



HENRIQUE GARCIA PAULINELLI

**CADEIA DE SPIN DÍMERO-PLAQUETA
ORTOGONAL COM ACOPLAMENTO
ISING-HEISENBERG**

LAVRAS - MG

2014

HENRIQUE GARCIA PAULINELLI

**CADEIA DE SPIN DÍMERO-PLAQUETA ORTOGONAL COM
ACOPLAMENTO ISING-HEISENBERG**

Dissertação de mestrado apresentada à
Universidade Federal de Lavras, como
parte das exigências do Programa de
Pós-Graduação em Física, área de
concentração em Física da Matéria
Condensada, para a obtenção do título
de Mestre.

Orientador
Dr. Onofre Rojas Santos
Coorientador
Dr. Sérgio Martins de Souza

**LAVRAS - MG
2014**

**Ficha Catalográfica Elaborada pela Coordenadoria de Produtos e
Serviços da Biblioteca Universitária da UFLA**

Paulinelli, Henrique Garcia

Cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg / Henrique Garcia Paulinelli. – Lavras: UFLA, 2014.

95 p. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Lavras, 2014.

Orientador: Onofre Rojas Santos.

Bibliografia.

1. Cadeia de spin quântico. 2. Dímero-plaqueta. 3. Emaranhamento térmico. 4. Frustração de spin. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD – 530.41

HENRIQUE GARCIA PAULINELLI

**CADEIA DE SPIN DÍMERO-PLAQUETA ORTOGONAL COM
ACOPLAMENTO ISING-HEISENBERG**

Dissertação de mestrado apresentada à
Universidade Federal de Lavras, como
parte das exigências do Programa de
Pós-Graduação em Física, área de con-
centração em Física da Matéria Conden-
sada, para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 25 de fevereiro de 2014.

Dra. Maria Teresa Climaco dos Santos Thomaz

UFF

Dr. Marcelo Leite Lyra

UFAL

Dr. Onofre Rojas Santos

Orientador

LAVRAS - MG

2014

AGRADECIMENTOS

À Universidade Federal de Lavras (UFLA) e ao Departamento de Exatas (DEX), pela oportunidade concedida para realização do mestrado.

À CAPES pela concessão da bolsa de estudos.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Exatas (DEX), pelos ensinamentos transmitidos e harmoniosa convivência.

Ao professor Dr. Onofre Rojas Santos pela orientação, paciência, dedicação e seus ensinamentos que foram de grande relevância para a realização deste trabalho e meu crescimento profissional.

Aos meus familiares, pela paciência, carinho e compreensão, em todos os momentos difíceis. Em especial, à minha Mãe Dona Maria e à minha avó Dona Lalita que, juntas, foram meu sustento, com orações e carinhos. Meu pai, Flávio, com sua imensa torcida e apoio. Meus irmãos queridos, Douglas e Flávia, pelos inúmeros apoios. E meu Amor, Lorrainy, que muito me acolheu e incentivou, em diversas situações no decorrer do mestrado.

Aos amigos-irmãos que Deus me presenteou.

Aos amigos, graduandos e pós-graduandos, pela preciosa ajuda na condução da pesquisa.

RESUMO

Consideraremos a cadeia de spin, composta de dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg, motivado pelo fato de alguns cristais possuírem essa estrutura. Para resolver esse modelo de cadeia de spin quântico, primeiro usaremos a transformação de gauge local, em seguida, a transformação de decoração juntamente com a técnica de matriz de transferência. Assim, obtemos a energia livre do modelo em forma exata. Analisaremos as transições de fase à temperatura zero, em que encontramos várias fases, dentre elas, regiões frustradas de spin. Discutiremos, também, as propriedades térmicas tais como: calor específico, entropia e função de correlação entre sítios mais próximos. Além disso, estudaremos as propriedades de emaranhamento térmico nos dímeros que compõem a cadeia e discutiremos as suas propriedades de emaranhamento térmico para diferentes valores de acoplamento da cadeia. Ainda, mostraremos, também, como o emaranhamento desaparece, repentinamente, para uma dada temperatura, a chamada temperatura de limiar.

Palavras-chave: Cadeia de spin quântico. Dímero-plaqueta. Emaranhamento térmico. Frustração de spin.

ABSTRACT

Consider the orthogonal dimer-plaquette chain with Ising-Heisenberg coupling, motivated by the fact of a few crystals presenting this structure. In order to resolve this quantic spin chain model, we first use local gauge transformation, followed by the decoration transformation along with the transference matrix technique. Thus, we obtain the exact form of the model's free energy. Subsequently, we analyze the phase transitions at zero temperature, in which we find many phases, among which are frustrated spin regions. We will also discuss thermal properties such as: specific heat, entropy and correlation function between adjacent sites. In addition, we will study the thermal entanglement properties in the dimers which comprise the chain, and discuss these properties for different chain coupling values. Also, we will show how the entanglement suddenly disappears in a given temperature, the so called threshold temperature.

Keywords: Quantic spin chain. Dimer-plaquette. Thermal entanglement. Spin frustration.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura paramagnética	21
Figura 2	Distribuição dos íons magnéticos em domínios em uma estrutura ferromagnética	22
Figura 3	Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura antiferromagnética	23
Figura 4	Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura ferrimagnética em $T=0$	24
Figura 5	(a) Interação antiferromagnética do vizinho mais próximo não apresenta frustração. (b) A rede triangular apresenta frustração, porque não é possível orientar o spin no terceiro sítio para satisfazer o requisito de interação antiferromagnética com os vizinhos mais próximos	25
Figura 6	Representação de uma cadeia periódica com N sítios	29
Figura 7	Representação esquemática de um modelo de Ising-decorado	30
Figura 8	Representação esquemática de um policristalino $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ (KAGEYAMA et al., 1999)	55
Figura 9	Representação esquemática da cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg. (Acima) A linha grossa corresponde ao acoplamento Heisenberg, enquanto a linha fina corresponde ao acoplamento Ising. (Abaixo) Dímero-plaqueta mapeado por meio da simetria local de gauge	57

Figura 10 (a) Diagrama de fases à temperatura zero com uma dependência de Δ versus J , para um valor fixo de $ J_0 = 1$. (b) Diagrama de fases à temperatura zero com uma dependência de Δ versus J_0 , para um valor fixo de $ J = 1$	63
Figura 11 (a) Diagrama de fases à temperatura zero com uma dependência de Δ versus J , para um valor fixo de $ J_0 = 1$. (b) Diagrama de fases à temperatura zero com uma dependência de Δ versus J_0 , para um valor fixo de $ J = 1$	65
Figura 12 Gráfico da densidade para a entropia em $T = 0.2$. A região escura correspondente a um valor maior de entropia. (a) Entropia como uma dependência de J e Δ para o valor fixado de $ J_0 = 1$. (b) Entropia como uma dependência de J_0 e Δ para o valor fixado de $ J = 1$	70
Figura 13 Gráfico da densidade para a entropia em $T = 0.2$. A região escura correspondente para alta entropia. (a) Entropia como uma dependência de J e Δ para o valor fixado de $ J_0 = 1$. (b) Entropia como uma dependência de J_0 e Δ para o valor fixado de $ J = 1$	71
Figura 14 Calor específico em função da temperatura para vários valores do parâmetro anisotrópico assumindo valores fixos $J = 1.0$ e $J_0 = 1.0$	72
Figura 15 Calor específico, em função da temperatura, para vários valores do parâmetro anisotrópico assumindo valores fixos $J = 1.0$ e $J_0 = 1.0$	73

Figura 16	Função de correlação entre primeiros vizinhos para dímero- ab e dímero- cd definido pelas eqs. (5.23-5.26), assumindo fixo os parâmetros $J = 1.0$ e $J_0 = 1.0$. (a) Para o caso do parâmetro anisotrópico $\Delta = -0.3$. (b) E para o caso do parâmetro anisotrópico $\Delta = 0.3$	77
Figura 17	Concorrência para vários valores do parâmetro anisotrópico em função de T , assumindo fixo $J_0 = 1$ e $J = 1$. Linha tracejada corresponde ao dímero- ab , enquanto a linha sólida representa dímero- cd	80
Figura 18	Temperatura de limiar T_{th} em função de Δ , para $J_0 = 1$ e $J = 1$ fixos. Linha tracejada corresponde ao dímero- ab , enquanto a linha sólida representa dímero- cd	81
Figura 19	Gráfico de densidade para a concorrência em unidades de T_{th} . A região mais escura corresponde a um maior emaranhamento. (a) Concorrência para dímero- ab em função de Δ versus J para um valor fixo de $J_0 = 1$. (b) Concorrência para dímero- cd em função de Δ versus J para um valor fixo de $J_0 = 1$	82
Figura 20	Gráfico de densidade para a concorrência em unidades T_{th} . A região mais escura corresponde a um maior emaranhamento. (a) Concorrência para dímero- ab em função de Δ versus J_0 para um valor fixo de $J = 1$. (b) Concorrência para dímero- cd em função de Δ versus J_0 para um valor fixo de $J = 1$	83

LISTA DE SÍMBOLOS

Z_N	Função de partição do sistema
E_i	Energia por sítio
κ_B	Constante de Boltzmann
T	Temperatura absoluta do sistema
f	Energia livre de Helmholtz
S	Entropia do sistema por sítio
C	Calor específico por sítio
L	Momento angular orbital
μ_{orb}	Momento magnético orbital
e	Carga elétrica
m_e	Massa do elétron
S	Operador de spin
μ_s	Momento magnético de spin
M	Magnetização por sítio
χ	Susceptibilidade magnética por sítio
h	Campo magnético externo
CID	Cadeia de Ising-decorado
\mathcal{H}	Hamiltoniano do sistema
H_i	Hamiltoniano do spin decorado
s	Spin de Ising
σ	Spin de Heisenberg
W	Peso de Boltzmann
T	Matriz de transferência
M_s	Magnetização do spin de Ising por sítio

m_e	Massa do elétron
σ^y	Componente y da Matriz de Pauli
\mathbf{T}	Matriz de transferência
ρ	Matriz densidade
λ_i	Autovalor da matriz de transferência
$\mathbf{1}$	Matriz identidade
\mathbb{H}	Espaço de Hilbert
$ \psi\rangle$	Vetor de estado quântico
a_i	Amplitude de probabilidade
$\langle\psi $	Vetor do espaço dual
a_i^*	Conjugado complexo de a_i
$E(\Psi)$	Emaranhamento de formação
$\tilde{\rho}$	Transformação <i>spin – flip</i>
$\mathcal{C}(\rho)$	Concorrência
Λ_i	Autovalor da matriz \mathbf{R}
J_0	Parâmetro de acoplamento Ising
$J(J')$	Parâmetro de acoplamento Heisenberg
$\Delta(\Delta')$	Anisotropia em Heisenberg

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	14
1.1	Mecânica Estatística e as Propriedades Termodinâmicas de sistemas físicos	14
1.1.1	Mecânica Estatística	15
1.1.2	Energia livre de Helmholtz por sítio	16
1.1.3	Entropia por sítio	16
1.1.4	Calor específico por sítio	17
1.2	Magnetismo e Propriedades Magnéticas	18
1.2.1	Momento Magnético Orbital e de Spin	18
1.2.2	Magnetização por sítio	19
1.2.3	Susceptibilidade Magnética por sítio	20
1.2.4	Propriedades Magnéticas	21
1.3	Frustração geométrica	24
2	MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA PARA MODELO UNIDIMENSIONAL ISING-DECORADOS	27
2.1	Matriz de transferência	27
2.1.1	Energia Livre de Helmholtz	32
2.2	O valor esperado e a função de correlação	33
2.2.1	Valor Esperado	33
2.2.2	Função de correlação	37
3	EMARANHAMENTO	41
3.1	Sistema Quântico	41
3.2	Emaranhamento de formação de dois qubits	45
3.3	Emaranhamento térmico	51
4	CADEIA DE SPIN DÍMERO-PLAQUETA ORTOGONAL COM ACOPLAMENTO ISING-HEISENBERG	54
4.1	Introdução	54
4.2	Cadeia de Spin Dímero-Plaqueta Ortogonal com Acoplamento Ising-Heisenberg	56
4.3	Diagrama de Fase à temperatura zero	60
4.3.1	Diagrama de fase assumindo $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$	62
4.3.2	Diagrama de fase assumindo $J = J'$ e $\Delta = -\Delta'$	64
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	66
5.1	Termodinâmica do Modelo	66
5.2	Entropia	69
5.2.1	Assumindo que $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$	69
5.2.2	Assumindo que $J = J'$ e $\Delta = -\Delta'$	70

5.3	Calor específico	71
5.3.1	Assumindo que $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$	71
5.3.2	Assumindo que $J = J'$ e $\Delta = -\Delta'$	72
5.4	Função de Correlação	73
5.5	Emaranhamento térmico	77
5.6	Temperatura de Limiar	80
6	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	84
	APÊNDICES	86
	REFERÊNCIAS	90

1 INTRODUÇÃO

A física da matéria condensada é o ramo da física que estuda as propriedades de sólidos, líquidos e outras formas da matéria, na qual os átomos ou partículas são concentrados. A física da matéria condensada procura entender o comportamento destas fases, usando leis físicas, tais como as leis da mecânica clássica, da mecânica quântica, do eletromagnetismo e da mecânica estatística.

Com o objetivo de estudar as propriedades térmicas da cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal, com acoplamento Ising-Heisenberg, é que serão apresentadas, a seguir, informações relativas a tais propriedades para esses sistemas unidimensionais.

1.1 Mecânica Estatística e as Propriedades Termodinâmicas de sistemas físicos

A Mecânica Estatística procura relacionar as propriedades termodinâmicas físicas, considerando modelos microscópicos, como átomos e moléculas, com o objetivo de efetuar previsões seguras sobre o comportamento macroscópico dos modelos (LAGE, 1995). Dessa forma, ela faz conexão com a termodinâmica do mundo macroscópico por meio dos parâmetros visíveis P , V e T . Ela é construída com base em postulados estatísticos e teorias probabilísticas para descrever os estados microscópicos do sistema considerado (SALINAS, 2008). Um microestado é definido pela descrição microscópica completa do sistema (FLIESSBACH, 2000).

