spin Heisenberg tetramer chain with the regularly alternating  $s_a = 1/2$  and  $S_b = 5/2$  dimers and explain basic steps of the DMRG method implemented for obtaining our numerical data. In Section 3 we present the ground-state phase diagram in the magnetic field versus the interaction ratio parameter

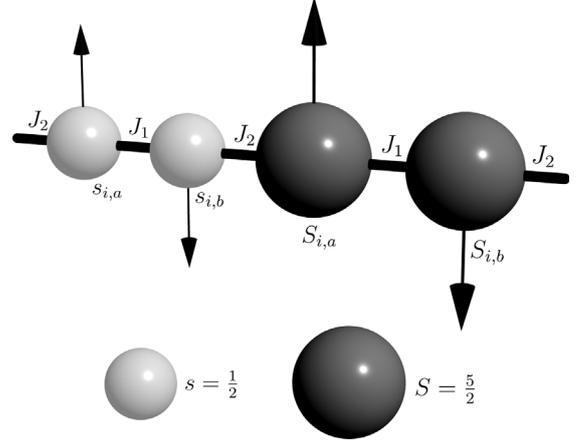


Fig. 1. The unit cell of the quantum Heisenberg tetramer chain composed from two coupled dimers  $s = \frac{1}{2}$  and  $S = \frac{5}{2}$  with bond-alternating isotropic intra-dimer and inter-dimer coupling constants  $J_1$  and  $J_2$ , respectively.

space and discuss the magnetization process. Section 4 explains and implements the tangential finite-size scaling method to characterize the topological quantum phase transition. Finally, the most important results are summarized in Section 5.

## 2. Model and method

In the following, we will investigate magnetic and critical properties of the quantum mixed spin  $(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2})$  Heisenberg tetramer chain with bond-alternating isotropic exchange interactions described by the Hamiltonian:

$$H = \sum_{i=1}^{N_u} [J_1(\mathbf{s}_{i,a} \cdot \mathbf{s}_{i,b} + \mathbf{S}_{i,a} \cdot \mathbf{S}_{i,b}) + J_2(\mathbf{s}_{i,b} \cdot \mathbf{S}_{i,a} + \mathbf{S}_{i,b} \cdot \mathbf{s}_{i+1,a}) - \mu_0 g B (s_{i,a}^z + s_{i,b}^z + S_{i,a}^z + S_{i,b}^z)]. \quad (1)$$

In above, the sum runs over all unit cells,  $N_u$  is the total number of the unit cells,  $\mathbf{s}_{i,a}$  and  $\mathbf{s}_{i,b}$  represent the spin  $s^\alpha = \frac{1}{2}$  operators,  $\mathbf{S}_{i,a}$  and  $\mathbf{S}_{i,b}$  represent the spin operators  $S^\alpha = \frac{5}{2}$  with the superscript index  $\alpha$  accounting for all spatial components  $x, y, z$  of the respective spin operator. We also considered the effect of the magnetic field  $h = \mu_0 g B$  applied along the  $z$ -axis ( $\mu_0$  is Bohr magneton and  $g$  is Landé  $g$ -factor). Fig. 1 illustrates the structure of the four-period unit cell composed from two dimers  $s_{i,a} - s_{i,b}$  and  $S_{i,a} - S_{i,b}$  assuming the isotropic intra- and inter-dimer exchange interactions  $J_1$  and  $J_2$ , respectively. The mixed-spin Heisenberg bond alternating chain was previously investigated by considering different unit cell elements [31,32] and a large class of gapped phases were found at zero magnetic field in the ground-state phase diagram of the quantum Heisenberg tetramer spin chain  $S_1 - S_1 - S_2 - S_2$  using the field-theoretical method [35]. In the present article we will be interested in investigating zero-temperature critical phenomena of the Heisenberg tetramer spin chain for the particular choice of quantum spin numbers  $S_1 = \frac{1}{2}$  and  $S_2 = \frac{5}{2}$ , whereby the relevant Zeeman term is considered in order to understand the nature of quantum phases induced by the external magnetic field.

To attack the Hamiltonian (1) we implemented the DMRG method [44–46] exploiting the matrix-product states (MPS) ansatz for the representation of the ground-state eigenvector. The main goal of the tensor network methods [47,48] is to construct an efficient representation of the many-body quantum state. The MPS ansatz is the optimal representation for non-critical one-dimensional states [47,48] with the aim to decompose the quantum state of  $N$  sites  $|\Psi\rangle$  into the following form

$$|\Psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N} B^T A_{j_1} \dots A_{j_N} B |j_1, \dots, j_N\rangle \quad (2)$$

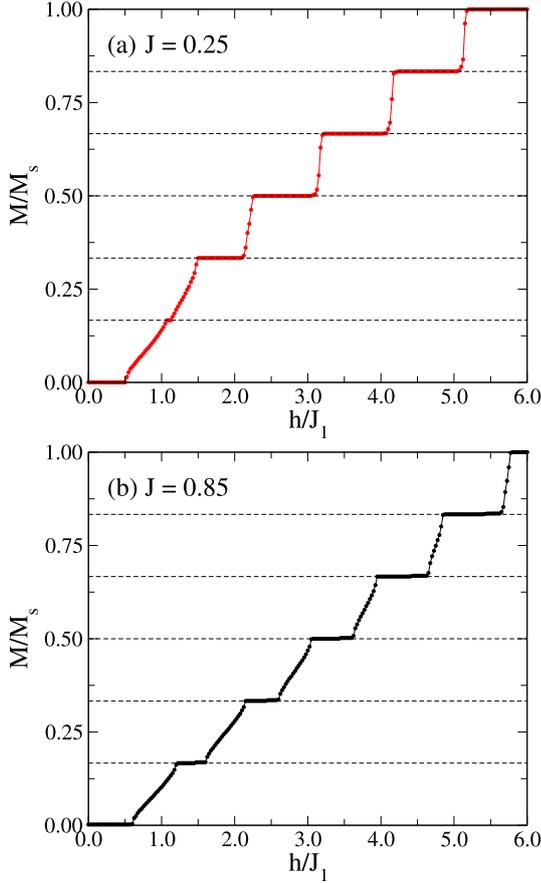


Fig. 2. Zero-temperature magnetization curves of the Heisenberg tetramer chain  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$  for two representative values of the interaction ratio  $J = J_2/J_1$ . A zero-field ground state is in both cases gapped, while gapless spin-liquid phases with a continuously varying magnetization separate the intermediate magnetization plateaus. The intermediate 1/6-plateau is quite narrow for small values of  $J$ .

where  $A_{j_i}$  are square  $\chi \times \chi$  matrices that capture only the  $\chi$  most relevant Schmidt vectors and the index  $j_i$  is the local Hilbert space dimension. The matrices  $B^T$  and  $B$  reflect the choice of boundary conditions. The parameter  $\chi$  is called bond dimension, which selects the most relevant Schmidt eigenvalue in the truncation of the environment tensor and hence, the bond dimension  $\chi$  represents the main parameter determining numerical precision of the method. The calculation method further allows us to write down the ground-state eigenvector in the canonical form, whose interesting properties allow us to proceed with our measurements efficiently [45,47,48]. This approximation is especially efficient for a description of quantum many-body states that obey the so-called area law of the entanglement entropy [18] especially for gapped one-dimensional quantum systems. However, it is worth noticing that the MPS ansatz can also satisfactorily describe the critical quantum state even in the thermodynamic limit and the parameter space where the area law does not hold [49].

We performed our numerical DMRG simulations of the Heisenberg tetramer chain with bond-alternating isotropic interactions described by the Hamiltonian (1) by considering several system sizes up to  $N = 320$  spins under the open boundary conditions. The DMRG algorithm was performed using the iTensor [50] package, which offers an efficient code with a quantum number conservation. The parameters crucially determining the precision of the DMRG method are the bond-dimension  $\chi$  and the number of sweeps. In our DMRG simulations both parameters were chosen following the truncation cutoff criteria  $O(10^{-10})$  and the energy variance in the order of  $O(10^{-7})$ .

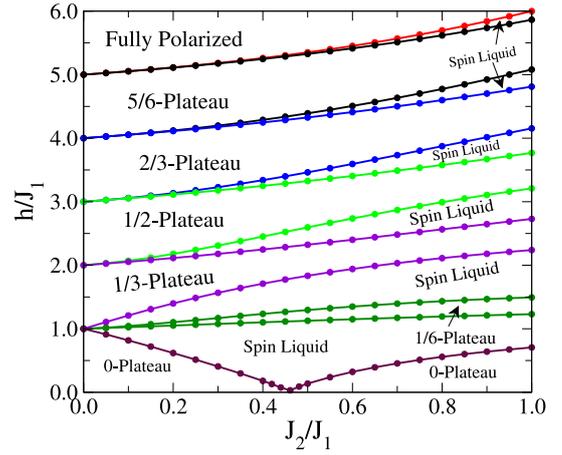
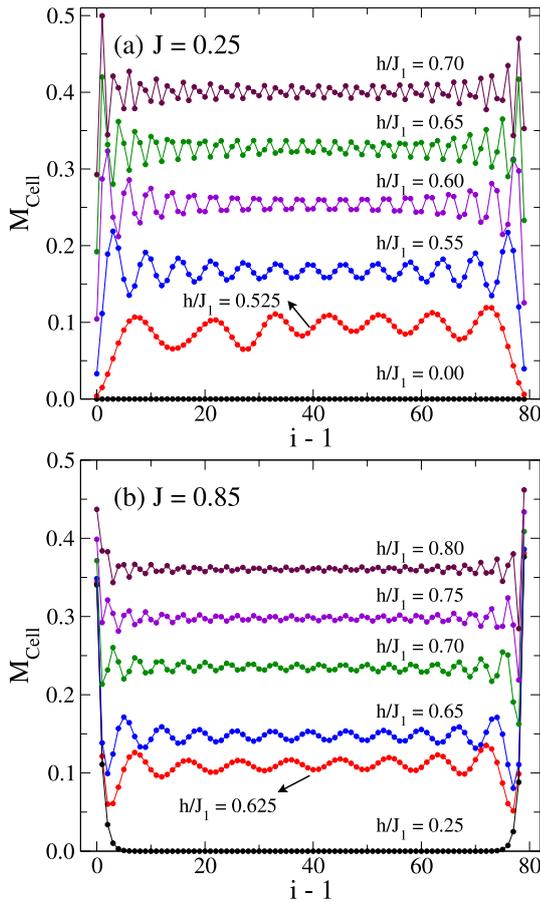