Com base nesse pressuposto, apresentaremos, de forma sucinta, algumas informações sobre Mecânica Estatística (ou Física Estatística), bem como sua aplicação de obter as propriedades termodinâmicas do sistema físico sob estudo,

tais como: energia livre de Helmholtz, entropia e calor específico.

1.1.1 Mecânica Estatística

Os valores das variáveis do tipo pressão e temperatura são determinados, baseando-se na teoria cinética dos gases e estão diretamente ligados ao cálculo de valores médios de grandezas microscópicas. A determinação destes parâmetros é feita considerando a mecânica estatística, já que é preciso o uso de métodos estatísticos para a obtenção desses valores macroscópicos.

Para determinar as grandezas microscópicas, é necessário conhecer os estados que compõem um determinado sistema. Os estados são descritos por espaços de fases acessíveis a um determinado sistema que constitui um ensemble estatístico (SALINAS, 2008).

O ensemble estatístico é constituído pelo conjunto de estados acessíveis, que, em um sistema estatístico fechado, com energia fixa, é igualmente equiprovável (LAGE, 1995), sendo esse o postulado fundamental da mecânica estatística.

Assim, é preciso definir a função de partição \mathcal{Z} , para um sistema com \mathcal{N} estados disponíveis como:

$$\mathcal{Z} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} e^{(-\beta E_i)}, \quad (1.1)$$

em que a soma é sobre todos os pesos de Boltzmann ($e^{-\beta E_i}$), sendo E_i o valor da energia de um dado estado i , em que o sistema físico pode ser encontrado, com $\beta = 1/\kappa_B T$: κ_B a constante de Boltzmann, e T a temperatura absoluta medida em kelvin. Enfatizamos que a função de partição será útil para determinar a energia livre de Helmholtz.

1.1.2 Energia livre de Helmholtz por sítio

A energia livre é a energia de um sistema físico que pode ser convertida em trabalho. Particularmente, a energia livre de Helmholtz representa a energia interna de um sistema, que pode ser transformada em trabalho, mantendo a temperatura constante (CALLEN, 1985).

Logo, a energia livre por sítio para um sistema unidimensional com N sítios, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), pode ser expressa por

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \ln \mathcal{Z}_N, \quad (1.2)$$

sendo \mathcal{Z}_N a função de partição para o sistema com N sítios na cadeia. Vale ressaltar que a energia livre por sítio é uma grandeza intensiva (independente de N). A função (1.2) é chamada de energia livre de Helmholtz.

As propriedades termodinâmicas do sistema físico em equilíbrio térmico, tais como o calor específico e a entropia, entre outras grandezas, podem ser obtidas considerando a expressão da energia livre de Helmholtz f .

1.1.3 Entropia por sítio

Entropia por sítio é uma grandeza termodinâmica que quantifica a irreversibilidade de um processo no sistema em equilíbrio termodinâmico. Ela representa uma parte da energia interna que não pode ser convertida em trabalho (CALLEN, 1985). A entropia de um sistema sempre será uma quantidade não negativa e aumenta com o incremento da temperatura.

Podemos relacionar a entropia com a energia livre de Helmholtz. Basta tomar a derivada da energia livre (1.2), em função da temperatura, mantendo V

constante

$$\mathcal{S} = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_V. \quad (1.3)$$

1.1.4 Calor específico por sítio

O calor específico é a razão entre a quantidade de calor injetado no sistema e a consequente variação da temperatura, sendo uma quantidade não negativa (SALINAS, 2008).

Temos condições de quantificar o calor específico medido experimentalmente C_P (calor específico à pressão constante) e o calor específico medido teoricamente C_V (calor específico à volume constante).

O calor específico à pressão constante pode ser considerado uma medida experimental, por ser mais conveniente controlar a temperatura T e a pressão p . O calor específico à pressão constante em termos de entropia é dado por

$$C_P = T \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial T} \right)_P, \quad (1.4)$$

similarmente, o calor específico a volume constante é dado por

$$C_V = T \left(\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial T} \right)_V, \quad (1.5)$$

ou em termos da energia livre de Helmholtz, a entropia (1.3) substituída no calor específico (1.5) nos dá

$$C_V = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_V. \quad (1.6)$$

1.2 Magnetismo e Propriedades Magnéticas

Nesta parte, serão apresentados alguns conceitos básicos e propriedades fundamentais sobre a magnetização dos materiais, assim como o que diz respeito aos materiais magnéticos.

Os materiais magnéticos, desde a magnetita até as fitas de vídeo, são magnéticos por causa das partículas atômicas dos quais são constituídos. Em particular, os elétrons podem produzir campos magnéticos em razão de possuírem momento dipolar magnético. O dipolo magnético do elétron é composto de seu momento magnético de spin e o seu momento magnético orbital (NOVAK, 1999). As propriedades magnéticas dos materiais é o resultado da combinação dos momentos magnéticos de spin e orbital das partículas que as constituem. Dentre os tipos de materiais magnéticos existentes, apresentamos, a seguir, de forma sucinta, os paramagnéticos, os ferromagnéticos, os antiferromagnéticos e os ferrimagnéticos (ASHCROFT; MERMIN, 2011).

1.2.1 Momento Magnético Orbital e de Spin

a) Momento Magnético Orbital

O elétron, dentro do átomo, possui momento angular associado ao seu movimento de translação que recebe o nome de **momento angular orbital**, representado pelo símbolo \mathbf{L} (BLUNDELL, 2001).

A relação entre o momento magnético orbital μ_{orb} e o momento magnético associado ao momento angular orbital, é dada por

$$\mu_{orb} = - \left(\frac{e}{2m_e} \right) \mathbf{L}, \quad (1.7)$$

em que e representa o módulo da carga elétrica do elétron e m_e a sua massa. Podemos ver pela expressão (1.7) do momento magnético orbital que ele é proporcional ao seu momento angular \mathbf{L} . Como a carga elétrica do elétron é negativa ($-e < 0$), os vetores $\boldsymbol{\mu}_{orb}$ e \mathbf{L} têm sentidos opostos (BLUNDELL, 2001).

b) Momento Magnético de Spin

Os elétrons (assim como prótons, nêutrons e outras partículas) têm uma propriedade intrínseca chamada de **spin** que satisfaz as relações de comutação de operadores de momento angular, que, também, contribui para seu momento magnético. O spin da partícula é representado pelo símbolo \mathbf{S} . Associado a este spin, existe um **momento magnético de spin**, representado pelo símbolo $\boldsymbol{\mu}_s$ (BLUNDELL, 2001). Os momentos magnéticos $\boldsymbol{\mu}_s$ e \mathbf{S} são relacionados por meio da equação

$$\boldsymbol{\mu}_s = - \left(\frac{e}{m_e} \right) \mathbf{S}. \quad (1.8)$$

Assim como para o momento magnético orbital, a carga negativa do elétron ($-e < 0$) indica que os vetores $\boldsymbol{\mu}_s$ e \mathbf{S} têm sentidos opostos.

1.2.2 Magnetização por sítio

Na presença de um campo magnético, a matéria torna-se magnetizada, isto é, um exame microscópico revelaria que ela contém muitos dipolos minúsculos, com alinhamento líquido ao longo de uma determinada direção (GRIFFITHS, 2011).

A magnetização por sítio (\mathbf{M}) é a soma de todos os momentos magnéticos elementares μ_i divididos pelo volume V , ocupado pelo meio magnético (NOVAK,

1999):

$$M = \sum_i \frac{\mu_i}{V}, \quad (1.9)$$

sendo a soma realizada sobre todos os possíveis estados físicos i que possuem dipolo magnético total por sítio dado por $\vec{\mu}_i$. Para este vetor contribuem os momentos magnéticos orbital e de spin em cada sítio contido no volume V . Em princípio o vetor magnetização por sítio, equação (1.9), têm componentes x , y e z .

1.2.3 Susceptibilidade Magnética por sítio

A susceptibilidade indica como é a resposta de um material quando aplicado a uma variação de campo magnético (KITTEL, 1978). No caso geral, a susceptibilidade por sítio é um tensor de segunda ordem. Como vamos tratar com campos magnéticos homogêneos na direção z e estamos interessados no comportamento da componente z da magnetização por sítio, em decorrência da variação desse campo magnético, definimos a susceptibilidade magnética por sítio como:

$$\chi = \lim_{\Delta h \rightarrow 0} \frac{\Delta M}{\Delta h} = \frac{\partial M}{\partial h}, \quad (1.10)$$

em que h representa o campo magnético externo homogêneo ao longo da direção z . A susceptibilidade pode ser expressa, também, em termos da energia livre de Helmholtz

$$\chi = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}. \quad (1.11)$$

1.2.4 Propriedades Magnéticas

a) Paramagnetismo

O paramagnetismo é observado em materiais que contêm momentos magnéticos líquidos por sítio. No entanto, a agitação térmica provoca um arranjo aleatório dos momentos magnéticos por sítio como podemos ver na Figura 1, tornando-se um material com momento de dipolo magnético médio nulo.

Quando uma substância paramagnética for posicionada em um campo magnético externo, seus momentos atômicos tendem a se alinhar com ele. Este processo de alinhamento, entretanto, deve competir com o movimento térmico, que tende a deixar aleatórias as orientações dos momentos magnéticos de cada sítio (BLUNDELL, 2001).

Todo material paramagnético, submetido a um campo magnético externo h , apresenta um momento dipolar magnético não nulo, orientado no mesmo sentido que h (GRIFFITHS, 2011).

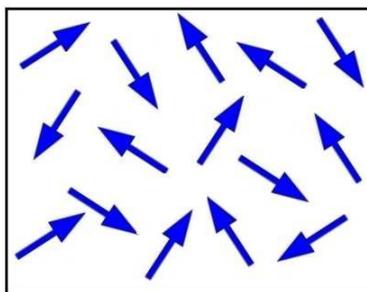


Figura 1 Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura paramagnética

b) Ferromagnetismo

Os materiais ferromagnéticos possuem pequenas regiões (domínios) em que todos os dipolos magnéticos estão alinhados paralelamente uns com os outros (SPALDIN, 1969), como apresentamos na Figura 2.

O ferromagnetismo está presente em pequenas regiões do material, por meio de uma magnetização espontânea, que persiste mesmo na ausência de um campo de indução externa (BLUNDELL, 2001).

Um campo magnético externo h pode alinhar os momentos magnéticos destas regiões, fazendo com que uma amostra do material produza um forte campo magnético no mesmo sentido do campo externo, que permanece quando h é removido (KITTEL, 1978).

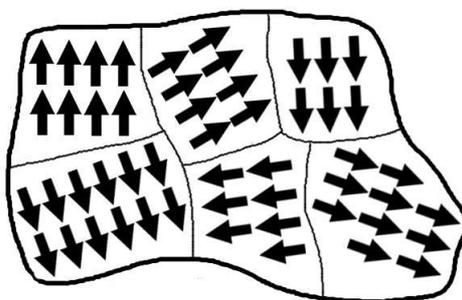


Figura 2 Distribuição dos íons magnéticos em domínios em uma estrutura ferromagnética

c) Antiferromagnetismo

Os materiais antiferromagnéticos são substâncias que possuem pequenas regiões (domínios), em que todos os dipolos estão nas mesmas direções, mas em sentidos opostos entre pares. Na Figura 3 vemos a distribuição dentro de uma única região.

Nos materiais antiferromagnéticos, a interação entre os momentos magnéticos tende a alinhar momentos adjacentes antiparalelos uns com os outros (SPALDIN, 1969), como pode ser visto na Figura 3 em temperatura nula ($T = 0$).

É importante ressaltar que a magnetização por sítio é nula, uma vez que ela é uma quantidade média.

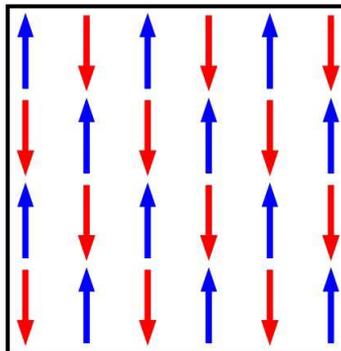


Figura 3 Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura antiferromagnética

d) Ferrimagnetismo

Os ferrimagnetos se comportam, similarmente, aos ferromagnetos, que apresentam uma magnetização espontânea, abaixo de temperaturas críticas, mesmo na ausência de um campo aplicado no sistema (SPALDIN, 1969).

O ferrimagnetismo, também, está relacionado com o antiferromagnetismo, em que os momentos magnéticos se alinham antiparalelamente com os momentos adjacentes.

A Figura 4 mostra como se comportam os íons magnéticos em $T = 0$, indicando que a magnetização por sítio resultante é não nula, porém é de menor intensidade que um caso ferromagnético.

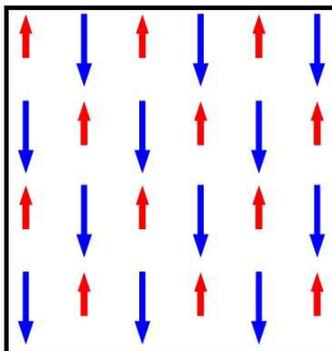


Figura 4 Distribuição dos íons magnéticos em uma estrutura ferrimagnética em $T=0$

1.3 Frustração geométrica

A frustração geométrica é uma característica que impede, por exemplo, a formação “perfeita” de um cristal, quando se tem uma pequena quantidade de átomos de determinada substância, resultando em pequenas imperfeições, em função da estrutura geométrica. A existência de modelos frustrados, também, está presente em sistemas de spin. A palavra “frustração” foi introduzida para descrever a situação em que um spin (ou um número de spins) no sistema não pode encontrar uma única orientação para satisfazer plenamente todas as interações com seu spin vizinho (DIEP, 2004).

Um simples exemplo de frustração pode ser mostrado com dois spins S_i e S_j com spin- $\frac{1}{2}$ cada e interação J entre eles. A energia de interação entre os dois spins é dada por

$$E = -JS_i \cdot S_j. \quad (1.12)$$

Quando J é positivo (interação ferromagnética), a energia (1.12) é mínima, $E = -J$, situação em que todos os spins estão orientados paralelamente entre si. Logo, a configuração para que a interação entre cada par de spins seja mínima é completamente satisfeita. Portanto, o ferromagnetismo pode ser aplicável a qualquer estrutura de rede (DIEP, 2004).