Fig. 3. Ground-state phase diagram of the Heisenberg tetramer chain  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$  with regularly alternating coupling constants. A sequence of the magnetic plateau phases is in agreement with the Oshikawa–Yamanaka–Affleck theorem, whereby all plateau phases are separated by the gapless Tomonaga–Luttinger spin-liquid phases. Notice that the zero magnetization plateau disappears at a zero-field critical point signaling a topological quantum phase transition.

### 3. Magnetic phases and topological characterization

At first, let us examine in detail the zero-temperature magnetization curves in function of  $h/J_1 = g\mu_0 B/J_1$ . Two representative plots of the average cell magnetization normalized with respect to its saturation value are shown in Fig. 2 for two distinct values of the ratio between the coupling constants  $J = J_2/J_1 = 0.25$  and  $0.85$ . Both magnetization curves show similar patterns of intermediate magnetization plateaus accompanied with a zero-magnetization plateau emergent in a low-field region. As the external magnetic field increases, the cell magnetization shows gapless spin-liquid phases with a continuously varying magnetization that separate gapful quantum phases manifested as intermediate magnetization plateaus. It follows from Fig. 2 that the spin-liquid regions span over a wider range of the magnetic fields for the larger values of the interaction ratio. It is noteworthy, moreover, that the cell magnetization at the intermediate magnetization plateaus are in a perfect agreement with the Oshikawa–Yamanaka–Affleck theorem [27]. According to this theorem, magnetization plateaus can have cell magnetization ranging from the minimum possible value  $M_c = 0$  to the maximum full polarization value  $M_c = 2 \times 1/2 + 2 \times 5/2 = 6$  with integer steps.

To build up the full ground-state phase diagram, we computed the zero-temperature magnetization curves for a large set of the interaction ratio in the range  $0 < J < 1$ . The resulting ground-state phase diagram is depicted in Fig. 3. There are a few aspects that deserve special attention. Notice that the 1/6 magnetization plateau only appears for finite values of the interaction ratio. This feature signals that this phase results from correlations of unlike spin units, which are naturally absent for  $J_2 = 0$ . Further, the zero-magnetization plateau vanishes at a certain critical value of the interaction ratio, which indicates that there are two distinct zero-magnetization phases emergent at smaller and higher values of the interaction ratio  $J_c$ . This gap closing transition has been reported in several ferrimagnetic quantum Heisenberg spin chains and relates to a topological quantum phase transition [30–33,35,36]. Here, we would like to comment on how the above qualitative features may change when the unit cell size is increased. Considering, for example, a chain with an alternate sequence of  $S = 1/2$  and  $S = 5/2$  tetramers with a doubled unit cell with saturation magnetization  $M_s = 12$ , a doubled sequence of magnetization plateaus and spin-liquid phases are expected for increasing magnetic fields due to intermediate spin-flip excitations. However, a single zero-field topological phase transition

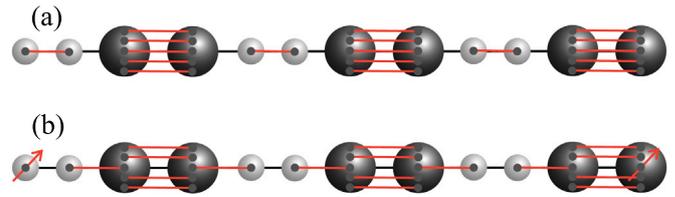


**Fig. 4.** Profiles of the cell magnetization for a series of magnetic-field values and two representative values of the interaction ratio: (a)  $J = 0.25$  with the low-field profile being completely flat and bulk excitations developed at finite fields due to the spin-liquid phase; (b)  $J = 0.85$  with the low-field magnetization profile displaying a finite magnetization at both chain ends (edge states) and similar bulk excitations developed at finite fields due to the spin-liquid phase.

will occur because this is related to the survival or not of unpaired spins at the chain borders.

In order to provide a deeper insight into the distinct topological nature of the two zero-magnetization ground states, we computed the cell magnetization profiles for the two aforementioned values of the interaction ratio. For  $J = 0.25$  the cell magnetization profile is fully flat in the plateau phase as shown in Fig. 4a. When the magnetic field is strong enough to enter the spin-liquid regime, the magnetic excitations are mainly in the bulk, while the border magnetization is being less sensitive to the external field. Only stronger fields are capable of exciting spins from the chain ends. On the other hand, the magnetization profile shows significant edge excitations for  $J = 0.85$  even at weak magnetic fields as it can be seen in Fig. 4b. These edge excitations result from the non-trivial nature of the valence-bond state, which leads to uncoupled effective spins  $1/2$  at the chain ends that are easily oriented even by weak magnetic fields. Entering the spin-liquid phase, bulk excitations are developed and the magnetization profile slowly evolves to a pattern similar to the one depicted at small values of the interaction ratio.

The above aspects distinguishing the two different zero-magnetization phases can be better understood by using the VBS picture within which the larger spin- $5/2$  species are effectively represented by a set of five virtual spins  $1/2$  [14,19]. Both zero-field ground states then dimerize into products of local singlets of different patterns schematically illustrated in Fig. 5. In the topologically trivial quantum

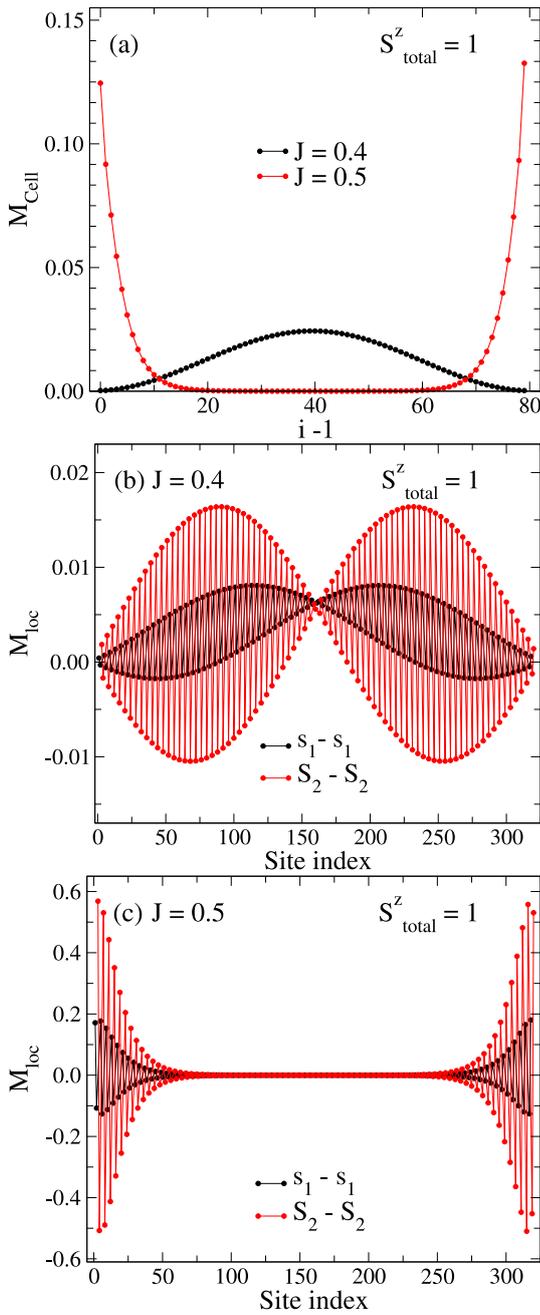


**Fig. 5.** The VBS representation of two gapped phases manifested as zero-magnetization plateau: (a) topologically trivial dimerized phase; (b) topologically nontrivial dimerized phase. Small gray dots denote real or fictitious spin- $1/2$  species, red bonds correspond to the singlet-dimer state and red arrows stand for uncoupled effective spins  $1/2$  being responsible for a topologically nontrivial edge state.

phase emergent at weak inter-dimer coupling the singlet dimers are preferentially formed between the  $s = 1/2$  dimers as well as the  $S = 5/2$  dimers composed from five paired virtual spins  $1/2$ , see Fig. 5(a). Owing to this fact, no boundary spins are left uncoupled and the magnetization profile vanishes at weak fields over the whole chain including both chain ends. In contrast, the real  $s = 1/2$  spins form singlet dimers with virtual spins  $1/2$  when the inter-dimer coupling constant becomes sufficiently strong. This leads to a real decoupled spin at one chain end and an uncoupled virtual spin at the other chain end, see Fig. 5(b). These uncoupled spins are easily oriented by a weak magnetic field, which provides a non-null magnetization at both chain edges at weak fields.

Additional features discriminating the two topologically distinct zero-magnetization phases can be extracted from the magnetization profiles pertinent to excited magnetization sectors. Let us start by exploring how a triplet magnetic excitation arising from the sector with  $S^z = 1$  is distributed along the chain. For this purpose, we choose two different values of the interaction ratio  $J = 0.4$  and  $J = 0.5$ , which are slightly below and above the topological phase transition, respectively. The corresponding profiles of the average cell magnetization are shown in Fig. 6a. These results clearly imply that the triplet magnetic excitation is concentrated in the bulk for small values of the coupling ratio, whereas it is displaced to the chain ends at stronger values of the coupling ratio. A more detailed picture of the magnetization distribution can be seen in Figs. 6b and 6c where the full magnetization profile of all local magnetizations is plotted for the  $S^z = 1$  sector. In the trivial topological phase predominating at small values of the interaction ratio (Fig. 6b), the full magnetization profile has a butterfly-like structure with a finite cell magnetization reflecting the antiferromagnetic local ordering at the chain center, which is gradually suppressed when moving towards both chain ends where the cell magnetization vanishes. In the topologically non-trivial phase, the local antiferromagnetic order is totally absent in the bulk and it develops only near the chain ends due to the pronounced edge states (Fig. 6c).

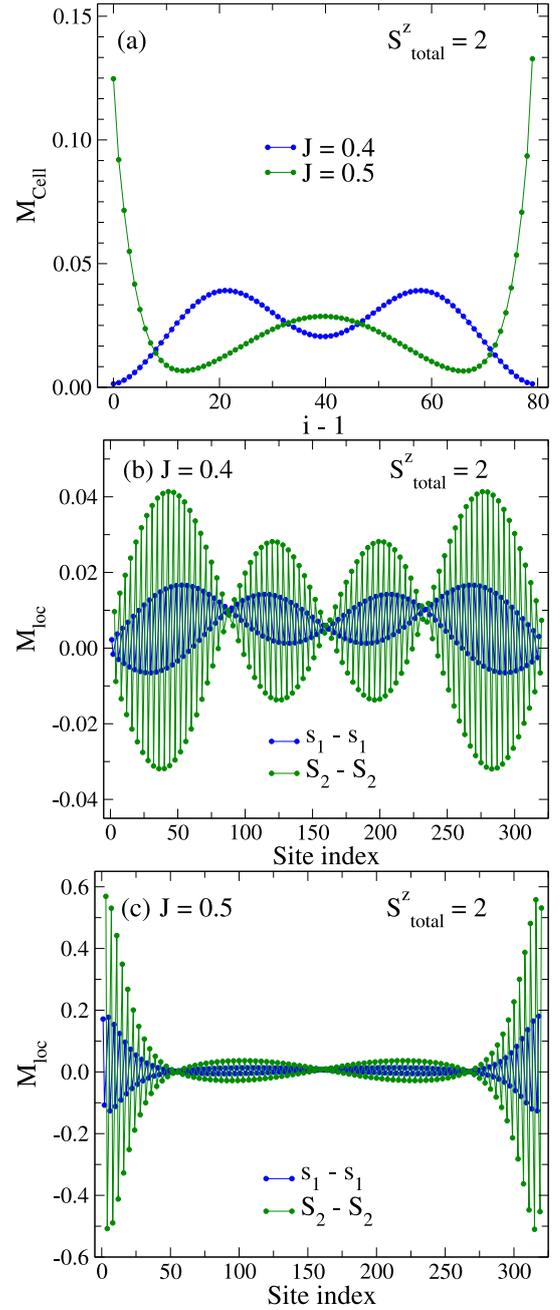
To conclude the analysis of the magnetization profiles in the two topological phases we also explored distribution of the local magnetization within the quintet sector  $S^z = 2$  with two-spin excitation above the singlet ground state. The cell magnetization profiles shown in Fig. 7a unveil that the quintet excitation is within the topologically trivial phase still concentrated at the chain center even if there is some superposition with excitations moving towards two opposite chain ends. In the topologically non-trivial phase, one finds except the vigorous edge excitations at both chain ends also the spin excitation driven towards the chain center. It could be thus concluded that the full magnetization profile develops a double butterfly structure in the trivial phase (see Fig. 7b), while that one in the topologically non-trivial phase has a mixed character with a pronounced distribution over both edges and a somewhat more subtle distribution in the bulk (see Fig. 7c).



**Fig. 6.** Magnetization profiles in the magnetization sector  $S^z = 1$  for  $J = 0.4$  (below the critical point) and  $J = 0.5$  (above the critical point): (a) Average cell magnetization shows that it is mainly concentrated near the chain center in the trivial phase ( $J = 0.4$ ), whereas it appears mainly near the chain ends in the non-trivial phase ( $J = 0.5$ ); (b) Full magnetization profile in the trivial phase showing the resulting butterfly distribution developed from bulk excitations in combination with the local antiferromagnetic ordering; (c) Full magnetization profile in the non-trivial phase showing the antiferromagnetic ordering and excitation concentrated near the chain edges.

#### 4. Finite-size scaling of topological quantum phase transition

In this section we will perform a finite-size scaling analysis to precisely locate the quantum critical point of the aforescribed topological phase transition and to characterize its universal features. This transition is characterized by a spin-gap closing emergent at the critical

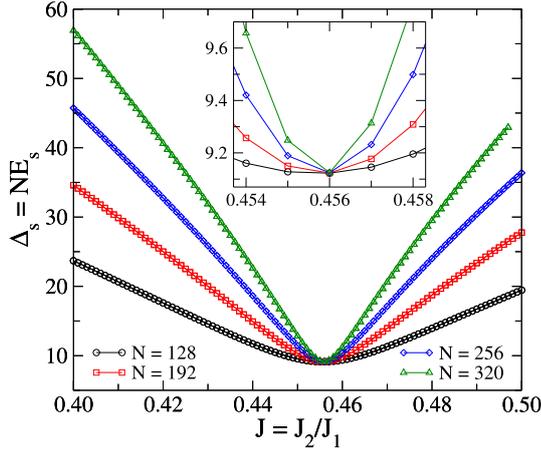


**Fig. 7.** Magnetization profiles in the magnetization sector  $S^z = 2$  for  $J = 0.4$  (below the critical point) and  $J = 0.5$  (above the critical point): (a) Average cell magnetization shows that the two-spin excitation is located at both chain edges with some superposition near the chain center; (b) Full magnetization profile in the trivial phase displaying the resulting double butterfly distribution of the local magnetization; (c) Full magnetization profile in the non-trivial phase shows that the second-excitation provides a subtle local magnetization in the bulk as well.

point. The spin gap  $E_s$  is defined by the energy difference

$$E_s = E_1(1, N) - E_0(0, N), \quad (3)$$

where  $E_0(M, N)$  denotes an energy of the lowest-energy eigenstate of the chain with  $N$  spins in the sector with the total magnetization  $M$  and similarly  $E_1(M, N)$  is the energy of the first excited state of the chain with  $N$  spins in the magnetization sector  $M$ . It is important to consider the first excited state in the magnetization sector  $M = 1$  when computing the spin gap for the open boundary condition, because the lowest-energy eigenstates in the singlet and triplet sectors are



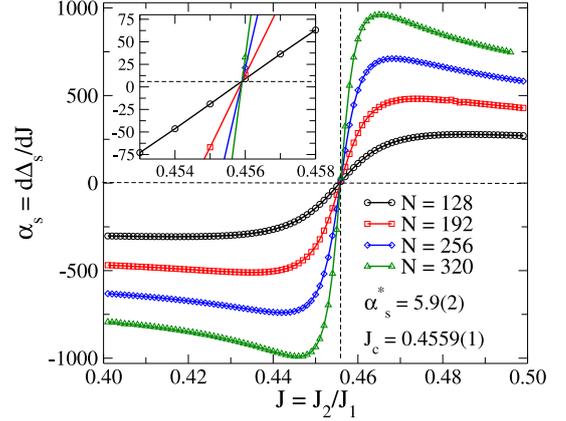
**Fig. 8.** The scaled spin gap  $\Delta_s = NE_s$  versus the interaction ratio  $J = J_2/J_1$  for the mixed-spin Heisenberg tetramer chain with the alternating spins  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$ . The numerical data were obtained from DMRG calculations of the finite chain with  $N$  spins under the open boundary condition. All curves touch tangentially at the quantum critical point of the gap-closing transition. Inset shows a detail of the critical region evidencing the finite slope at the touching point.

degenerate due to four-fold degeneracy stemming from  $s = \frac{1}{2}$  edge modes [3]. The spin gap is finite in both zero-magnetization phases, whereas it closes at the quantum critical point with increasing chain sizes as  $1/N$ . The scaled spin gap  $\Delta_s = NE_s$  thus diverges in the thermodynamic limit in both phases, while it remains finite at the quantum critical point. The curves of the scaled spin gap are plotted in Fig. 8 as a function of the interaction ratio  $J$ . It is evident from this figure that all curves touch tangentially at the quantum critical point, which can be attributed to the topological phase transition.