Mas se J é negativo (interação antiferromagnética), a energia mínima será $E = J$, situação em que os pares de spins estão orientados antiparalelamente entre si. Para verificarmos se é possível essa configuração de spins vizinhos, dependemos da estrutura da rede (DIEP, 2004).

Podemos ver na Figura 5(a) que, para redes quadradas, os pares de spins satisfazem a condição de que os spins mais próximos são antiparalelos entre si. Por outro lado, para redes triangulares, como ilustrado na Figura 5(b), um dado spin é antiparalelo a um de seus vizinhos, enquanto o terceiro spin pode assumir qualquer uma das direções dos demais spins. No entanto, a indeterminação no sentido caracteriza a ele uma frustração geométrica.

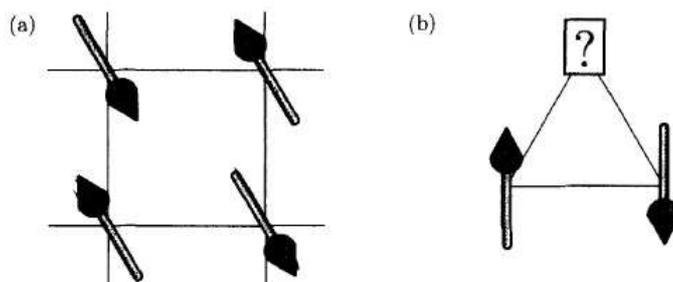


Figura 5 (a) Interação antiferromagnética do vizinho mais próximo não apresenta frustração. (b) A rede triangular apresenta frustração, porque não é possível orientar o spin no terceiro sítio para satisfazer o requisito de interação antiferromagnética com os vizinhos mais próximos

Usando a ideia básica apresentada na Figura 5, agora podemos estender

o conceito de frustração geométrica para um sistema de N partículas no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Em virtude da indeterminação nos spins do sistema, a energia do estado fundamental será degenerada em g^N , sendo g a degenerescência da célula unitária, isso implica que a entropia por sítio em temperatura zero não será nula e será dada por

$$\mathcal{S} = \kappa_B \ln(g), \quad (1.13)$$

esta entropia não nula é conhecida como entropia residual (PORTELA, 2010). Assim, por exemplo, um sistema de N partículas de spin- $\frac{1}{2}$ sem interação e na ausência de campo magnético tem 2^N configurações (todas com a mesma energia), dessa forma a entropia residual no limite termodinâmico será $\mathcal{S} = \kappa_B \ln(2)$.

Uma discussão mais detalhada sobre frustração geométrica, com mais exemplos e explicações, pode ser encontrada na referência Diep (2004).

Estas propriedades termodinâmicas e magnéticas serão discutidas na cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg nas seções 4 e 5.

2 MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA PARA MODELO UNIDIMENSIONAL ISING-DECORADOS

Nesta seção, será apresentado o formalismo da matriz de transferência que permite resolver modelos de Ising-decorados (FISHER, 1959; SYOZI; NAKANO, 1955), no qual a decoração pode conter o spin quântico. Com isso, será possível calcular a energia livre de Helmholtz considerando os autovalores da matriz de transferência. Em seguida, será exposto como determinar o valor esperado do operador de spin e a função de correlação entre 2 spins distantes, para modelos de Ising-decorados.

2.1 Matriz de transferência

Uma simples aplicação da técnica de matriz de transferência é a solução exata do modelo de Ising unidimensional com spin- $\frac{1}{2}$, para um número finito de sítios (BAXTER, 1982). Em geral, a matriz de transferência possibilita escrever a função de partição do modelo em termos dos autovalores da matriz de transferência.

O método a ser utilizado será a transformação de decoração, proposto no início da década de 50, por Fisher (FISHER, 1959) e Syozi (SYOZI, 1951). Mais tarde, esta abordagem foi o tema de estudo de modelos unidimensionais decorados na referência Rojas, Valverde e Souza (2009) para o caso de multi-spins. Uma generalização semelhante, também, foi desenvolvida por Strěcka (STRĚCKA, 2010) para o sistema híbrido (por exemplo Ising-Heisenberg). Mais recentemente, outra variante interessante dessa abordagem foi discutida, em que uma transformação direta foi proposta em vez de uma transformação passo a passo na referência Rojas e Souza (2011a).

Por outro lado, a técnica da transformação de decoração é amplamente utilizada, para resolver diversos modelos de spins, assim como fermions sem spins na estrutura de diamante (ROJAS; SOUZA, 2011b), como também o modelo de Hubbard no limite quase-atômico (ROJAS; SOUZA; ANANIKIAN, 2012).

Para exemplificar a aplicação da matriz de transferência em modelos decorados (híbridos), ilustrado na Figura 7, será utilizada a cadeia de Ising-decorado (CID) (BELLUCCI; OHANYAN, 2013), com spin- $\frac{1}{2}$ em um campo magnético externo na direção z (campo magnético longitudinal).

O Hamiltoniano deste modelo pode ser escrito por

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left(H_i - \frac{h}{2} (s_i + s_{i+1}) \right), \quad (2.1)$$

sendo H_i o Hamiltoniano que descreve a parte decorada do modelo Ising-decorado (spin quântico) e s_i é a componente z do operador de spin- $\frac{1}{2}$ (\vec{s}_i) no sítio i .

O termo H_i está em função dos operadores s_i e s_{i+1} , o que, na verdade, seria expresso por $H_i(s_i, s_{i+1})$, mas que, na simplicidade, não foi exposto no Hamiltoniano (2.1). O operador s_i , também, é denominado de spin de Ising. A sua representação matricial é dada pela componente z das matrizes de Pauli

$$s_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

situado no sítio i . Denotamos por h o campo magnético externo longitudinal que age sobre o sistema (BELLUCCI; OHANYAN, 2013). Por conveniência, vamos considerar uma cadeia fechada com a condição de contorno periódica, como podemos ver na figura 6, assim $s_{N+1} \equiv s_1$. Temos que N é o número de sítios na cadeia.

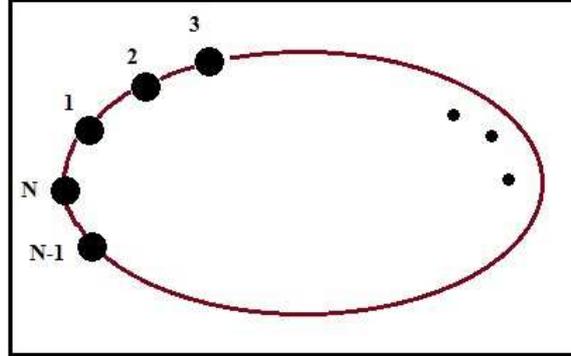


Figura 6 Representação de uma cadeia periódica com N sítios

Portanto, a função de partição para o modelo descrito pelo Hamiltoniano (2.1) será dada por

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{s\}} \text{tr}_\sigma \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right), \quad (2.3)$$

em que $\{s\}$ denota a soma sobre todas as configurações de spins de Ising ($s = \pm 1$), enquanto o traço tr_σ é um traço parcial que será realizado, exclusivamente, sobre todos os spins de Heisenberg H_i .

Substituindo o Hamiltoniano (2.1) na função de partição (2.3) e expandindo esta, teremos

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{s\}} \text{tr}_\sigma \left(e^{-\beta [H_1 - \frac{\hbar}{2}(s_1 + s_2)]} \dots e^{-\beta [H_N - \frac{\hbar}{2}(s_N + s_1)]} \right). \quad (2.4)$$

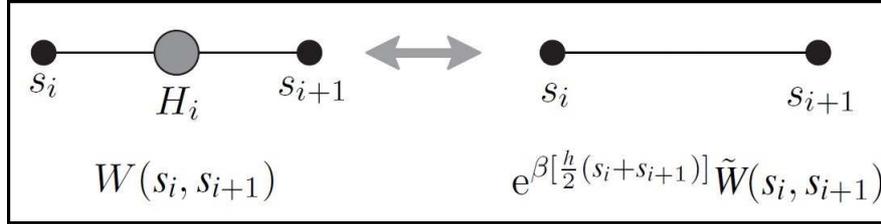


Figura 7 Representação esquemática de um modelo de Ising-decorado

Logo, a função de partição pode ser expressa em termos dos pesos de Boltzmann dado por

$$W(s_i, s_{i+1}) = e^{\beta[\frac{h}{2}(s_i+s_{i+1})]} \tilde{W}(s_i, s_{i+1}), \quad (2.5)$$

em que $\tilde{W}(s_i, s_{i+1})$ representa o traço parcial sobre σ $e^{-\beta H_i}$. Com isso, a função de partição (2.4) será

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{\{s\}} W(s_1, s_2) W(s_2, s_3) \cdots W(s_N, s_1). \quad (2.6)$$

Assim, obtemos a matriz de transferência \mathbf{T} , que é expressa por

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} e^{\beta h} \tilde{W}_{++} & \tilde{W}_{+-} \\ \tilde{W}_{-+} & e^{-\beta h} \tilde{W}_{--} \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Nota-se que os elementos de \mathbf{T} são dados em termos dos pesos de Boltzmann (2.5). Os elementos da matriz de transferência têm as linhas indicadas com o valores s_i e as colunas com os valores s_{i+1} .

Com isso, a função de partição (2.6) será dada por um produto de matrizes de transferência, ficando expressa por

$$\mathcal{Z}_N = \text{tr}_\sigma (\mathbf{T}^N). \quad (2.8)$$

Por construção, a matriz de transferência (2.7) é simétrica (SALINAS, 2008) e diagonalizável por meio de uma transformação unitária. Aplicando esta transformação na eq.(2.7) temos

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{TA} = \mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

em que \mathbf{D} é uma matriz diagonal. Estamos assumindo que existe uma matriz \mathbf{A} que possui uma matriz inversa \mathbf{A}^{-1} ($\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{1}$), sendo elas as matrizes que diagonalizam a matriz de transferência \mathbf{T} . Temos que λ_{\pm} são os autovalores da matriz de transferência (2.7) representados por

$$\lambda_{(\pm)} = \frac{1}{2} \left[e^{\beta h} \tilde{W}_{++} + e^{-\beta h} \tilde{W}_{--} \pm \sqrt{(e^{\beta h} \tilde{W}_{++} - e^{-\beta h} \tilde{W}_{--})^2 + 4\tilde{W}_{+-}\tilde{W}_{-+}} \right]. \quad (2.10)$$

Como as funções \tilde{W}_{ij} , $i, j = +, -$ são positivas, portanto, a equação (2.10) nos permite afirmar que $|\lambda_+| > |\lambda_-|$.

Para os casos em que a matriz de transferência \mathbf{T} tem dimensão 2×2 , podemos escolher as matrizes \mathbf{A} e \mathbf{A}^{-1} como (BAXTER, 1982)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \text{ e } \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

em que θ está relacionado com o autovalor λ_+ por meio da relação

$$\cos(2\theta) = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \ln \lambda_+. \quad (2.12)$$

Os elementos da matriz \mathbf{A} e \mathbf{A}^{-1} são dados de forma explícita no apêndice

A, em termos do valor da magnetização por sítio.

Desse modo, a função de partição (2.8) será

$$\mathcal{Z}_N = \text{tr} \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \quad (2.13)$$

Portanto, a função de partição pode ser escrita em termos dos autovalores da matriz de transferência. Esta quantidade será útil para calcular a energia livre de Helmholtz do modelo. O formalismo da matriz de transferência permite obter expressões analíticas exatas para alguns modelos de spin (BELLUCCI; OHANYAN, 2013).

2.1.1 Energia Livre de Helmholtz

A matriz de transferência possui algumas propriedades importantes, como a não-degenerescência do maior autovalor λ_+ , e, também, ser sempre positiva para temperaturas não nulas ($T > 0$). Esses resultados decorrem do teorema de Perron-Frobenius (LANGVILLE; MEYER, 2006), que afirma que uma matriz real quadrada, com entradas positivas, tem um único maior autovalor.

Assim, a energia livre de Helmholtz do sistema no limite termodinâmico será

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z}_N = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left\{ \lambda_+^N \left(1 + \frac{\lambda_-^N}{\lambda_+^N} \right) \right\}, \quad (2.14)$$

onde as expressões dos autovalores λ_{\pm} são dadas pela equação (2.10).

Mas, quando $N \rightarrow \infty$ (limite termodinâmico), na energia livre de Helmholtz (2.14) o termo $\left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\right)^N \rightarrow 0$, com isso a energia livre de Helmholtz

será

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln \lambda_+, \quad (2.15)$$

ou explicitamente

$$f = -\frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{1}{2} \left(e^{\beta h} \tilde{W}_{++} + e^{-\beta h} \tilde{W}_{--} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\left(e^{\beta h} \tilde{W}_{++} - e^{-\beta h} \tilde{W}_{--} \right)^2 + 4 \tilde{W}_{+-} \tilde{W}_{-+}} \right]. \quad (2.16)$$

Este resultado é importante, pois fica evidente que, no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), a expressão da energia livre de Helmholtz, é dada apenas pelo autovalor de maior módulo λ_+ da matriz transferência \mathbf{T} .

2.2 O valor esperado e a função de correlação

A seguir serão analisadas algumas outras grandezas termodinâmicas.

2.2.1 Valor Esperado

O valor esperado representa a probabilidade de encontrar os spins numa dada configuração para o sistema em equilíbrio termodinâmico a uma temperatura. Assim, o valor esperado de $\langle s_i \rangle$ é

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{s\}} s_i e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.17)$$

sendo $\frac{e^{-\beta \mathcal{H}}}{Z_N}$ a probabilidade do sistema de spin estar na configuração s_i a temperatura T.

Substituindo o Hamiltoniano (2.1) na expressão anterior e expandindo o somatório em termos do peso de Boltzmann $W(s_i, s_{i+1})$, temos

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{s\}} s_i \prod_{j=1}^N W(s_j, s_{j+1}). \quad (2.18)$$

A expressão do peso probabilístico $W(s_j, s_{j+1})$ é dada pela equação (2.5).