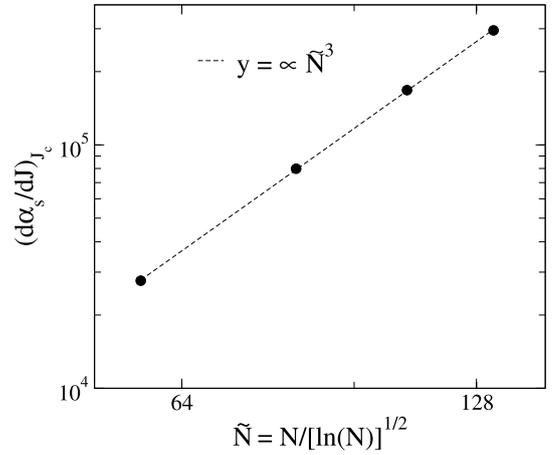
It is worthwhile to remark that the similar gap-closing transition takes place also in the antiferromagnetic spin-1/2 Heisenberg bond alternating chain. This gap-closing transition has been shown to belong to the universality class of the 2D Ashkin-Teller model at its bifurcation point [51] that exhibits a logarithmic correction to the power-law scaling of the typical correlation length, which is predicted to diverge as  $\xi \propto |\delta|^{-\nu} / \sqrt{\ln|\delta|}$  with  $\nu = 2/3$  and  $\delta$  being the distance to the quantum critical point [in the present case  $\delta = (J - J_c)$ ]. Correspondingly, the finite-size scaling form of the scaled spin gap has a non-singular linear part due to the tangential behavior with the effective chain size exhibiting a logarithmic correction  $\tilde{N} = N / \sqrt{\ln N}$ . Therefore, the linear part has to be splitted from the scaling function. There is no scaling argument supporting the slope at criticality shall be null. Actually, finite slope of energy gap curves at the critical point has been reported since the early studies of quantum spin chains presenting a Gaussian gap closing transition [52]. Its value has to be extracted from a proper finite-size scaling analysis. The scaled spin gap should consequently follow in a vicinity of the quantum phase transition the formula:

$$\Delta_s = \delta \alpha_s^* + g[\delta \tilde{N}^{1/\nu}]. \quad (4)$$

The scaling function  $g[x = \delta \tilde{N}^{1/\nu}]$  is quadratic at  $x \rightarrow 0$  and diverges as  $x \rightarrow \pm\infty$ . To precisely locate the quantum critical point one can simply plot the scaled spin-gap derivative  $\alpha_s = d\Delta_s/dJ$  as a function of  $J$ , because this derivative is scale invariant at the quantum critical point. In Fig. 9 we plotted the scaled spin-gap derivative  $\alpha_s$  as a function of  $J$  as obtained from the DMRG data reported in Fig. 8. The scale invariant point provides the locus of quantum critical point  $J_c = 0.4559(1)$  and the critical derivative  $\alpha_s^* = 5.9(2)$ . To check the predicted value of the critical exponent for the correlation length, one can explore the above scaling form implying that the second derivative of the scaled spin gap behaves as  $d\alpha_s/dJ|_{J_c} \propto \tilde{N}^{2/\nu}$ . The above scaling illustrated in Fig. 10 is clearly consistent with  $\nu = 2/3$  attributable to



**Fig. 9.** The scaled spin-gap slope  $\alpha_s = d\Delta_s/dJ$  as a function of the interaction ratio. The common point locates the topological quantum phase transition with the locus  $J_c = 0.4559(1)$  and  $\alpha_s^* = 5.9(2)$ . Inset shows a detail of the crossing point.



**Fig. 10.** Second derivative of the scaled gap versus  $\tilde{N} = N / \sqrt{\ln N}$ . The straight line corresponds to  $d\alpha_s/dJ|_{J_c} \propto \tilde{N}^{2/\nu}$  with  $\nu = 2/3$ .

the SU(2) Wess–Zumino–Witten universality class. The accuracy of the above scaling law can be demonstrated by plotting the scaled spin-gap data in a collapsed form. This is done in Fig. 11 where one detects a striking data collapse, which evidences the accuracy of the estimated quantum critical point and the relevant scaling behavior.

## 5. Summary and concluding remarks

In summary, we studied the ground-state properties of a quantum Heisenberg tetramer chain with regularly alternating spins  $\frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{5}{2} - \frac{5}{2}$ , which mimics the underlying magnetic structure of a novel quantum ferrimagnetic material  $\text{Cu}_2\text{Fe}_2\text{Ge}_4\text{O}_{13}$ . The unit cell of the investigated quantum spin chain is composed of two regularly alternating spin dimers with  $s = 1/2$  and  $S = 5/2$ , respectively. For simplicity, only two different isotropic exchange interactions were considered between the identical spin species (the intra-dimer coupling constant  $J_1$ ) and dissimilar spin species (the inter-dimer coupling constant  $J_2$ ). DMRG calculations using the MPS ansatz were employed to obtain the eigenstates and respective eigenvalues of the resulting many-body Hamiltonian.

We showed that the zero-temperature magnetization curves exhibit a sequence of gapless spin-liquid phases with continuously varying magnetization regularly alternating with the gapful phases corresponding to intermediate magnetization plateaus with constant magnetization. It has been shown that the zero-magnetization plateau closes at

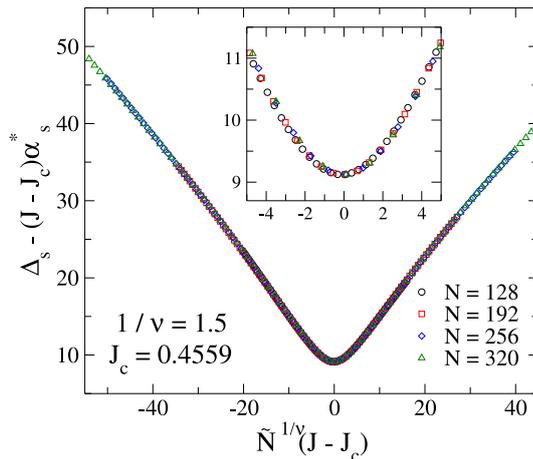


Fig. 11. The data collapse of the scaled spin gap. All data fall into a single curve corresponding to the scaling function  $g(x)$ . The inset shows a detail near the critical point. Notice that the scaling function is parabolic around the critical point because the non-singular linear term is subtracted from the energy-gap curves.

a certain critical value of the interaction ratio. This gap-closing phase transition has a topological nature, which can be better understood within the VBS representation when the spin-5/2 species are effectively considered as a set of five fictitious 1/2 spins. In the topologically trivial phase occurring for relatively weak inter-dimer coupling the spin-singlet states develop separately within the spin-1/2 dimers as well as the spin-5/2 dimers. This results in a flat zero-magnetization profile, whereby the magnetic excitations are predominantly formed in the bulk and are totally absent at the chain edges. In opposite to this, the singlet-dimer state is formed between the smaller spin  $s = 1/2$  and one out of five effective spins 1/2 constituting the larger spin  $S = 5/2$  when the inter-dimer coupling constant becomes sufficiently strong. Within this topologically non-trivial phase, free edge spins are naturally left at both chains ends, which are consequently easily polarized by an external magnetic field.

In the vicinity of the zero-field topological phase transition we explored the scaling behavior in order to accurately locate the quantum critical point and to unveil the critical exponent of correlation length. Our scaling analysis was based on the tangential finite-size scaling of the scaled spin gap. It has been verified that the topological phase transition belongs to the SU(2) Wess–Zumino–Witten universality class, which was previously reported for the gap-closing transition of the antiferromagnetic spin-1/2 Heisenberg bond alternating chain. The finite-size scaling behavior has a special logarithmic correction, which was incorporated into the relevant scaling law by introducing a corrected chain length  $\tilde{N} = N/\sqrt{N}$ . The correlation length was shown to scale as  $\xi \propto \tilde{N}^{1/\nu}$  with  $\nu = 2/3$ . The accurate estimate of the critical value of the interaction ratio  $J_c = J_2/J_1 = 0.4559(1)$  was also found.

The above tangential finite-size scaling behavior with a logarithmic correction is expected to hold universally for the gap-closing zero-field quantum phase transition, which may generally occur in a wide class of ferrimagnetic quantum Heisenberg spin chains including the spin-chain models with distinct spin units [53–55], tetrahedral chains [24, 56,57], spin ladders [58–60] or other one-dimensional models with more complex unit-cell structure. Future works along these lines would be valuable to discriminate the relevant and irrelevant parameters of this special universality class.

#### CRediT authorship contribution statement

**Luan M. Veríssimo:** Conceptualization, Methodology, Software, Formal analysis, Writing – original draft. **Maria S.S. Pereira:** Conceptualization, Formal analysis, Writing – review & editing, Visualization.

**Jozef Strečka:** Conceptualization, Formal analysis, Writing – review & editing. **Marcelo L. Lyra:** Supervision, Conceptualization, Formal analysis, Writing – review & editing.

#### Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

#### Data availability

Data will be made available on request.

#### Acknowledgments

This work was supported by CAPES, Brazil (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), CNPq, Brazil (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), and FAPEAL, Brazil (Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Alagoas). J.S. acknowledges the financial support under the grant Nos. VEGA 1/0105/20 and APVV-20-0150.

#### References

- [1] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*, Clarendon Press, Oxford, 2003.
- [2] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press, Cambridge, 2011.
- [3] H. Tasaki, *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems*, Springer Nature, Switzerland AG, 2020.
- [4] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag, New York, 1994.
- [5] X.-G. Wen, Colloquium: Zoo of quantum-topological phases of matter, *Rev. Mod. Phys.* 89 (2017) 041004.
- [6] F.D.M. Haldane, Nobel lecture: Topological quantum matter, *Rev. Mod. Phys.* 89 (2017) 040502.
- [7] M.Z. Hasan, C.L. Kane, Colloquium: Topological insulators, *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010) 3045.
- [8] X.-L. Qi, S.-C. Zhang, *Topological insulators and superconductors*, *Rev. Mod. Phys.* 83 (2011) 1057.
- [9] R. Moessner, J.E. Moore, *Topological Phases of Matter*, Cambridge University Press, Cambridge, 2021.
- [10] F.D.M. Haldane, Nonlinear field theory of large-spin heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state, *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983) 1153.
- [11] F.D.M. Haldane, Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the O(3) nonlinear sigma model, *Phys. Lett. A* 93 (1983) 1153.
- [12] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb, H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* 59 (1987) 799.
- [13] I. Affleck, Quantum spin chains and the Haldane gap, *J. Phys.: Condens. Matter* 1 (1989) 3047.
- [14] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb, H. Tasaki, Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets, *Commun. Math. Phys.* 115 (1988) 477.
- [15] X. Chen, Z.-C. Gu, X.-G. Wen, Complete classification of one-dimensional gapped quantum phases in interacting spin systems, *Phys. Rev. B* 84 (2011) 234128.
- [16] F. Pollmann, E. Berg, A.M. Turner, M. Oshikawa, Symmetry protection of topological phases in one-dimensional quantum spin systems, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 075125.
- [17] N. Laflorencie, Quantum entanglement in condensed matter systems, *Phys. Rep.* 646 (2016) 1.
- [18] J. Eisert, M. Cramer, M.B. Plenio, Colloquium: Area laws for the entanglement entropy, *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010) 277.
- [19] K.R. M. den Nijs, Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 4709.
- [20] H. Li, F.D.M. Haldane, Entanglement spectrum as a generalization of entanglement entropy: Identification of topological order in non-Abelian fractional quantum hall effect states, *Phys. Rev. Lett.* 101 (2008) 010504.
- [21] F. Pollmann, A.M. Turner, Detection of symmetry-protected topological phases in one dimension, *Phys. Rev. B* 86 (2012) 125441.
- [22] R.R. Montenegro-Filho, F.S. Matias, M.D. Coutinho-Filho, Topology of many-body edge and extended quantum states in an open spin chain: 1/3 plateau, Kosterlitz-Thouless transition, and Luttinger liquid, *Phys. Rev. B* 102 (2020) 035137.

- [23] W.M. da Silva, R.R. Montenegro-Filho, Role of density-dependent magnon hopping and magnon-magnon repulsion in ferrimagnetic spin-(1/2, S) chains in a magnetic field, *Phys. Rev. B* 103 (2021) 054432.
- [24] M. Fujihala, T. Sugimoto, T. Tohyama, S. Mitsuda, R.A. Mole, D.H. Yu, S. Yano, Y. Inagaki, H. Morodomi, T. Kawae, H. Sagayama, R. Kumai, Y. Murakami, K. Tomiyasu, A. Matsuo, K. Kindo, Cluster-based Haldane state in an edge-shared tetrahedral spin-cluster chain: Fedotovite  $K_2Cu_3O(SO_4)_3$ , *Phys. Rev. Lett.* 120 (2018) 077201.
- [25] T. Sugimoto, K. Morita, T. Tohyama, Cluster-based Haldane states in spin-1/2 cluster chains, *Phys. Rev. Res.* 2 (2020) 023420.
- [26] K. Karl'ová, J. Strečka, T. Verkholyak, Cluster-based haldane phases, bound magnon crystals and quantum spin liquids of a mixed spin-1 and spin-1/2 Heisenberg octahedral chain, *Phys. Rev. B* 100 (2019) 094405.
- [27] M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, Magnetization plateaus in spin chains: "Haldane gap" for half-integer spins, *Phys. Rev. Lett.* 78 (1997).
- [28] L.M. Veríssimo, M.S.S. Pereira, J. Strečka, M.L. Lyra, Kosterlitz-thouless and Gaussian criticalities in a mixed spin-(1/2, 5/2, 1/2) Heisenberg branched chain with exchange anisotropy, *Phys. Rev. B* 99 (2019) 134408.
- [29] F. Souza, L.M. Veríssimo, J. Strečka, M.L. Lyra, M.S.S. Pereira, Exact and density matrix renormalization group studies of two mixed spin-(1/2, 5/2, 1/2) branched-chain models developed for a heterotrimetallic Fe-Mn-Cu coordination polymer, *Phys. Rev. B* 102 (2020) 064414.
- [30] Z. Xu, J. Dai, H. Ying, B. Zheng, Successive valence-bond-state transitions in quantum mixed spin chains, *Phys. Rev. B* 67 (2003) 214426.
- [31] S. Yang, J.-B. Xu, Quantum phase transition of a quantum mixed spin chain by employing density matrix renormalization group method, *Annalen der Physik* 533 (2021) 2100011.
- [32] S.-B. Li, Z.-X. Xu, J.-H. Dai, J.-B. Xu, Entanglement and quantum phase transitions in quantum mixed spin chains, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 184411.
- [33] M. Nakamura, S. Todo, Order parameter to characterize valence-bond-solid states in quantum spin chains, *Phys. Rev. Lett.* 89 (2002) 077204.
- [34] M. Nakamura, J. Voit, Lattice twist operators and vertex operators in sine-Gordon theory in one dimension, *Phys. Rev. B* 65 (2002) 153110.
- [35] K. Takano, Phase diagrams of mixed-spin chains with period 4 using the nonlinear  $\sigma$  model, *Phys. Rev. B* 611 (2000) 8863.
- [36] W.-X. Chen, J. Ren, W.-L. You, X. Hao, Y.-Z. Wu, Phase diagram of the spin-1/2 heisenberg alternating chain in a magnetic field, *Commun. Theor. Phys.* 71 (2019) 1029.
- [37] K.O. A. Kitazawa, Phase diagram of  $S = 1$  bond-alternating XXZ chains, *Phys. Rev. Lett.* 76 (1996) 4038.
- [38] K. Totsuka, Y. Nishiyama, N. Hatano, M. Suzuki, Isotropic spin-1 chains with bond alternation: analytic and numerical studies, *J. Phys.: Condens. Matter* 7 (1995) 4895.
- [39] T. Masuda, A. Zheludev, B. Grenier, S. Imai, K. Uchinokura, E. Ressouche, S. Park, Cooperative ordering of gapped and gapless spin networks in  $Cu_2Fe_2Ge_4O_{13}$ , *Phys. Rev. Lett.* 93 (2003) 077202.
- [40] T. Masuda, K. Kakurai, M. Matsuda, K. Kaneko, N. Metoki, Indirect magnetic interaction mediated by a spin dimer in  $Cu_2Fe_2Ge_4O_{13}$ , *Phys. Rev. B* 75 (2007) 220401(R).
- [41] T. Masuda, A. Zheludev, B. Sales, S. Imai, K. Uchinokura, S. Park, Magnetic excitations in the weakly coupled spin dimers and chains material  $Cu_2Fe_2Ge_4O_{13}$ , *Phys. Rev. B* 72 (2005) 094434.
- [42] L.M. Veríssimo, M.S.S. Pereira, M.L. Lyra, Tangential finite-size scaling at the Gaussian topological transition in the quantum spin-1 anisotropic chain, *Phys. Rev. B* 104 (2021) 024409.
- [43] G. Spronken, B. Fourcade, Y. Lépine, Finite-size study of the one-dimensional spin-(1/2) dimerized Heisenberg chain, *Phys. Rev. B* 33 (1986).
- [44] U. Schollwöck, The density-matrix renormalization group, *Rev. Mod. Phys.* 77 (2005).
- [45] U. Schollwöck, The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states, *Ann. Phys.* 326 (2011) 96.
- [46] S.R. White, Density matrix formulation for quantum renormalization groups, *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992) 2863.
- [47] R. Orús, A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states, *Ann. Phys.* 349 (2014).
- [48] R. Orús, Tensor networks for complex quantum systems, *Nat. Rev. Phys.* 1 (2019) 538.
- [49] L. Tragliacozzo, T.R. de Oliveira, S. Iblisdir, J.I. Latorre, Scaling of entanglement support for matrix product states, *Phys. Rev. B* 78 (2008) 024410.
- [50] M. Fishman, S.R. White, E.M. Stoudenmire, The itensor software library for tensor network calculations, 2021, arXiv:2007.14822.
- [51] M. Kohmoto, M. den Nijs, L.P. Kadanoff, Hamiltonian studies of the  $d = 2$  Ashkin-Teller model, *Phys. Rev. B* 24 (1981) 5229.
- [52] A. Kitazawa, Twisted boundary conditions of quantum spin chains near the Gaussian fixed points, *J. Phys. A: Math. Gen.* 30 (1997).
- [53] K. Hida, K. Takano, H. Suzuki, Quantum phase transitions in alternating-bond mixed diamond chains with spins 1 and 1/2, *J. Phys. Soc. Jpn.* 79 (2010) 044702.
- [54] K. Hida, K. Takano, Frustration-induced quantum phases in mixed spin chain with frustrated side chains, *Phys. Rev. B* 24 (1981) 5229.
- [55] T. Tonegawa, T. Hikihara, M. Kaburagi, T. Nishino, S. Miyashita, H.-J. Mikeska, Ground-state and thermodynamic properties of the quantum mixed spin-1/2-1/2-1-1 chain, *J. Phys. Soc. Jpn.* 67 (1998) 1000.
- [56] W. Brenig, K.W. Becker, Magnetism of a tetrahedral cluster spin chain, *Phys. Rev. B* 64 (2001) 214413.
- [57] J. Strečka, O. Rojas, T. Verkholyak, M.L. Lyra, Magnetization process, bipartite entanglement, and enhanced magnetocaloric effect of the exactly solved spin-1/2 Ising-Heisenberg tetrahedral chain, *Phys. Rev. E* 89 (2014) 0221143.
- [58] D.C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, Magnetization plateaus in  $N$ -leg spin ladders, *Phys. Rev. B* 58 (1998) 6241.
- [59] P. Bouillot, C. Kollath, A.M. Läuchli, M. Zvonarev, B. Thielemann, C. Rüegg, E. Orignac, R. Citro, M. Klanjšek, C. Berthier, M. Horvatić, T. Giamarchi, Statics and dynamics of weakly coupled antiferromagnetic spin- $\frac{1}{2}$  ladders in a magnetic field, *Phys. Rev. B* 83 (2011) 054407.
- [60] T. Vekua, A. Honecker, Quantum dimer phases in a frustrated spin ladder: Effective field theory approach and exact diagonalization, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 2144427.