Ao expandir o produtório no valor esperado (2.18) e, em seguida, agrupar as matrizes de transferências, obtemos

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{T}^{i-1} s_i \mathbf{T}^{N-(i-1)} \right). \quad (2.19)$$

Utilizando a propriedade cíclica do traço, o valor esperado (2.19) pode ser expresso como

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{T}^N s_i \right). \quad (2.20)$$

Ao aplicar as matrizes dadas na eq.(2.11), a matriz s_i pode ser escrita na base diagonal, sendo $\tilde{s}_i = \mathbf{A}^{-1} s_i \mathbf{A}$

$$\begin{aligned} \tilde{s}_i &= \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(2\theta) & -\sin(2\theta) \\ -\sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Aplicando as matrizes que diagonalizam a matriz de transferência no valor esperado (2.20), encontramos

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{A}^{-1} s_i \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{T}^N \mathbf{A} \right) = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\tilde{s}_i \mathbf{D}^N \right). \quad (2.22)$$

Logo, substituindo os termos no valor esperado (2.22) por seus respectivos valores, obtemos

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left\{ \begin{pmatrix} \cos(2\theta) & -\sin(2\theta) \\ -\sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \right\}, \quad (2.23)$$

e, após algumas manipulações algébricas, bem como tomando o limite termodinâmico, o valor esperado será

$$\langle s_i \rangle = \cos(2\theta) \equiv M_s, \quad (2.24)$$

em que M_s é a magnetização por sítio parcial correspondente ao spin de Ising (BELLUCCI; OHANYAN, 2013).

Assim como foi feito para encontrar o valor esperado do spin de Ising, será demonstrado como encontrar o valor esperado de qualquer outro operador de spin. Para isso, vamos ilustrar o cálculo do valor esperado de um operador P qualquer.

Ao tomarmos o modelo descrito pelo Hamiltoniano (2.1), no qual as informações dos operadores P estão contidos no termo H_i , portanto, o valor esperado de P_i é dado por

$$\langle P_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{s\}} P_i e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (2.25)$$

Substituindo o Hamiltoniano (2.1) e expandindo o somatório, obtemos o peso de Boltzmann $W(s_i, s_{i+1})$. Logo, os elementos da matriz de transferência \mathbf{T} (2.7) estão em termos do peso de Boltzmann e, com isso, o valor esperado (2.25) pode ser escrito como

$$\langle P_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left[\mathbf{T}^{i-1} \bar{\mathbf{P}}_i \mathbf{T}^{N-(i-1)-1} \right], \quad (2.26)$$

sendo

$$\bar{P}_i = \text{tr}_\sigma \left(P_i e^{-\beta H_i} \right), \quad (2.27)$$

e que tr_σ é o traço parcial sobre os spins decorados. Assim, a matriz \bar{P}_i pode ser escrita como

$$\bar{P}_i = \text{tr}_\sigma \left(\mathbf{U}^{-1} P_i \mathbf{U} \mathbf{U}^{-1} e^{-\beta H_i} \mathbf{U} \right) = \text{tr}_\sigma \left(\bar{P}_i e^{-\beta \tilde{H}_i} \right), \quad (2.28)$$

em que \mathbf{U} e \mathbf{U}^{-1} são as matrizes que diagonalizam o Hamiltoniano H_i e $\mathbf{U} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{U} = \mathbf{1}$. O resultado (2.28) será verdadeiro somente se os operadores H_i e s_i obedecerem à propriedade comutativa $[H_i, s_i] = 0$.

Finalmente, aplicando as eqs.(2.11) tanto em \mathbf{T} quanto em \bar{P}_i o valor esperado (2.26) será

$$\begin{aligned} \langle P_i \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left[\mathbf{A}^{-1} \mathbf{T}^{N-1} \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} \bar{P}_i \mathbf{A} \right] \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left[\mathbf{D}^{N-1} \tilde{P}_i \right], \end{aligned} \quad (2.29)$$

com $\tilde{P}_i = \mathbf{A}^{-1} \bar{P}_i \mathbf{A}$. A matriz \mathbf{D} é dada pela equação (2.9). Em seguida, substituímos na equação anterior, as matrizes correspondentes aos termos \mathbf{D}^{N-1} e \tilde{P}_i , ficando

$$\langle P_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr} \left\{ \left(\begin{array}{cc} \lambda_+^{N-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{N-1} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cc} \tilde{P}_{++} & \tilde{P}_{+-} \\ \tilde{P}_{-+} & \tilde{P}_{--} \end{array} \right) \right\}. \quad (2.30)$$

Ao aplicar o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$ e calcular o traço, o valor esperado (2.30) resulta em

$$\langle P_i \rangle = \frac{\tilde{P}_{++}}{\lambda_+}. \quad (2.31)$$

Com as operações que quantificam os valores esperados dos operadores de spin de Ising e qualquer outro operador P , pode-se determinar as funções de correlação entre os operadores de spin.

2.2.2 Função de correlação

A função de correlação de dois spins, em sítios diferentes, a temperatura T é a média térmica do produto dos spins s_i e s_{i+r} situados a uma distância r entre si (BAXTER, 1982):

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_s s_i s_{i+r} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.32)$$

sendo r a distância entre sítios i e $i + r$.

Novamente, ao substituir o Hamiltoniano (2.1), expandir o somatório em termos do peso de Boltzmann $W(s_i, s_{i+1})$, e usar a técnica da matriz de transferência \mathbf{T} (2.7), a função de correlação (2.32) pode ser escrita como

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{s\}} s_i s_{i+r} \prod_{j=1}^N W(s_j, s_{j+1}). \quad (2.33)$$

A expansão do produtório resulta em

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\underbrace{\mathbf{T} \cdots \mathbf{T}}_{i-1 \text{ vezes}} s_i \underbrace{\mathbf{T} \cdots \mathbf{T}}_{r \text{ vezes}} s_{i+r} \underbrace{\mathbf{T} \cdots \mathbf{T}}_{N \text{ vezes}} \right), \quad (2.34)$$

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{T}^{i-1} s_i \mathbf{T}^r s_{i+r} \mathbf{T}^{N-(r+i-1)} \right), \quad (2.35)$$

e, aplicando a propriedade cíclica do traço, temos

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{T}^{N-r} s_i \mathbf{T}^r s_{i+r} \right). \quad (2.36)$$

Ao utilizar as matrizes que diagonalizam a matriz de transferência na função de correlação (2.36), a função de correlação fica expressa por

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{D}^{N-r} \tilde{s}_i \mathbf{D}^r \tilde{s}_{i+r} \right). \quad (2.37)$$

Outra correlação que será apresentada é entre s e um outro operador de spin P . A correlação entre o spin s_i e o spin P_{i+r} é

$$\langle s_i P_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{s\}} s_i P_{i+r} e^{-\beta \mathcal{H}}. \quad (2.38)$$

Ao realizar o mesmo procedimento para a função de correlação entre os spins s substituindo o Hamiltoniano (2.1) e expandindo o somatório, a função de correlação (2.38) pode ser expressa em termos da matriz de transferência, escrita da seguinte forma

$$\langle s_i P_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{T}^{i-1} s_i \mathbf{T}^r \bar{P}_{i+r} \mathbf{T}^{N-(r+i-1)-1} \right), \quad (2.39)$$

$$\langle s_i P_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{T}^{N-r-1} s_i \mathbf{T}^r \bar{P}_{i+r} \right), \quad (2.40)$$

em que \bar{P}_{i+r} é a mesma expressão dada na eq.(2.28). Logo, aplicando as matrizes que diagonalizam a matriz de transferência, a função de correlação será

$$\begin{aligned}\langle s_i P_{i+r} \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{A}^{-1} \mathbf{T}^{N-r-1} \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} s_i \mathbf{A}^{-1} \mathbf{T}^r \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} P_{i+r} \mathbf{A} \right) \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{D}^{N-r-1} \tilde{s}_i \mathbf{D}^r \tilde{P}_{i+r} \right).\end{aligned}\quad (2.41)$$

Para a função de correlação entre dois operadores de spin, operador P_i localizado no sítio i e operador R_{i+r} localizado no sítio $i+r$, temos a seguinte expressão

$$\langle P_i R_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \sum_{\{s\}} P_i R_{i+r} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.42)$$

e que, após as manipulações algébricas necessárias, a função de correlação (2.42) pode ser escrita em termos da matriz de transferência, a qual resulta em

$$\langle P_i R_{i+r} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{T}^{N-r-1} \bar{P}_i \mathbf{T}^{r-1} \bar{R}_{i+r} \right), \quad (2.43)$$

com

$$\bar{R}_{i+r} = \text{tr}_\sigma \left(\bar{P}_i e^{-\beta \tilde{H}_i} \right), \quad (2.44)$$

e lembrando que o traço parcial tr_σ é realizado sobre os spins decorados.

Em seguida, aplicando as matrizes que diagonalizam a matriz de transferência, a função correlação é

$$\begin{aligned}\langle P_i R_{i+r} \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{A}^{-1} \mathbf{T}^{N-r-1} \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} P_i \mathbf{A}^{-1} \mathbf{T}^{r-1} \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} R_{i+r} \mathbf{A} \right) \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \text{tr}_s \left(\mathbf{D}^{N-r-1} \tilde{P}_i \mathbf{D}^{r-1} \tilde{R}_{i+r} \right).\end{aligned}\quad (2.45)$$

Um modo alternativo para obter este resultado, também, pode ser encontrado em (FISHER, 1959; ROJAS; VALVERDE; SOUZA, 2009).

Com o formalismo da matriz de transferência, também, podemos obter o valor esperado e a função de correlação, que serão úteis para estudar a cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg, a qual será discutida na Seção 4.

3 EMARANHAMENTO

Nesta seção, apresentaremos as discussões sobre emaranhamento que tiveram início com a publicação do artigo onde foi introduzido o fenômeno conhecido como paradoxo EPR, sigla que referencia o artigo publicado em 1935 por A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen, no qual os autores questionaram a completude da mecânica quântica (AGUIAR, 2011). O assunto, também, gerou o interesse de Schrödinger, que discutiu sobre a estranheza do fenômeno, sendo, historicamente, o autor da palavra “emaranhamento” (AGUIAR, 2011). Isso levou Schrödinger a propor um experimento mental (gato de Schrödinger) (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935), que explica como um estado quântico é dito emaranhado, ou seja, um estado quântico possui estados superpostos, antes de se realizar uma medida.

Serão apresentados, a seguir, os conceitos básicos da mecânica quântica. Depois discutiremos o emaranhamento de formação como um método de quantificar o emaranhamento.

3.1 Sistema Quântico

Nesta parte, apresentamos os conceitos básicos da mecânica quântica dos sistemas de dimensão finita, essenciais para a compreensão dos conceitos sobre emaranhamento de formação e emaranhamento térmico.

A mecânica quântica é a teoria física mais adequada, para descrever o comportamento de diversos sistemas físicos microscópicos como, por exemplo, os átomos. Ela impõe quais são os objetos que descrevem os estados do sistema, as suas grandezas físicas associadas e as regras a que eles devem obedecer (AMARAL, 2010).

Um estado puro, que descreve um sistema quântico de 1 partícula, na notação de Dirac, é representado por um vetor de estado $|\psi\rangle$ pertencente ao espaço de Hilbert \mathbb{H} (GRIFFITHS, 2005). Qualquer vetor $|\psi\rangle$ do espaço de Hilbert pode ser decomposto numa base $\{|\phi_i\rangle\}$,

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n a_i |\phi_i\rangle \quad (3.1)$$

em que o coeficiente a_i é um número complexo que representa a amplitude de probabilidade. Escolhemos a base $\{|\phi_i\rangle\}$ como sendo ortonormal e completa,

$$\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij} \quad (3.2)$$

e

$$\sum_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i| = \mathbf{1}, \quad (3.3)$$

onde $\mathbf{1}$ é o operador identidade do espaço de Hilbert do sistema quântico. Os vetores $|\psi\rangle$ têm norma 1, ou seja

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1. \quad (3.4)$$

Como consequência da ortonormalidade obtemos

$$\sum_i |a_i|^2 = 1, \quad (3.5)$$

que nos mostra a natureza probabilística de $|a_i|^2$. O resultado (3.5) nos afirma que o sistema quântico tem que estar num dos estados i da base $\{|\phi_i\rangle\}$, uma vez que esta é completa.

De modo análogo o vetor do espaço dual é decomposto na base dual $\langle \phi_i |$,

$$\langle \psi | = \sum_{i=1}^n a_i^* \langle \phi_i |, \quad (3.6)$$

sendo a_i^* o complexo conjugado de a_i .

Podemos definir, desta forma, um operador do tipo $|\psi\rangle \langle \psi|$, representado por uma matriz ρ , denominada operador densidade (COHEN-TANOUDJI; DIU; LALOË, 2005), da seguinte maneira

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (3.7)$$

Note que fases globais, tais como $|\psi'\rangle = e^{i\alpha} |\psi\rangle$ não contribuem para o operador densidade ρ ,

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi| = |\psi'\rangle \langle \psi'|. \quad (3.8)$$

O operador densidade, que representa os estados do sistema, são operadores, positivamente, definidos no espaço \mathbb{H} (COHEN-TANOUDJI; DIU; LALOË, 2005), cujo traço é $\text{tr}(\rho) = 1$.

Desta forma, o operador densidade geral que descreve um sistema quântico num estado de mistura, pode ser escrito como uma superposição de operadores densidade puros, como

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i; \quad \text{com} \quad \sum p_i = 1, \quad (3.9)$$

em que p_i é a probabilidade estatística clássica do sistema estar no estado $|\phi_i\rangle$. Num estado de mistura não temos o fenômeno de interferência entre 2 estados quânticos puros como temos na superposição (3.1).

Um estado puro de 2 partículas é dito separável (BENNETT et al., 1996), quando puder ser escrito como o produto direto de 2 estados de 1 partícula cada,

$$|\Psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle. \quad (3.10)$$

O vetor do estado de uma partícula não se altera, ao se realizarem operações na outra partícula, como por exemplo (operações do tipo $\mathbf{1} \otimes |\psi_B\rangle$ ou $|\psi_A\rangle \otimes \mathbf{1}$); estados deste tipo são chamados separáveis (AGUIAR, 2011).