**Dissipative symmetry-protected topological order**Luan M. Veríssimo <sup>1,2</sup>, Marcelo L. Lyra <sup>1</sup>, and Román Orús <sup>2,3,4</sup><sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas 57072-900 Maceió - AL, Brazil*<sup>2</sup>*Donostia International Physics Center, Paseo Manuel de Lardizabal 4, E-20018 San Sebastián, Spain*<sup>3</sup>*Multiverse Computing, Paseo de Miramón 170, E-20014 San Sebastián, Spain*<sup>4</sup>*Ikerbasque Foundation for Science, Maria Diaz de Haro 3, E-48013 Bilbao, Spain*

(Received 19 February 2023; accepted 6 June 2023; published 20 June 2023)

In this work, we investigate the interplay between dissipation and symmetry-protected topological order. We considered the one-dimensional spin-1 Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki model interacting with an environment where the dissipative dynamics are described by the Lindbladian master equation. The Markovian dynamics is solved by the implementation of a tensor network algorithm for mixed states in the thermodynamic limit. We observe that, for time-reversal symmetric dissipation, the resulting steady state has topological signatures even if being a mixed state. This is seen in finite string-order parameters as well as in the degeneracy pattern of singular values in the tensor network decomposition of the reduced density matrix. We also show that such features do not appear for nonsymmetric dissipation. Our work opens the way toward a generalized and more practical definition of symmetry-protected topological order for mixed states induced by dissipation.

DOI: [10.1103/PhysRevB.107.L241104](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.L241104)

*Introduction.* Topological phases of matter [1,2] are distinct quantum phases with short-range entanglement and signature patterns in entanglement spectrum [3]. Some of such phases are also protected by existing symmetries in the system, thus being called symmetry-protected topological (SPT) phases. An archetypal example is the 1D Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) model [4], where  $Z_2 \otimes Z_2$  and time-reversal symmetries protect the structure of entanglement giving rise to nonzero string-order parameters [5], spin-1/2 edge modes [3], and topological degeneracy of the entanglement spectrum [6], which survive under the action of symmetry-preserving perturbations [7,8]. The presence of edge modes prevents such topological phases from being continuously deformed into a topologically trivial phase without going through a quantum phase transition, where the edge modes penetrate the bulk and the energy gap of the system closes.

An important problem that has gained attention in recent years is how to effectively combine topological order and dissipation [9–12]. This is due to the emerging huge potential of dissipative effects in quantum computing [12,13] and material science [14,15]. Recently, a definition of topological phases of matter for mixedstate was proposed [16] in the light of fast dissipative evolution with local and time-independent symmetric Lindbladians. With that definition, the authors demonstrate that SPT order is destroyed under dissipation. Another recent work [17] introduces the conditions to preserve the SPT order under specific types of dissipations. The so-called strong symmetry condition for dissipative dynamics is satisfied when the local jump operators commute with the operators composing the projective representation of the symmetry group of interest and also with the Hamiltonian of the system. This condition guarantees the preservation of the string order for SPT under dissipation satisfying the strong symmetry condition [17].

In this work, we address the interplay between dissipation and SPT order from a different angle. In particular, we consider the action of symmetric dissipation on a 1d SPT phase and evaluate it in terms of mathematical quantities such as the degeneracy of the Schmidt coefficients of the tensor network representation of the mixed state. In the case of pure states, such Schmidt coefficients relate directly to the entanglement spectrum of the state. In mixed states, however, such coefficients do not have such a straightforward physical interpretation, but as we shall see, also offer a valid mathematical tool to assess long-range patterns of correlations (classical and quantum) in the mixed state.

In particular, we consider the 1D AKLT model interacting with an environment, where the Markovian dynamics is given by the Lindblad master equation. The dissipation operators are chosen in order to preserve (symmetric) or break (nonsymmetric) time-reversal symmetry. We show, via numerical tensor network simulations, how these two cases lead to steady states with very different properties in terms of long-range correlations and other typical signatures of SPT order.

*Model and method.* In order to investigate the effects of symmetric and nonsymmetric dissipation on SPT order, we considered an interacting quantum spin model given by the Spin-1 AKLT Hamiltonian,

$$H = \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2, \quad (1)$$

where  $\vec{S}$  represents the three-component spin-1 operator  $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$ , for an infinite chain with open boundary conditions. The above Hamiltonian has  $SU(2)$  symmetry, and the ground state is given by the so-called AKLT state. Such order has a structure of entanglement protected by  $Z_2 \otimes Z_2$  symmetry [4,18], and defines a topological Haldane phase.

Our strategy here is to couple the AKLT model to an environment, time-evolve the new physical system until reaching the steady state, and assess the signatures of topological order. The dissipative evolution follows a master equation of the type

$$\dot{\rho} = \mathcal{L}[\rho] = -i[H, \rho] + \gamma \sum_{\mu} \left( L_{\mu} \rho L_{\mu}^{\dagger} - \frac{1}{2} \{L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu}, \rho\} \right), \quad (2)$$

where  $\rho$  is the density matrix of the system,  $H$  the Hamiltonian of the model,  $\gamma$  the coupling between the quantum system and the environment, and the pair  $\{L_{\mu}, L_{\mu}^{\dagger}\}$  are Lindblad jump operators. We will focus on different local choices of operators  $L_{\mu}$ , either preserving symmetries or not, and their effect on SPT order in the resulting steady state.

In order to study the dissipation effects on the steady states, we compute quantities such as the string order parameter  $\mathcal{O}_S^{\alpha}$ ,

$$\mathcal{O}_S^{\alpha} = \lim_{|r| \rightarrow \infty} \langle S_i^{\alpha} e^{i\pi \sum_{i=1}^{j-1} S_i^{\alpha}} S_j^{\alpha} \rangle, \quad (3)$$

with  $S^{\alpha}$  the  $\alpha$  component of spin variable ( $\alpha = x, y, z$ ) and  $r = i - j$ . In addition, the entanglement spectrum [6,8] and its degeneracy are also important indicators of 1D SPT phases. In the nondissipative case, this can be assessed by checking the degeneracy of the Schmidt values in a Matrix Product State (MPS) decomposition of the pure state, or equivalently, the degeneracy of the entanglement energies  $\xi_{\alpha} \equiv -2 \log(\lambda_{\alpha})$ , with  $\lambda_{\alpha}$  the Schmidt coefficients of sequential Schmidt decompositions of the MPS. In the case of pure states, such Schmidt coefficients have a clear interpretation in terms of the eigenvalues of the reduced density matrix of half an infinite system and are therefore directly related to the quantum entanglement present in the pure state. However, in the dissipative case, the situation is slightly different. As we shall see, we shall represent the mixed state of the system using a Matrix Product Operator (MPO). Such MPO also admits a representation in terms of sequential singular value decompositions (equivalent to the Schmidt decompositions in the case of pure states), which in fact is nothing but the canonical form of the 1D tensor network [19], see Fig. 1. The corresponding Schmidt coefficients in the dissipative case do *not* represent formally the quantum entanglement in the system since classical and quantum correlations are intertwined in this case. But we can say, however, that they represent the relevant correlation parameters of the MPO tensor network, even if their physical interpretation is not so straightforward as in the pure state case. We will see in what follows that the degeneracy patterns of these dissipative Schmidt coefficients are also relevant to assess possible signatures of long-range correlations in mixed states.

We have performed numerical calculations using tensor network methods, which we now briefly describe. In recent years, we have witnessed a fast development of tensor networks [20–22] for simulations of quantum many-body systems. Methods such as *time-evolving block decimation* (TEBD) [19,23,24] and *density matrix renormalization group* (DMRG) [21,25] allow exploration of ground state properties of 1D systems using MPS representations of quantum states, even in the thermodynamic limit. Extensions of tensor network methods for open quantum systems have recently been

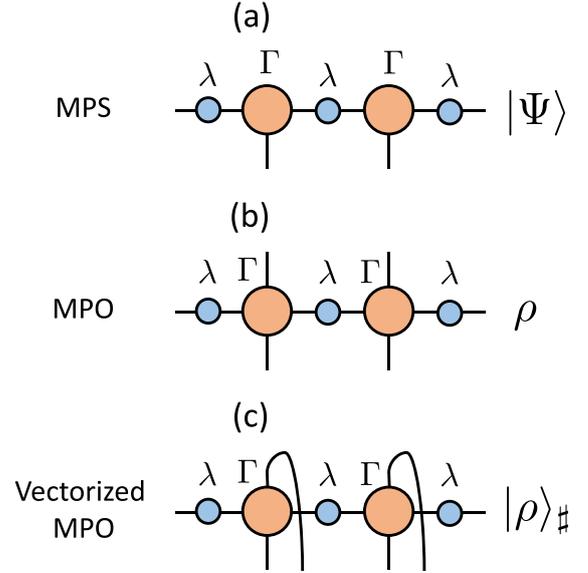


FIG. 1. Tensor network diagrams for a 1D system with a 1-site unit cell: (a) MPS for a pure state  $|\Psi\rangle$ , (b) MPO for a mixed state  $\rho$ , and (c) vectorized MPO (following Choi's isomorphism) for vectorized mixed state  $|\rho\rangle_{\sharp}$ . In the diagrams, shapes represent tensors, and lines represent indices in the tensors. Lines from one shape to another represent contracted common indices between tensors. The diagonal  $\lambda$  tensors correspond to the (real and positive) Schmidt coefficients of sequential bipartitions of the tensor network and are the ones associated with the spectrum  $\xi_{\alpha} = -2 \log(\lambda_{\alpha})$ , which amounts to the entanglement spectrum in the pure-state case represented in (a).

presented [26,27]. People have introduced relevant concepts, such as matrix product operators (MPO), extending the notion of MPS from pure states to mixed states in the case of 1D systems. Along these lines, the primordial work of Zwolak and Vidal [28] extended the TEBD algorithm to effectively simulate the dynamics of mixed states, by solving the Lindblad master equation in vectorized form. This method was also recently implemented for two-dimensional systems [29] with success. Additionally, other recent strategies [30] propose variational methods as well hybrid algorithms combining real and imaginary time for Lindblad evolutions [31] in order to find dissipative steady states.

In this work, we implement the technique proposed by Zwolak and Vidal [28] based on MPOs, in the thermodynamic limit. The method allows us to simulate the time evolution driven by the master equation, and to evaluate the properties of the steady state. The algorithm consists of using, essentially, the TEBD algorithm for real-time simulation of Markovian dynamics, representing the mixed state  $\rho$  as a pure state  $|\rho\rangle_{\sharp}$  via Choi isomorphism  $\rho = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \rightarrow |\rho\rangle_{\sharp} = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \otimes |\Psi_i\rangle$ , see Fig. 1. We can then obtain the vectorized form of the Lindbladian superoperator as

$$\mathcal{L}_{\sharp} \equiv -(H \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes H^T) + \sum_{\mu} \left( L_{\mu} \otimes L_{\mu}^* - \frac{1}{2} L_{\mu}^{\dagger} L_{\mu} \otimes \mathbb{1} - \frac{1}{2} \mathbb{1} \otimes L_{\mu}^* L_{\mu}^T \right). \quad (4)$$

The solution of the master equation can then be written as  $|\rho(T)\rangle_{\sharp} = e^{T \mathcal{L}_{\sharp}} |\rho(0)\rangle_{\sharp}$ , and the steady state of the system is

given by  $|\rho_s\rangle_{\#} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} |\rho(T)\rangle_{\#}$ . The density matrix  $|\rho_s\rangle_{\#}$  is also the eigenvector of  $\mathcal{L}_{\#}$  corresponding to zero eigenvalue, so that  $\mathcal{L}_{\#}|\rho_s\rangle_{\#} = 0$ . In our case, the Lindbladian superoperator can be written as a sum of local nearest-neighbor terms  $\mathcal{L}[\rho] = \sum_i \mathcal{L}_{i,i+1}[\rho]$  so that we can implement the infinite-TEBD algorithm [19,24] via a Trotter-Suzuki decomposition of the time evolution operator driven by the Lindbladian superoperator.

In the present study, we consider the bond-dimension  $\chi = 10$  in preparation of the initial pure state  $|\Psi\rangle$ . The MPO density matrix  $\rho$  was computed with four-rank  $\Gamma$  tensors and dimensions  $(\chi^2, d, \chi^2, d)$ , with  $d$  the local Hilbert space dimension. The vectorized MPO density matrix  $|\rho\rangle_{\#}$  was written as a MPS with three-rank  $\Gamma$  tensors with dimensions  $(\chi^2, d^2, \chi^2)$ . Also, we implemented a second-order Trotter-Suzuki decomposition of the time-evolution operator with time steps as small as  $dt = 10^{-2}$  up to maximum time evolution  $T = 300$ . The above setup was sufficiently accurate, allowing us to obtain the steady state in the thermodynamic limit. We used the quantity  $\Delta \equiv \langle \rho_s | \mathcal{L}_{\#} | \rho_s \rangle_{\#}$  as convergence criterion which should tend to zero in time, meaning that we approach the steady state. We obtained values close enough to zero, with negligible imaginary part  $\text{Im}(\Delta)$  and real part  $\text{Re}(\Delta)$  smaller than  $10^{-4}$ . Furthermore, to assess the validity of our simulations we also computed the negative eigenvalues of the  $n$  site reduced density matrix  $\rho_n$ , since the method itself does not guarantee a completely positive density matrix. To be more precise, we computed the sum of the negative eigenvalues of  $\rho_n$  and explicitly tested that this was always very close to zero.

**Results.** We investigate the effects of dissipation on 1D SPT order by computing the Markovian dynamics of the AKLT model with Lindbladian jump operators  $L_{\mu}$  that may respect, or not, the relevant symmetries protecting the SPT Haldane phase. In the symmetric case, we consider a dissipation represented by local jump operators  $L_i$  which satisfy the strong symmetry conditions discussed in Ref. [17]. On the other hand, the nonsymmetric case does not satisfy the symmetry condition. We consider two cases of dissipation; first, we implement the nonsymmetric dissipation  $L_{\mu} = S_z$ , which breaks time-reversal symmetry in the Liouvillian. Second, we consider the symmetric dissipation  $L_{\mu} = S_z^2$ , which preserves time-reversal symmetry. In both cases, we compute the steady state of the system for different dissipation strengths  $\gamma$ , and evaluate the string order parameter  $\mathcal{O}_S^{\alpha}$ , the purity of the mixed state of  $n$  consecutive sites  $\Gamma_n \equiv \text{tr}(\rho_n^2)$  ( $< 1$  for mixed states), and the degeneracies present in the spectrum  $\xi_{\alpha}$  of the Schmidt coefficients of steady state  $|\rho_s\rangle_{\#}$ .

In the case of symmetry-breaking dissipation,  $L_{\mu} = S_z$ , we start from the AKLT state and compute the steady state under dissipation for  $\gamma$  up to 0.05 which, as we shall see, is already sufficiently large for our purposes. The string order parameter  $\mathcal{O}_S^{\alpha}$  for  $\alpha = x, y, z, z^2$  and purity  $\Gamma_n$  are shown in Fig. 2. In the plots, we see that magnetic and string order decays quickly with the dissipation strength, and becomes negligible for  $\gamma > 0.02$ , signaling that the SPT order initially present in the Haldane phase of the AKLT state does not remain under this type of dissipation. In fact, our calculations are also compatible with a pure steady state, since the purity also goes to one quickly. Additionally, the spectrum  $\xi_{\alpha}$  is shown in

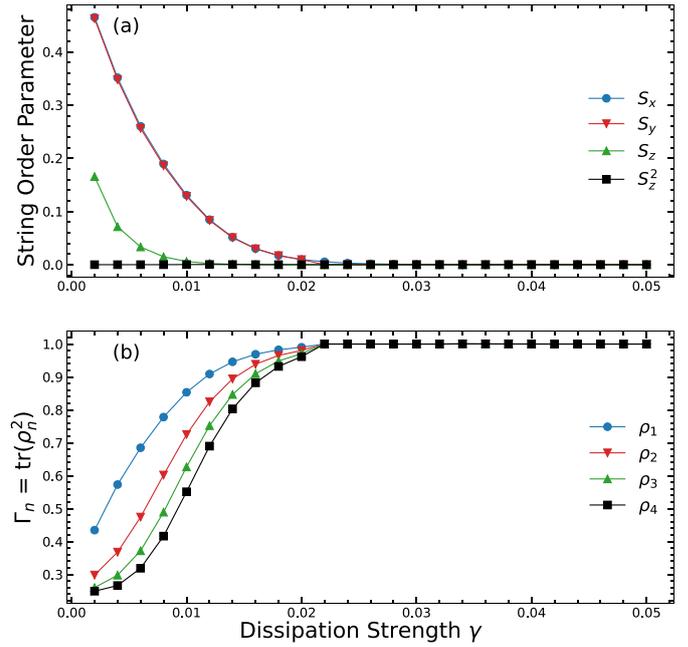


FIG. 2. (a) String order parameters  $\mathcal{O}_S^{\alpha}$  and (b) purities  $\Gamma_n$  for nonsymmetric dissipation  $L_{\mu} = S_z$ , for different values of strength dissipation  $\gamma$ .

Fig. 3 for the different values of dissipation strength  $\gamma$ . As we can see in the figure, the spectrum does not show the typical degeneracy patterns of SPT order for any value of  $\gamma$ . All these observations show that SPT order is destroyed by this type of nonsymmetric dissipation. This result is in agreement with previous investigations of the stability of symmetry-protected topological phases for noninteracting topological insulators coupled to a time-reversal breaking environment [32].