Se um estado puro não puder ser escrito na forma de um estado produto, como no caso anterior, teremos um estado emaranhado, por exemplo, um dado estado singleto de 2 partículas com spin- $\frac{1}{2}$:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle), \quad (3.11)$$

em que $|+\rangle_i$ e $|-\rangle_i$, com $i = 1, 2$, representam spin para cima e spin para baixo, respectivamente, da partícula i . Estes vetores de estado são autoestados do operador spin σ^z . O vetor de estado (3.11) descreve um estado puro emaranhado (AGUIAR, 2011).

Por meio do operador densidade ρ , descrevemos um sistema quântico composto AB e, considerando este operador, obtemos um operador densidade que descreve apenas um de seus sub sistemas. Por exemplo, para o estado singleto (3.11), podemos representar o estado de uma das partículas calculando-se a matriz densidade reduzida de um dos sistemas. Sendo assim,

$$\rho_A = \text{tr}_B(\rho) \quad (3.12)$$

o operador densidade reduzida que descreve o sistema A e, analogamente,

$$\rho_B = \text{tr}_A(\rho) \quad (3.13)$$

representa o operador densidade reduzida para o sistema B.

A medida de emaranhamento é de difícil determinação, porém, dentre as formas existentes, o emaranhamento de formação será o utilizado neste trabalho.

3.2 Emaranhamento de formação de dois qubits

Um qubit é um sistema quântico, ao qual está associado um espaço de Hilbert de dimensão dois, comumente chamado de sistema quântico de dois níveis. O nome vem da analogia com o sistema clássico de dois níveis que, em computação clássica, é chamado de bit (AMARAL, 2010).

O sistema de dois qubits é o sistema mais simples que apresenta emaranhamento, em que o espaço de Hilbert dos estados é dado por $\mathbb{H} \otimes \mathbb{H}$, sendo \mathbb{H} o espaço de cada qubit (AMARAL, 2010).

A definição de emaranhamento pode ser expressa como um fenômeno que permite a dois ou mais estados estarem ligados de tal forma que não se consegue mencionar um sem que os demais não sejam mencionados, independente da superposição dos dois estados.

Talvez a mais básica das formas de quantificar o emaranhamento é o emaranhamento de formação, que tem a intenção de quantificar os recursos necessários para criar um determinado estado emaranhado (WOOTERS, 1998).

No que diz respeito ao emaranhamento, um estado puro bipartido (3.10) é totalmente parametrizado por $E(\Psi)$, com $E(\Psi)$ sendo o número de singletos necessários para preparar um sistema no estado - que é o “emaranhado de

formação” (BENNETT et al., 1996).

O emaranhamento de formação, denominado de emaranhamento a partir de agora, pode ser definido em termos do menor número de singletos puros necessários para criar o estado quântico (HILL; WOOTTERS, 1997).

O emaranhamento será definido, matematicamente, da seguinte forma: dado o estado misto de estados puros descrito pelo operador densidade (3.9), o emaranhamento de ρ , $E(\rho)$, é definido como o mínimo, sobre todos esses conjuntos, do emaranhamento médio dos estados puros (WOOTTERS, 1998), ficando o conjunto

$$E(\rho) = \min \sum_i p_i E(\Psi_i). \quad (3.14)$$

O emaranhamento é convenientemente medido pela entropia de emaranhamento

$$E(\Psi) = S(\rho_A) = S(\rho_B), \quad (3.15)$$

onde $S(\rho) = -\text{Tr} \rho \log_2 \rho$ é a entropia de von Neumann, com ρ_A e ρ_B sendo as expressões (3.12) e (3.13), respectivamente.

O emaranhamento faz o uso do que pode ser chamado de transformação *spin – flip* que é uma função aplicável aos estados de um número arbitrário de qubits (WOOTTERS, 1998). Esta transformação inverte o sentido do spin e que, para o caso de dois qubits, será expressa por

$$\tilde{\rho} = \sigma_A^y \otimes \sigma_B^y \rho^* \otimes \sigma_A^y \otimes \sigma_B^y, \quad (3.16)$$

em que ρ^* é o conjugado complexo do operador ρ e com σ_A^y (σ_B^y) sendo a matriz de Pauli para cada subsistema A (B), respectivamente, dada por

$$\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.17)$$

A transformação *spin – flip* (3.16), para o caso de dois qubits, é escrita na base $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$, e são equivalentes à “base mágica” apresentada por Bennett et al. (1996).

O emaranhamento (3.15) pode ser reescrito por

$$E(\Psi) = \mathcal{E}(\mathcal{C}(\Psi)), \quad (3.18)$$

onde \mathcal{C} é a concorrência expressa por

$$\mathcal{C}(\Psi) = |\langle \Psi | \tilde{\Psi} \rangle|, \quad (3.19)$$

onde $|\tilde{\Psi}\rangle$ é o complexo conjugado de $|\Psi\rangle$. A função $\mathcal{E}(\mathcal{C})$ é definida por

$$\mathcal{E}(\mathcal{C}) = h\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 - \mathcal{C}^2}\right) \quad \text{para } 0 \leq \mathcal{C} \leq 1; \quad (3.20)$$

onde h é a função entropia binária $h(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2 (1 - x)$.

É importante mencionar que a concorrência não é uma medida de emaranhamento. Ela é apenas uma função que auxilia no cálculo do emaranhamento (sendo esta a função que mede e quantifica o emaranhamento).

Como a concorrência \mathcal{C} vai de 0 a 1, a função $\mathcal{E}(\mathcal{C})$, também, será, monotonicamente, crescente e varia de 0 a 1, de modo que se pode utilizar a concorrência como uma medida de emaranhamento (WOOTTERS, 1998).

Desta forma, tendo definida a transformação *spin-flip* (3.16) e a função (3.20), podemos definir o emaranhamento por meio da concorrência expressa por

$$\mathcal{C}(\rho) = \max \left\{ 0, \sqrt{\Lambda_1} - \sqrt{\Lambda_2} - \sqrt{\Lambda_3} - \sqrt{\Lambda_4} \right\}, \quad (3.21)$$

em que os Λ_i 's são os autovalores da matriz \mathbf{R} em ordem decrescente, definida por

$$\mathbf{R}(\rho) = \rho \tilde{\rho}, \quad (3.22)$$

neste caso Λ_1 será o maior autovalor da matriz \mathbf{R} (WOOTTERS, 1998).

O emaranhamento pode ser representado como função de sua concorrência expressa por: $\mathcal{E}(\mathcal{C}(\rho))$, assumindo $\mathcal{C}(\rho)$ uma função crescente $0 \leq \mathcal{C}(\rho) \leq 1$. Assim, para $\mathcal{E}(0) = 0$, corresponde a um estado não emaranhado, enquanto que para $\mathcal{E}(1) = 1$, corresponderá a um estado maximamente emaranhado. Desse modo, a concorrência acaba sendo um bom quantificador para o emaranhamento (PEREIRA, 2012).

Exemplo

Para ilustrar como quantificar o emaranhamento, baseando-se na concorrência, consideramos o estado singleto(3.11) que representa um dos estados de Bell (SILVA, 2011)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle). \quad (3.23)$$

Logo, o operador densidade para este estado é escrito por

$$\rho = \frac{1}{2} (|+-\rangle - |-+\rangle)(\langle+-| - \langle-+|), \quad (3.24)$$

e a base completa do sistema de 2 spins é $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$. Com isso, temos a matriz densidade completa escrita nesta base

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

De posse da matriz densidade (3.25), conseguimos, por meio da expressão (3.16), obter a matriz $\tilde{\rho}$ que, para este exemplo, é uma matriz idêntica à matriz densidade (3.25).

A fim de encontrar a concorrência (3.21) existente na matriz densidade (3.25), determinamos a matriz $\mathbf{R} = \rho\tilde{\rho}$, expressa por

$$\mathbf{R} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

A concorrência (3.21) é determinada considerando as raízes quadradas dos autovalores da matriz (3.26). Sabendo disso, pela expressão $\{\det(\mathbf{R} - \Lambda\mathbf{1}) = 0\}$, obtemos dois autovalores, 1 e 0. Desta forma a concorrência será

$$\mathcal{C}(\rho) = \max \left\{ 0, \sqrt{\Lambda_1} - \sqrt{\Lambda_2} - \sqrt{\Lambda_3} - \sqrt{\Lambda_4} \right\} = \max(0, 1) = 1. \quad (3.27)$$

Sendo o máximo da concorrência $\mathcal{C}(\rho) = 1$ o emaranhamento, em termos da concorrência $\mathcal{E}(\mathcal{C}(\rho))$, também, será, $\mathcal{E}(1) = 1$.

Por outro lado, para um sistema separável, consideramos o seguinte estado

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|++\rangle + |+-\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \otimes (|+\rangle + |-\rangle), \end{aligned} \quad (3.28)$$

ficando sua matriz densidade como

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.29)$$

Assim como na exemplo anterior, tomamos a matriz densidade (3.29), a fim de obtermos a matriz dada pela expressão (3.16)

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.30)$$

De modo análogo ao exemplo anterior, para encontrar a concorrência (3.21) da matriz densidade (3.29), precisamos determinar a matriz $\mathbf{R} = \rho\tilde{\rho}$ expressa por

$$\mathbf{R} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.31)$$

e, em seguida, encontramos os autovalores da matriz \mathbf{R} , que resulta em um valor nulo, por se tratar de uma matriz, também, nula. Dessa forma a concorrência será

$$\mathcal{C}(\rho) = \max \left\{ 0, \sqrt{\Lambda_1} - \sqrt{\Lambda_2} - \sqrt{\Lambda_3} - \sqrt{\Lambda_4} \right\} = \max(0, 0) = 0. \quad (3.32)$$

Sendo a concorrência $\mathcal{C}(\rho) = 0$, o emaranhamento em termos da concorrência $\mathcal{E}(\mathcal{C}(\rho))$, também, será, $\mathcal{E}(0) = 0$.

Foi possível verificar que estados separados possuem emaranhamento nulo, que mostra que o estado de Bell(3.23) é, maximamente, emaranhado e, o estado(3.28) é não emaranhado.

Outras formas de quantificar o emaranhamento podem ser encontradas em Aguiar (2011), Amaral (2010), Pereira (2012) e Silva (2011).

3.3 Emaranhamento térmico

Dar ao emaranhamento um caráter termodinâmico significa permitir que se possa detectar, extrair e manipular essa propriedade do ponto de vista experimental e ampliar sua aplicabilidade. Do ponto de vista tecnológico, por exemplo, teríamos o processamento da informação quântica (PINTO, 2009).

Encontramos, na referência Rigolin (2005), um trabalho mais detalhado sobre emaranhamento térmico para sistemas unidimensionais, bem como na referência Pinto (2009), um trabalho semelhante sobre o emaranhamento é discutido à temperatura finita.

O operador densidade, que descreve um sistema em equilíbrio térmico com um reservatório à temperatura T , será

$$\rho = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{\mathcal{Z}_N}, \quad (3.33)$$

em que $Z_N = \text{tr} \{e^{-\beta\mathcal{H}}\}$ é a função de partição do sistema (COHEN-TANOUDJI; DIU; LALOË, 2005).

Para um sistema de spin- $\frac{1}{2}$, sempre se pode expressar a matriz densidade reduzida em termos das matrizes de Pauli (BUKMAN; AN; LEEUWEN, 1991).

A matriz densidade ρ , que descreve a interação entre dois spins vizinhos, será escrita na base $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$. Desta forma, podemos determinar a concorrência em termos da função de correlação entre as partículas emaranhadas (AMICO et al., 2004).

A matriz densidade para um sistema, com invariância translacional, invariância de paridade e na ausência de campo magnético pode ser expressa por

$$\rho = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & z & 0 \\ 0 & z & y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b \end{bmatrix}, \quad (3.34)$$

sendo a, b, x, y e z reais, e expressos nas equações (3.35) a (3.39), a seguir.

Os termos da matriz densidade podem ser escritos em termos dos valores esperados de spins e da função de correlação. Os detalhes destes cálculos foram desenvolvidos na referência Bukman, An e Leeuwen (1991), os quais são reproduzidos no apêndice B.

Usando esses resultados, os elementos da matriz densidade podem ser

escritos como segue

$$a = \frac{1}{4} + m_z + g_{zz}, \quad (3.35)$$

$$b = \frac{1}{4} - m_z + g_{zz}, \quad (3.36)$$

$$x = \frac{1}{4} + \bar{m}_z - g_{zz}, \quad (3.37)$$

$$y = \frac{1}{4} - \bar{m}_z - g_{zz}, \quad (3.38)$$

$$z = 2g_{xx}. \quad (3.39)$$

Os termos da função de correlação de spin-spin são expressos pelas relações

$$g_{\alpha\beta} = \langle \sigma_a^\alpha \sigma_b^\beta \rangle, \quad (3.40)$$

$$m_\alpha = \frac{\langle \sigma_a^\alpha \rangle + \langle \sigma_b^\alpha \rangle}{2}, \quad (3.41)$$

$$\bar{m}_\alpha = \frac{\langle \sigma_a^\alpha \rangle - \langle \sigma_b^\alpha \rangle}{2}; \quad (3.42)$$

aqui os subíndices α e β representam as coordenadas x, y e z .

Desta forma, a concorrência(3.21) será expressa por

$$\mathcal{C} = 2\max \left\{ 0, |z| - \sqrt{ab} \right\}. \quad (3.43)$$

Portanto, uma vez conhecidos os elementos da matriz densidade em termos da função de correlação, podemos estudar as propriedades de emaranhamento térmico.

4 CADEIA DE SPIN DÍMERO-PLAQUETA ORTOGONAL COM ACOPLAMENTO ISING-HEISENBERG

Nesta seção, apresentaremos a solução exata para a cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg. Usando a simetria local de gauge do modelo, somos capazes de mapeá-lo em um simples modelo misto de spins de Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ e spins de Ising de spin-1, além de um íon anisotrópico efetivo. Em seguida, iremos discutir os diagramas de fases à temperatura zero para este modelo.

4.1 Introdução

Materiais magnéticos quasi-bidimensionais têm atraído muita atenção desde a década de 90, tais como CaV_4O_9 (TANIGUCHI et al., 1995), que tem uma estrutura em camadas, na qual os íons magnéticos V^{4+} têm spin- $\frac{1}{2}$ e formam uma rede quadrada diluída em $\frac{1}{5}$. Outro material muito estudado é o policristalino $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$, que tem uma rede de dois dímeros ortogonais bidimensional (2D) de Cu, como mostra a Figura 8. Este cuprato proporciona um sistema de spin-gap 2D no qual o estado fundamental pode ser obtido exatamente (KAGEYAMA et al., 1999; MIYAHARA; UEDA, 1999). Estes sistemas quasi-bidimensionais são topologicamente equivalentes ao modelo teórico proposto por Shastry e Sutherland (1981).

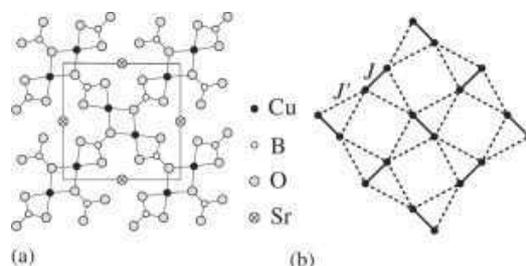


Figura 8 Representação esquemática de um policristalino $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ (KAGEYAMA et al., 1999)

Motivados pelo material acima, Ivanov e Richter (1997) propuseram uma classe de modelos unidimensionais de spin Heisenberg (cadeias de plaqueta) relacionados com os materiais reais (KAGEYAMA et al., 1999). Mediante resultados numéricos e analíticos, foram analisadas as propriedades magnéticas à temperatura zero (IVANOV; RICHTER, 1997; RICHTER; IVANOV; SCHULENBRUG, 1998), enquanto que foram discutidas as transições de fase quântica de primeira ordem, em uma cadeia dímero plaqueta frustrado de spin- $\frac{1}{2}$, na referência Schulenburg e Richter (2002). Uma investigação mais detalhada sobre a transição de fase de primeira ordem quântica da cadeia ortogonal dímero de spin, também, foi considerada por Koga, Okunishi e Kawakami (2000), assim como as transições de fase de frustração-induzida da cadeia dímero ortogonal de spin-S (KOGA; KAWAKAMI, 2002).

Mais recentemente, uma investigação foi desenvolvida por Ohanyan e Honecker (2012), em que foram discutidas as propriedades magneto-térmicas da cadeia dímero ortogonal Ising-Heisenberg com clusters triangulares XXZ. Além disso, vários modelos de Ising-Heisenberg quasi-unidimensionais como a cadeia de diamante foram intensamente investigados na última década, principalmente, suas propriedades termodinâmicas, a frustração geométrica (CĀNOVÁ; STREČKA; LUCIVJANSKY, 2009; ROJAS et al., 2011), o efeito

magneto-calórico (PEREIRA; MOURA; LYRA, 2009), o emaranhamento térmico (ANANIKIAN et al., 2012; ROJAS et al., 2012), entre outras quantidades físicas. Uma outra variante do modelo tipo Ising-Heisenberg, também, foi considerada como o modelo Ising-Hubbard (LISNII, 2011) e o modelo de Hubbard no limite quasi-atômico (ANANIKIAN et al., 2012). Além desses, o modelo de elétrons na cadeia de diamante sem spin foi estudado na referência Rojas e Souza (2011b). Recentemente, propriedades magnéticas deste modelo, também, foram estudadas sob a ação de um campo magnético externo (VERKHOLYAK; STREČKA, 2013).

4.2 Cadeia de Spin Dímero-Plaqueta Ortogonal com Acoplamento Ising-Heisenberg

A investigação teórica dos modelos dímero-plaqueta ortogonais é motivada não só do ponto de vista teórico, mas também do ponto de vista experimental. Vale ressaltar que o modelo dímero-plaqueta ortogonal Heisenberg-Heisenberg não pode ser resolvido exatamente à temperatura finita. Motivado pelas observações apresentadas anteriormente, consideramos a cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg como descrito esquematicamente na Figura 9.

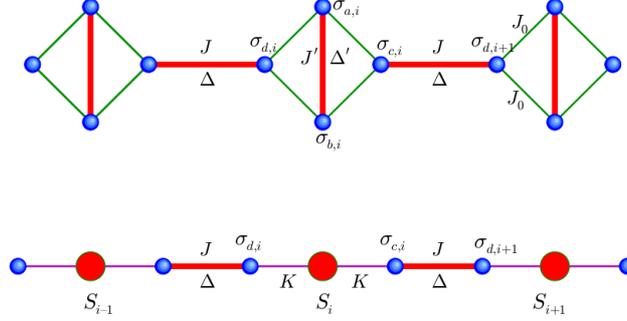


Figura 9 Representação esquemática da cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg. (Acima) A linha grossa corresponde ao acoplamento Heisenberg, enquanto a linha fina corresponde ao acoplamento Ising. (Abaixo) Dímero-plaqueta mapeado por meio da simetria local de gauge

Por conseguinte, o Hamiltoniano para a cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal será expressa por

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \left\{ J'(\sigma_{a,i}, \sigma_{b,i})_{\Delta'} + J(\sigma_{c,i}, \sigma_{d,i+1})_{\Delta} + J_0[(\sigma_{a,i}^z + \sigma_{b,i}^z)\sigma_{c,i}^z + (\sigma_{a,i+1}^z + \sigma_{b,i+1}^z)\sigma_{d,i+1}^z] \right\}, \quad (4.1)$$

com

$$J'(\sigma_{a,i}, \sigma_{b,i})_{\Delta'} \equiv J'(\sigma_{a,i}^x \sigma_{b,i}^x + \sigma_{a,i}^y \sigma_{b,i}^y) + \Delta' \sigma_{a,i}^z \sigma_{b,i}^z \quad (4.2)$$

e uma expressão semelhante para $J(\sigma_{c,i}, \sigma_{d,i+1})_{\Delta}$, sendo $\sigma_{\gamma,i}^{\alpha}$ os operadores spin ou matrizes de Pauli (com $\alpha = \{x, y, z\}$) na plaqueta i . Para partículas $\gamma = \{a, b, c, d\}$, para mais detalhes veja Figura 9. A linha grossa corresponde ao acoplamento Heisenberg, enquanto a linha fina corresponde o acoplamento Ising. O parâmetro de acoplamento Ising é denotado por J_0 . O acoplamento

de Heisenberg J, J' nas componentes x e y , e o acoplamento anisotrópico Δ, Δ' componente- z do termo de Heisenberg são para os dímeros- $ab(cd)$, respectivamente.

Para transformar este modelo no modelo misto de spin de Ising-Heisenberg, usaremos a seguinte definição: $S_i^\alpha = \sigma_{a,i}^\alpha + \sigma_{b,i}^\alpha$. Pela definição S_i^α , obtemos a identidade: $(S_i^\alpha)^2 = 2 + 2\sigma_{a,i}^\alpha \sigma_{b,i}^\alpha$. Em seguida, podemos facilmente determinar a seguinte transformação

$$J'(\sigma_{a,i}, \sigma_{b,i})_{\Delta'} \equiv \frac{J'}{2} \mathbf{S}_i^2 + \frac{\Delta' - J'}{2} (S_i^z)^2 - (2J' + \Delta'). \quad (4.3)$$

Por \mathbf{S}_i^2 designamos $\mathbf{S}_i^2 = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i$. Assim, essa matriz é dada pela relação

$$\mathbf{S}_i^2 = (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2, \quad (4.4)$$

ou explicitamente

$$\mathbf{S}_i^2 = [\sigma^x \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \sigma^x]^2 + [\sigma^y \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \sigma^y]^2 + [\sigma^z \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \sigma^z]^2.$$

Na relação acima, temos o produto direto entre as matrizes de Pauli e a identidade, que resultam em

$$\mathbf{S}_i^2 = 4 \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}. \quad (4.5)$$

Escrevendo o Hamiltoniano em termos dos operadores S_i^z e \mathbf{S}_i^2 , temos um modelo de cadeia de Ising-Heisenberg, cujo Hamiltoniano é dado por $\mathcal{H} =$

$H_0 + H'$, com $H_0 = (2J' + \Delta')N$. Portanto, o Hamiltoniano transformado é reduzido para

$$H' = - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{J'}{4} (\mathbf{S}_i^2 + \mathbf{S}_{i+1}^2) + \frac{\Delta' - J'}{4} [(S_i^z)^2 + (S_{i+1}^z)^2] + J(\sigma_{c,i}, \sigma_{d,i+1})_{\Delta} + J_0 (S_i^z \sigma_{c,i}^z + \sigma_{d,i+1}^z S_{i+1}^z) \right\}. \quad (4.6)$$

Podemos observar que a matriz (4.5) apresenta uma matriz bloco de dimensão 2×2 . Logo, pode-se diagonalizar essa matriz bloco. É interessante notar que a matriz S_i^z , ainda, é diagonal na nova base, já que possui uma matriz bloco 2×2 nula. Isso significa que podemos diagonalizar, simultaneamente, as duas matrizes S_i^z e S_i^2 , lembrando que S_i^z e S_i^2 são operadores comutativos. Assim, as matrizes diagonais podem ser escritas como

$$\mathbf{S}_i^2 = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad S_i^z = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}, \quad (4.7)$$

e com seus correspondentes autovetores expressos como segue

$$|\tau_{+1}\rangle = |+_+\rangle, \quad (4.8)$$

$$|\tau_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|_+^+\rangle + |_+^-\rangle), \quad (4.9)$$

$$|s_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|_+^+\rangle - |_+^-\rangle), \quad (4.10)$$

$$|\tau_{-1}\rangle = |_-^-\rangle. \quad (4.11)$$

O spin de Ising efetivo no Hamiltoniano (4.1) pode ser entendido como

uma composição de um estado tripleto(τ) e um estado singleto(s). O spin de Ising efetivo é dado pelo operador $S_i^z(S_{i+1}^z)$.

Essa transformação é possível no Hamiltoniano (4.6) somente se a simetria local de gauge for satisfeita quando os acoplamentos Ising $ac(ad)$ e $bc(bd)$ forem idênticos.

4.3 Diagrama de Fase à temperatura zero

Os gráficos de diagrama de fase à temperatura zero nos fornecem de forma mais clara quais são as fases da cadeia estudada, bem como as regiões onde ocorrem suas transições de fase. A cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg descrito pelo Hamiltoniano (4.1) exibe sete estados fundamentais detalhados a seguir:

- a) Dois desses estados, compostos por uma fase ferromagnética (FM) e outra fase anti-ferromagnético (AFM), expressos como

$$|FM\rangle = \prod_{i=1}^N |\uparrow\rangle_i \otimes |+\rangle_i, \quad (4.12)$$

$$|AFM\rangle = \prod_{i=1}^N |\uparrow\rangle_i \otimes |-\rangle_i, \quad (4.13)$$

com autovalores correspondentes a

$$E_{FM} = -2J' - 2\Delta' - \Delta - 4J_0,$$

$$E_{AFM} = -2J' - 2\Delta' - \Delta + 4J_0.$$

- b) Outros dois estados são compostos pelo dímero na fase tripleto-tripletto (TT)

e na fase singleto-singleto (SS)

$$|TT\rangle = \prod_{i=1}^N |\tau_0\rangle_i \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle_i + |-+\rangle_i), \quad (4.14)$$

$$|SS\rangle = \prod_{i=1}^N |s_0\rangle_i \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle_i - |-+\rangle_i), \quad (4.15)$$

em que os autovalores correspondentes tornam-se

$$E_{TT} = \Delta - 2J - 4J',$$

$$E_{SS} = \Delta + 2J.$$

Os vetores de estado $|\tau_0\rangle$ e $|s_0\rangle$ são dados pelas equações (4.9) e (4.10), respectivamente.

Vale mencionar que os estados (4.14) e (4.15) tornam-se estados frustrados quando $J = 0$ (limite de Ising), assim como também para $\Delta \neq 0$ e $J' = -2J$.

c) Também temos o estado dímero-antiferromagnético (DFA) expresso por

$$|DFA\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} |+\rangle_{2i} \otimes |\eta_{2,-2}\rangle_{2i} \otimes |-\rangle_{2i+1} \otimes |\eta_{2,-2}\rangle_{2i+1}, \quad (4.16)$$

com

$$|\eta_{2,-2}\rangle = \frac{(|+-\rangle_i + \vartheta|-+\rangle_i)}{\sqrt{1 + \vartheta^2}}, \quad (4.17)$$

e

$$\vartheta = \frac{\sqrt{4J_0^2 + J^2} + 2J_0}{J}. \quad (4.18)$$

Logo, seu correspondente autovalor é

$$E_{DFA} = -2J' - 2\Delta' + \Delta - 2\sqrt{4J_0^2 + J^2}.$$

d) Finalmente, temos dois estados frustrados(FRU) expressos por

$$|FRU_1\rangle = \prod_{i=1}^N |s_0\rangle_i \otimes |\sigma\sigma\rangle_i, \quad (4.19)$$

$$|FRU_2\rangle = \prod_{i=1}^N |\tau_0\rangle_i \otimes |\sigma\sigma\rangle_i, \quad (4.20)$$

sendo seus correspondes autovalores

$$FRU_1 = -\Delta,$$

$$FRU_2 = -4J' - \Delta,$$

e as expressões dos vetores de estados $|s_0\rangle$ e $|\tau_0\rangle$ são dadas pelas equações (4.10) e (4.9), respectivamente.

A seguir, com essas energias, iremos discutir o diagrama de fase à temperatura zero.

4.3.1 Diagrama de fase assumindo $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$

A fim de apresentar o diagrama de fases à temperatura zero, plotamos o diagrama de fase para J versus Δ , assumindo valor fixo para $J_0 = 1(-1)$ FM(AF), respectivamente.