Next, we consider the case of symmetric dissipation  $L_{\mu} = S_z^2$ . The results for string order parameters and purity are shown in Fig. 4. As we can see in the plot, string orders  $\mathcal{O}_S^x$  and  $\mathcal{O}_S^y$  drop equally to zero, whereas string orders  $\mathcal{O}_S^z$  and  $\mathcal{O}_S^{z^2}$  increase with the dissipation strength up to their maximum value one for strong dissipation  $\gamma > 0.02$ . The nonzero value of these string order parameters signals the presence of nontrivial long-range behavior in the steady state, in agreement with

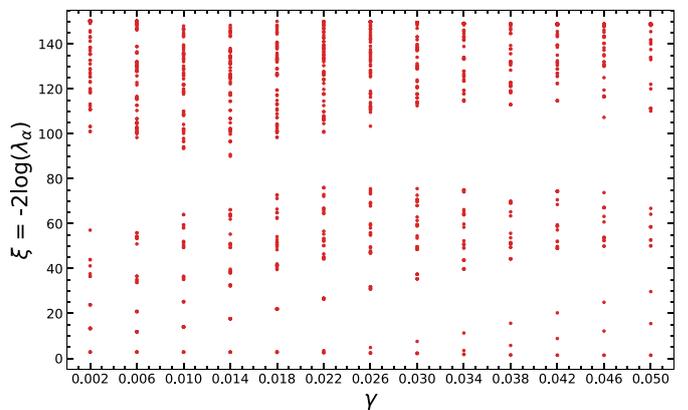


FIG. 3. Lowest part of the spectrum  $\xi_{\alpha}$  for nonsymmetric dissipation  $L_{\mu} = S_z$ , as a function of strength dissipation  $\gamma$ .

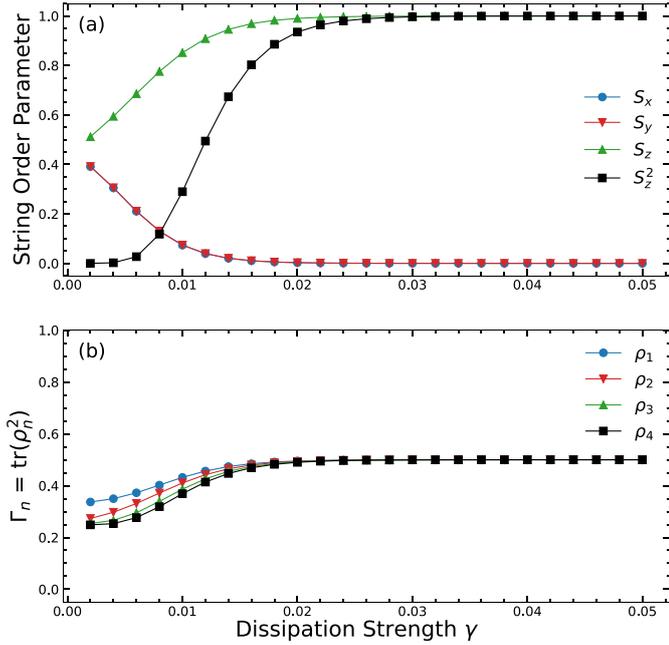


FIG. 4. (a) String order parameters  $\mathcal{O}_S^\alpha$  and (b) purities  $\Gamma_n$  for symmetric dissipation  $L_\mu = S_z^2$ , for different values of strength dissipation  $\gamma$ .

recent discussions on the resilience of certain types of topological order for mixed states [17]. It's important to mention the value of  $\mathcal{O}_S^z$  at the nonequilibrium steady state is different for the typical  $\mathcal{O}_S^z = \frac{4}{9}$  for pure AKLT state, which indicates that this type of symmetric dissipation  $L_\mu = S_z^2$  leads to a different type of SPT order. In addition, we can see that the purity flows toward 0.5 for strong dissipation, meaning that we have mixed steady states. The overall picture is completed by assessing the spectrum  $\xi_\alpha$ , which we show in Fig. 5. Importantly, the spectrum, in this case, is always organized in terms of doublets, no matter the strength of the dissipation, in analogy to the typical degeneracy of the entanglement spectrum of the Haldane SPT phase in the pure-state case. In combination with the nonzero value of some string-order parameters, we take this as an indication that the symmetry-preserving dissipation indeed keeps some kind of long-range correlation order in the mixed steady state, being this the mixed-state analog of SPT order in pure states. For all practical purposes, we can consider this as a realization of 1D dissipative SPT order, and it admits the same mathematical treatment as 1D SPT order for pure states in terms of irreducible representations of projective symmetry groups in the underlying tensor network.

**Conclusions and outlook.** In this paper we have studied the effects of different types of dissipation on 1D SPT order.

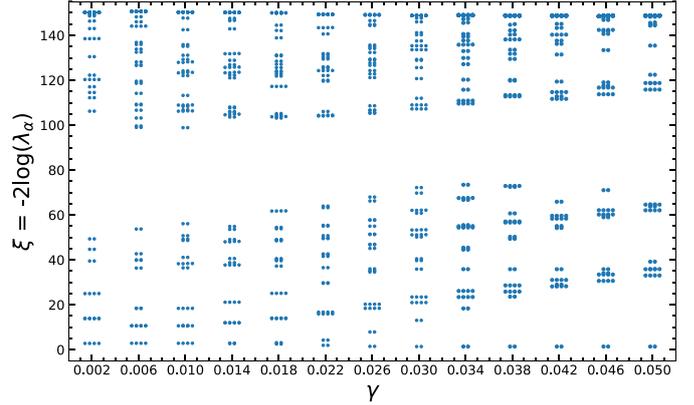


FIG. 5. Lowest part of the spectrum  $\xi_\alpha$  for symmetric dissipation  $L_\mu = S_z^2$ , as a function of strength dissipation  $\gamma$ . The spectrum is organized in doublets, no matter the dissipation strength.

In particular, we have analyzed the steady states obtained by acting with time-reversal breaking and nonbreaking dissipation on the Haldane phase of the 1D AKLT model. We have seen that non-symmetric dissipation breaks all SPT signatures already for very small values of the dissipation strength, resulting in reduced density matrices representing pure local states. It would be interesting to check if this effect remains for more general multisite Lindblad operators. Symmetric dissipation induces a long-range correlation order in the mixed steady state, that is analogous to the 1D SPT order in pure states. This has been assessed by the nonzero values of some string order parameters, as well as by the degeneracy of the spectrum of Schmidt coefficients in the MPO representation of the mixed state, akin to the degeneracy of the entanglement spectrum in 1D SPT phases. Our results point toward a broad concept of 1D dissipative SPT order, which can have the same mathematical treatment as 1D SPT order for pure states, in terms of irreducible representations of projective symmetry groups. This opens the possibility to investigate new dissipative phases of quantum matter, where nonlocal patterns of long-range order are at play, and which can be naturally described and characterized using the tensor network language, probably even beyond 1D systems. Diving into such an analysis is a topic for future works.

**Acknowledgments.** This work was supported by DIPC (Donostia International Physics Center), CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), and CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior). L.M.V. acknowledges CAPES and DIPC for all support in the joint visiting researcher program. R.O. acknowledges DIPC, Ikerbasque, Basque Government, and Diputación de Gipuzkoa.

- [1] X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 041004 (2017).
- [2] F. D. M. Haldane, *Rev. Mod. Phys.* **89**, 040502 (2017).
- [3] H. Tasaki, *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems* (Springer, New York, 2020).
- [4] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).

- [5] M. den Nijs and K. Rommelse, *Phys. Rev. B* **40**, 4709 (1989).
- [6] H. Li and F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 010504 (2008).
- [7] F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. B* **81**, 064439 (2010).
- [8] F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. B* **85**, 075125 (2012).

- [9] S. Diehl, E. Rico, M. A. Baranov, and P. Zoller, *Nat. Phys.* **7**, 971 (2011).
- [10] C. E. Bardyn, M. A. Baranov, C. V. Kraus, E. Rico, A. Imamoglu, P. Zoller, and S. Diehl, *New J. Phys.* **15**, 085001 (2013).
- [11] T. S. Deng, L. Pan, Y. Chen, and H. Zhai, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 086801 (2021).
- [12] F. Verstraete and J. I. Cirac, *Nature Phys.* **5**, 633 (2009).
- [13] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1083 (2008).
- [14] M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [15] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [16] A. Coser and D. Pérez-García, *Quantum* **3**, 174 (2019).
- [17] C. de Groot, A. Turzillo, and N. Schuch, *Quantum* **6**, 856 (2022).
- [18] T. Kennedy and H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* **147**, 431 (1992).
- [19] R. Orús and G. Vidal, *Phys. Rev. B* **78**, 155117 (2008).
- [20] R. Orús, *Annals of Physics* **349**, 117 (2014).
- [21] U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
- [22] J. I. Cirac, D. Pérez-García, N. Schuch, and F. Verstraete, *Rev. Mod. Phys.* **93**, 045003 (2021).
- [23] G. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 147902 (2003).
- [24] G. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 040502 (2004).
- [25] U. Schollwöck, *Annals of Physics* **326**, 96 (2011).
- [26] D. Jaschke, S. Montangero, and L. D. Carr, *Quantum Sci. Technol.* **4**, 013001 (2019).
- [27] H. Weimer, A. Kshetrimayum, and R. Orús, *Rev. Mod. Phys.* **93**, 015008 (2021).
- [28] M. Zwolak and G. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 207205 (2004).
- [29] A. Kshetrimayum, H. Weimer, and R. Orús, *Nat. Commun.* **8**, 1291 (2017).
- [30] J. Cui, J. I. Cirac, and M. C. Bañuls, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 220601 (2015).
- [31] A. A. Gangat, T. I, and Y.-J. Kao, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 010501 (2017).
- [32] M. McGinley and N. R. Cooper, *Nat. Phys.* **16**, 1181 (2020).