A Figura 10(a) mostra que há uma fronteira entre o estado SS e o estado

TT para $\Delta < -2$ em $J = 0$. Enquanto que para $-2 \leq \Delta \leq 0.5$ o estado SS (TT) é limitado pela região DFA, cuja função é dada por $\Delta = 2|J| - \sqrt{4 + J^2}$, quando $J > 0$ ($J < 0$), respectivamente. Para $\Delta \geq 0.5$ o estado SS (TT) é limitado pela região FM (AFM) $\Delta = |J| - 1$. Além disso, a fronteira entre a região DFA e FM (AFM) é representado pela curva $\Delta = \sqrt{4 + J^2} - 2$.

Entretanto, na Figura 10(b) observa-se o diagrama de fases de um outro ponto de vista: Δ versus J_0 , assumindo fixo $J = 1$ (-1). Neste gráfico as fases TT e SS são exibidas na mesma região, enquanto os estados AFM e FM são ilustrados por $J_0 > 0$ ($J_0 < 0$), respectivamente. O limite entre FM (AFM) e TT (SS) é descrito por $\Delta = 1 - |J_0|$ para $|J_0| < \frac{2}{3}$. A região DFA aparece para $|J_0| > \frac{2}{3}$, que é limitado pela região TT (SS) pela curva $\Delta = 2 - \sqrt{4J_0^2 + 1}$. A fronteira entre a região DFA e FM (AFM) é descrita pela curva $\Delta = \sqrt{4J_0^2 + 1} - 2|J_0|$. Finalmente, a fronteira entre FM e AFM está em $J_0 = 0$ e $\Delta > 1$.

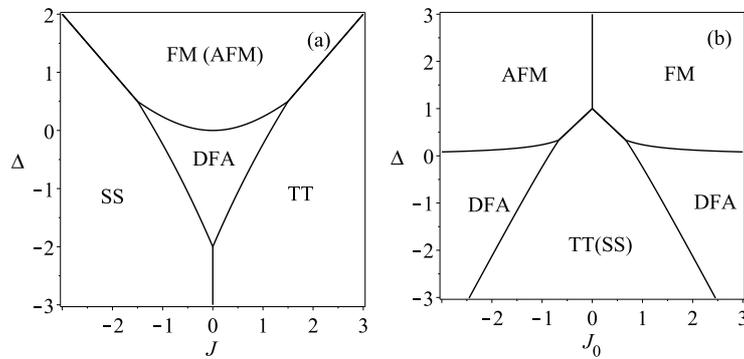


Figura 10 (a) Diagrama de fases à temperatura zero com uma dependência de Δ versus J , para um valor fixo de $|J_0| = 1$. (b) Diagrama de fases à temperatura zero com uma dependência de Δ versus J_0 , para um valor fixo de $|J| = 1$

4.3.2 Diagrama de fase assumindo $J = J'$ e $\Delta = -\Delta'$

Apresentamos, também, o diagrama de fases à temperatura zero, para J versus Δ , assumindo valor fixo para $J_0 = 1(-1)$, que corresponde à FM(AFM), respectivamente.

A Figura 11(a) ilustra para $\Delta < 0.25$ uma fronteira entre o estado TT e o estado SS com o estado DFA, e essa curva é dada por $\Delta = -J - |J| + \sqrt{J^2 + 4}$ e $\Delta = J - |J| + \sqrt{J^2 + 4}$, respectivamente. Para $-1 \leq J \leq 1$, o estado FM (AFM) é limitado pela região DFA, cuja função é dada por $\Delta = \sqrt{J^2 + 4} - 2$. Além disso, para $0.25 \leq \Delta \leq 1$ a região FM (AFM) é limitada com o estado SS e o estado TT para $J = -1$ e $J = 1$, respectivamente. Os estados FRU₁ e FRU₂ estão limitados pelos estados SS e TT, respectivamente, e a curva é representada por $|J|$. Também há um limite entre a região FM (AFM) e os estados frustrados FRU₁ e FRU₂, representados pelas funções $\Delta = J + 2$ e $\Delta = -J + 2$, respectivamente. Finalmente, a fronteira entre os estados frustrados FRU₁ e FRU₂ está em $J = 0$ e $\Delta > 2$.

Na Figura 11(b), observa-se, também, o diagrama de fases para Δ versus J_0 , assumindo fixo $J = 1(-1)$. Neste gráfico, as fases TT(SS) e FRU₁(FRU₂) são exibidas na mesma região. Aqui, a fronteira entre FM e AFM com TT (SS) é dada por $0.25 \leq \Delta \leq 1$ para $J_0 = 1(J_0 = -1)$, respectivamente. A região DFA é limitada pela região TT (SS), e descrita pela curva $\Delta = -2 + \sqrt{4J_0^2 + 1}$, para $-1 \leq J \leq 1$. A fronteira entre a região FM e AFM com DFA é descrita pelas curvas $\Delta = \sqrt{4J_0^2 + 1} - 2|J_0|$ e $\Delta = \sqrt{4J_0^2 + 1} + 2|J_0|$, respectivamente. No entanto, o limite entre a fase TT(TS) e a fase FRU₁(FRU₂) é $-1 < J_0 < 1$, assumindo $\Delta = 1$. Finalmente, o limite entre as fases FM e AFM com a fase FRU₁(FRU₂) é descrito pelas curvas $\Delta = -1 + 2J_0(-1 - 2J_0)$, respectivamente.

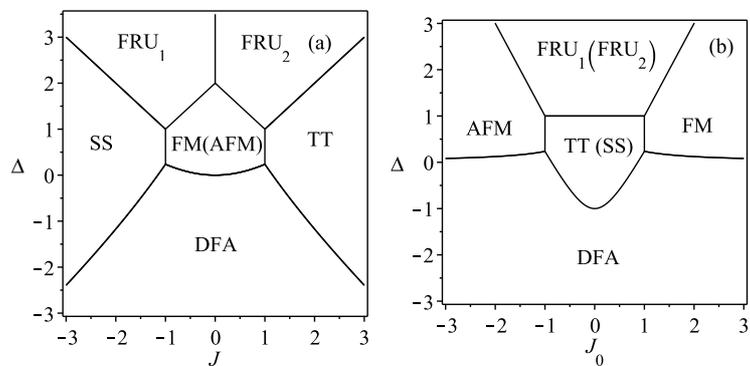


Figura 11 (a) Diagrama de fases à temperatura zero com uma dependência de Δ versus J , para um valor fixo de $|J_0| = 1$. (b) Diagrama de fases à temperatura zero com uma dependência de Δ versus J_0 , para um valor fixo de $|J| = 1$

Nessa seção, mostramos que, pelos diagramas de fase, a cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal, com acoplamento Ising-Heisenberg, possui sete estados fundamentais bem definidos.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção, mostraremos que este modelo pode ser resolvido, usando a transformação de decoração e o método da matriz de transferência, discutido na Seção 2. Posteriormente, discutiremos as propriedades termodinâmicas, tais como entropia e calor específico. Além disso, utilizando-se da função de correlação de sítios vizinhos mais próximos, também, será possível analisar o emaranhamento térmico para ambos os dímeros ortogonais. Ainda, nesta seção, discutiremos a temperatura de limiar (fronteira entre região emaranhada e não emaranhada) da região emaranhada, em função dos parâmetros do Hamiltoniano e, também, as diferenças e semelhanças de ambos os dímeros.

5.1 Termodinâmica do Modelo

A fim de estudar a termodinâmica da cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg, vamos usar a transformação de decoração, proposta na referência Rojas e Souza (2011a), juntamente com a técnica da matriz de transferência (BAXTER, 1982). Então, vamos considerar a seguinte função de partição

$$\mathcal{Z}_N = e^{-\beta H_0} \text{tr} \left(\prod_{i=1}^N e^{-\beta H'} \right), \quad (5.1)$$

em que $\beta = 1/\kappa_B T$, com κ_B sendo a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta, e assumindo H' dada pelo Hamiltoniano (4.6). Lembramos que $H_0 = (2J' + \Delta')$.

O modelo efetivo pode ser resolvido pelo método da matriz de transferência (BAXTER, 1982), já que a matriz de transferência do Hamiltoniano (4.6) é

reduzida para

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,0}x'^2 & w_{1,0} & w_{1,-1} \\ w_{1,0}x'^2 & w_{0,0}x'^4 & w_{0,0}x'^2 & w_{1,0}x'^2 \\ w_{1,0} & w_{0,0}x'^2 & w_{0,0} & w_{1,0} \\ w_{1,-1} & w_{1,0}x'^2 & w_{1,0} & w_{1,1} \end{bmatrix}, \quad (5.2)$$

sendo

$$w_{1,1} = x'^2 z'^2 [z(y^4 + y^{-4}) + z^{-1}(x^2 + x^{-2})], \quad (5.3)$$

$$w_{1,0} = x' z' [z(y^2 + y^{-2}) + z^{-1}(x_1^2 + x_1^{-2})], \quad (5.4)$$

$$w_{1,-1} = x'^2 z'^2 [2z + z^{-1}(x_2^2 + x_2^{-2})], \quad (5.5)$$

$$w_{0,0} = 2z + z^{-1}(x^2 + x^{-2}). \quad (5.6)$$

Convenientemente, introduzimos as seguintes notações $x = e^{\beta J}$, $z = e^{\beta \Delta}$, $x' = e^{\beta J'}$, $z' = e^{\beta \Delta'}$ e $y = e^{\beta J_0}$. Além disso, também, definimos as seguintes exponenciais $x_1 = e^{\beta \sqrt{J^2 + J_0^2}}$ e $x_2 = e^{\beta \sqrt{J^2 + 4J_0^2}}$.

A fim de obter os autovalores da matriz de transferência \mathbf{T} , calculamos o determinante da expressão

$$\det(\mathbf{T} - \lambda \mathbf{1}) = 0, \quad (5.7)$$

que resulta na seguinte equação para os autovalores:

$$\lambda(\lambda^2 - a_1 \lambda + a_0)(\lambda - w_{1,1} + w_{1,-1}) = 0. \quad (5.8)$$

Aqui, os coeficientes do termo quadrático da eq.(5.8) são

$$a_1 = w_{1,1} + w_{0,0}(1 + x'^4) + w_{1,-1}, \quad (5.9)$$

$$a_0 = (1 + x'^4) [w_{0,0}(w_{1,1} + w_{1,-1}) - 2w_{1,0}^2], \quad (5.10)$$

portanto, os autovalores podem ser escritos como

$$\lambda_0 = \frac{1}{2} \left(a_1 + \sqrt{a_1^2 - 4a_0} \right), \quad (5.11)$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \left(a_1 - \sqrt{a_1^2 - 4a_0} \right), \quad (5.12)$$

$$\lambda_2 = x'^2 z'^2 \left[z (y^2 - y^{-2})^2 + \frac{(x^2 + x^{-2} - x_2^2 - x_2^{-2})}{z} \right], \quad (5.13)$$

$$\lambda_3 = 0. \quad (5.14)$$

No limite termodinâmico, a energia livre por célula unitária será dada apenas pelo maior autovalor da matriz de transferência. Para nosso caso, podemos facilmente verificar que o primeiro autovalor λ_0 torna-se sempre o maior, de modo que a energia livre de Helmholtz pode ser escrita pela eq.(1.2), o que resulta em

$$f = 2J' + \Delta' - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \ln [\lambda_0^N + \lambda_1^N + \lambda_2^N + \lambda_3^N]. \quad (5.15)$$

Aplicando o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, os 3 últimos autovalores podem ser ignorados. Com isso, a energia livre por célula unitária é dada apenas pelo maior autovalor da matriz de transferência. Então a energia livre de Helmholtz se reduz a

$$f = 2J' + \Delta' - \frac{1}{\beta} \ln (\lambda_0). \quad (5.16)$$

Nota-se que a energia livre de Helmholtz é válida para os valores arbitrários de J' e Δ' . No entanto, daqui em diante, consideramos tanto no

diagrama de fase, quanto nos cálculos das propriedades termodinâmicas, os seguintes casos: $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$ de acordo com os parâmetros usados em Koga e Kawakami (2002), Koga, Okunishi e Kawakami (2000) e Schulenburg e Richter (2002). Além disso, também, consideramos o caso $J = J'$ e $\Delta = -\Delta'$, a fim de discutir outras propriedades do modelo.

5.2 Entropia

A primeira grandeza a ser discutida será a entropia ($S = -\frac{\partial f}{\partial T}$). A seguir, vamos ilustrar como é o comportamento da entropia para diferentes valores dos parâmetros do Hamiltoniano.

5.2.1 Assumindo que $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$

Nos limitaremos a analisar o caso $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$ seguindo as justificativas nas referências Koga e Kawakami (2002), Koga, Okunishi e Kawakami (2000) e Schulenburg e Richter (2002). Vamos ilustrar a entropia por sítio na Figura 12(a) para o limite de baixa temperatura como uma função de Δ versus J , enquanto que, na Figura 12(b), a entropia será ilustrada como uma função de Δ versus J_0 . A região escura corresponde à maior entropia, enquanto a região branca corresponde à entropia zero. Para o caso em que $J = 0$ e $\Delta \leq 2$ (cadeia Ising puro), quando a temperatura diminui, a linha escura permanece, levando a uma entropia residual por sítio $S_0 = 2 \ln(2)$, o que está de acordo com a entropia(1.13).

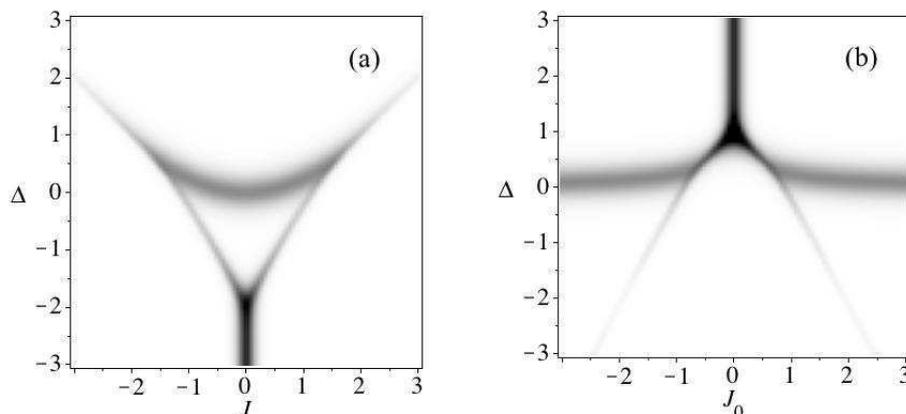


Figura 12 Gráfico da densidade para a entropia em $T = 0.2$. A região escura correspondente a um valor maior de entropia. (a) Entropia como uma dependência de J e Δ para o valor fixado de $|J_0| = 1$. (b) Entropia como uma dependência de J_0 e Δ para o valor fixado de $|J| = 1$

5.2.2 Assumindo que $J = J'$ e $\Delta = -\Delta'$

Além disso, vamos discutir as propriedades termodinâmicas para a entropia por sítio (\mathcal{S}) como ilustrado na Figura 13(a) em função de Δ versus J . Já na Figura 13(b), a entropia está ilustrada como uma função de Δ versus J_0 . A região escura corresponde à maior entropia, enquanto a região branca corresponde à entropia zero. A região cinza corresponde aos estados frustrados (4.19 e 4.20), cuja entropia residual por sítio é $\mathcal{S}_0 = \ln(2)$, assim como a entropia (1.13). Na figura (b) a faixa cinza em $J_0 = 0$ e $\Delta \leq -1$, corresponde a uma influência de um estado frustrado ($FRU_3 = \prod_{i=1}^N |\tau_{\pm 1}\rangle_i \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle_i + |-+\rangle_i)$) agindo sobre o estado DFA.

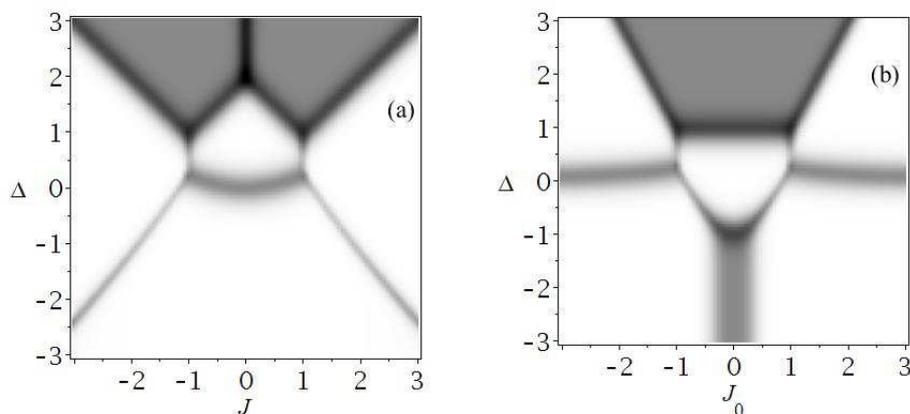


Figura 13 Gráfico da densidade para a entropia em $T = 0.2$. A região escura correspondente para alta entropia. (a) Entropia como uma dependência de J e Δ para o valor fixado de $|J_0| = 1$. (b) Entropia como uma dependência de J_0 e Δ para o valor fixado de $|J| = 1$

5.3 Calor específico

A seguir, também discutimos outra quantidade termodinâmica interessante, chamada calor específico por sítio ($C = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2}$). Será ilustrado e discutido seu comportamento para alguns valores dos parâmetros do Hamiltoniano.

5.3.1 Assumindo que $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$

Na Figura 14, plotamos o calor específico em função da temperatura T , para um parâmetro de acoplamento fixo $J_0 = 1.0$ e um valor fixo de $J = 1.0$. As linhas sólidas representam a curva do calor específico, quando $\Delta = 0$, $\Delta = -0.5$ e $\Delta = -1.0$, enquanto as linhas tracejadas ilustram o calor específico para $\Delta = 0.5$, e 1.0 .

Para o parâmetro anisotrópico $\Delta = \pm 0.5$ e 0 , o gráfico apresenta um pequeno pico anormal em baixa temperatura, em virtude da transição de fase à

temperatura zero. Para $\Delta = 0$, o sistema encontra-se na fase DFA sob influência das fases FM e TT. Já para $\Delta = +0.5$, o sistema encontra-se na fase FM sob influência das fases DFA e TT. Para $\Delta = -0.5$, o sistema se encontra na fase TT sob influência da fase DFA.

No entanto, para $\Delta = \pm 1.0$, este pico anômalo desaparece, já que os parâmetros escolhidos estão longe das transições de fase.

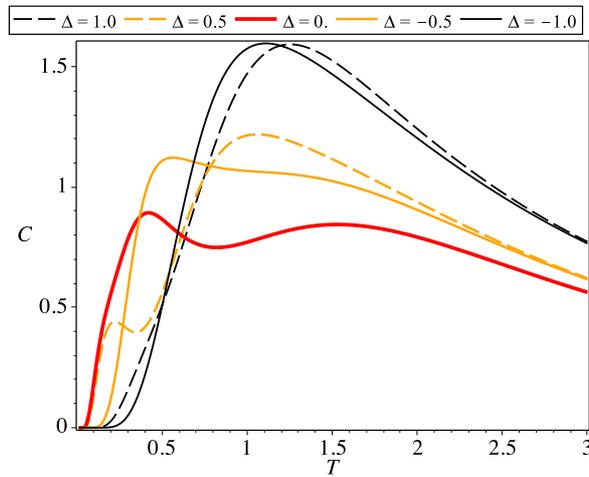


Figura 14 Calor específico em função da temperatura para vários valores do parâmetro anisotrópico assumindo valores fixos $J = 1.0$ e $J_0 = 1.0$

5.3.2 Assumindo que $J = J'$ e $\Delta = -\Delta'$

Por fim, para o conjunto de parâmetros $J = J'$ e $\Delta = -\Delta'$, a Figura 15 mostra o calor específico em função da temperatura T , para um parâmetro de acoplamento fixo $J_0 = 1.0$ e um valor fixo de $J = 1.0$. As linhas sólidas representam a curva do calor específico quando $\Delta = 0, -0.5$ e -1.0 , enquanto que, com as linhas tracejadas, ilustramos o calor específico para $\Delta = 0.5$ e $\Delta = 1.0$.

Para o parâmetro anisotrópico, $\Delta = -0.5$ e 0 , o gráfico ilustra um pequeno pico anormal. O gráfico, também, ilustra um grande pico anormal para $\Delta = +0.5$. Os picos, em baixa temperatura, são em virtude da transição de fase à temperatura zero. Entretanto, para $\Delta = 0$, o sistema se encontra na fase DFA sob influência das fases FM e TT. Já para $\Delta = -0.5$, o sistema se encontra na fase DFA sob influência da fase TT. Além disso, para $\Delta = +0.5$, o sistema está na transição entre as fases FM e TT sob influência da fase FRU_2 .

No entanto, para $\Delta = \pm 1.0$, este pico anômalo, também, desaparece, pois esta região está longe das transições de fase.

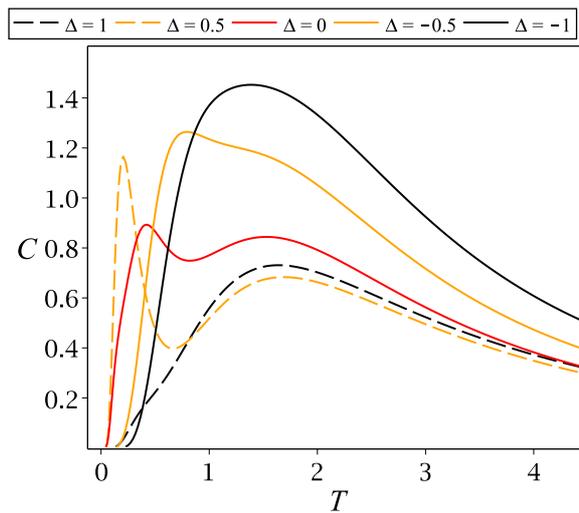


Figura 15 Calor específico, em função da temperatura, para vários valores do parâmetro anisotrópico assumindo valores fixos $J = 1.0$ e $J_0 = 1.0$

5.4 Função de Correlação

A função de correlação entre os vizinhos mais próximos do dímero será obtida derivando a energia livre de Helmholtz (5.16). Em seguida, a fim de realizar a derivada da energia livre de Helmholtz, é necessário assumir os parâmetros

J' e J como parâmetros independentes, assim como os parâmetros Δ' e Δ . Apesar do termo $2J' + \Delta'$ da energia livre de Helmholtz (5.16) ser irrelevante para algumas grandezas termodinâmicas físicas, este termo não pode ser ignorado quando calculamos a função de correlação entre primeiros vizinhos.

Apresentamos a seguir, como calcular a função de correlação entre os vizinhos mais próximos pela derivada da energia livre de Helmholtz. Para isso, tomamos a função de correlação entre os sítios $\sigma_{a,i}$ e $\sigma_{b,i}$, ambos na direção x

$$\langle \sigma_{a,i}^x \sigma_{b,i}^x \rangle = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_{a,i}^x \sigma_{b,i}^x e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (5.17)$$

onde temos a função de partição (2.3), na qual o Hamiltoniano é dado pela função (4.1).

Antes de darmos sequência, vamos definir a derivada da energia livre de Helmholtz ($f = -\frac{1}{\beta} \ln Z_N$) em termos do parâmetro J' ,

$$\frac{\partial f}{\partial J'} = \frac{\partial}{\partial J'} \left(-\frac{1}{\beta} \ln Z_N \right). \quad (5.18)$$

Aplicando a propriedade da derivada de \ln e substituindo a função de partição teremos

$$\frac{\partial f}{\partial J'} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_N} \frac{\partial}{\partial J'} \sum_{\{\sigma\}} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right). \quad (5.19)$$

Assumindo a invariância entre as direções x e y , podemos adotar a igualdade

$$\sigma_{a,i}^x \sigma_{b,i}^x = \sigma_{a,i}^y \sigma_{b,i}^y, \quad (5.20)$$

para que, ao procedermos à derivada, no segundo termo na equação (5.19), encontraremos a seguinte expressão

$$\frac{\partial f}{\partial J'} = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} \left(-2\beta \sigma_{a,i}^x \sigma_{b,i}^x e^{-\beta \mathcal{H}} \right), \quad (5.21)$$

o que nos leva ao seguinte resultado

$$\frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial J'} = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\sigma\}} \left(\sigma_{a,i}^x \sigma_{b,i}^x e^{-\beta \mathcal{H}} \right). \quad (5.22)$$

Podemos notar que o resultado nos leva à mesma expressão da função de correlação (5.17). Fica, dessa forma, justificado o fato de podermos calcular a função de correlação entre os primeiros vizinhos pela derivada da energia livre de Helmholtz e que nos leva aos resultados como expressos abaixo:

$$\langle \sigma_a^x \sigma_b^x \rangle = -\frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial J'} = -1 + \frac{x'}{2\lambda_0} \frac{\partial \lambda_0}{\partial x'}, \quad (5.23)$$

$$\langle \sigma_a^z \sigma_b^z \rangle = -\frac{\partial f}{\partial \Delta'} = -1 + \frac{z'}{2\lambda_0} \frac{\partial \lambda_0}{\partial z'}, \quad (5.24)$$

$$\langle \sigma_c^x \sigma_d^x \rangle = -\frac{1}{2} \frac{\partial f}{\partial J} = \frac{x}{2\lambda_0} \frac{\partial \lambda_0}{\partial x}, \quad (5.25)$$

$$\langle \sigma_c^z \sigma_d^z \rangle = -\frac{\partial f}{\partial \Delta} = \frac{z}{2\lambda_0} \frac{\partial \lambda_0}{\partial z}. \quad (5.26)$$

Aqui, apresentamos a relação das funções de correlação entre primeiros vizinhos em termos do maior autovalor λ_0 da matriz de transferência.

A fim de realizar nossa análise sobre a função de correlação, na Figura 16(a) apresentamos a função de correlação entre primeiros vizinhos (eqs.(5.23-5.26)) em função da temperatura, assumindo os parâmetros convenientemente fixos $J_0 = 1.0$ e $J = 1.0$, próximos à transição de fase ilustrada na Figura 10. Na Figura 16(a), exibimos para o caso de parâmetro anisotrópico $\Delta = -0.3$,

e observamos como a função de correlação entre primeiros vizinhos, à baixa temperatura, comporta-se de modo semelhante tanto para dímero- ab quanto para o dímero- cd . A função de correlação na componente z é $-1(+1)$, porque o vetor de estado do estado fundamental é $TT(SS)$, enquanto que essa função de correlação entre primeiros vizinhos nas componentes xy é positiva. No entanto, logo que a temperatura aumenta, a diferença torna-se relevante. Vale ressaltar que a função de correlação $\langle \sigma_a^z \sigma_b^z \rangle$ torna-se positiva para a temperatura finita $0.7 \lesssim T \lesssim 2.5$. Mais uma vez, a função de correlação entre primeiros vizinhos muda de sinal em torno $T \approx 2.5$, tornando-se uma pequena quantidade negativa para temperaturas mais elevadas. Da mesma forma, também, plotamos na Figura 16(b) com o parâmetro anisotrópico $\Delta = 0.3$. Os dímero- ab e dímero- cd se comportam de modo semelhante no limite de baixa temperatura. No entanto, a componente z da função de correlação é positiva, porque corresponde à região $FM(AF\bar{M})$ de acordo com os estados(4.12-4.13), já que a função de correlação entre primeiros vizinhos da componente xy é zero. Porém, para temperaturas mais elevadas, esta diferença torna-se significativa. As funções de correlação $\langle \sigma_a^x \sigma_b^x \rangle$ e $\langle \sigma_c^x \sigma_d^x \rangle$ têm um máximo à temperatura finita, enquanto que para $\langle \sigma_a^z \sigma_b^z \rangle$ é uma função monotonicamente decrescente. Além disso, $\langle \sigma_c^z \sigma_d^z \rangle$ diminui ainda mais rapidamente tornando-se negativa em $0.9 \lesssim T \lesssim 2.4$, em torno de $T \approx 2.4$, a correlação $\langle \sigma_c^z \sigma_d^z \rangle$ torna-se novamente uma quantidade positiva.

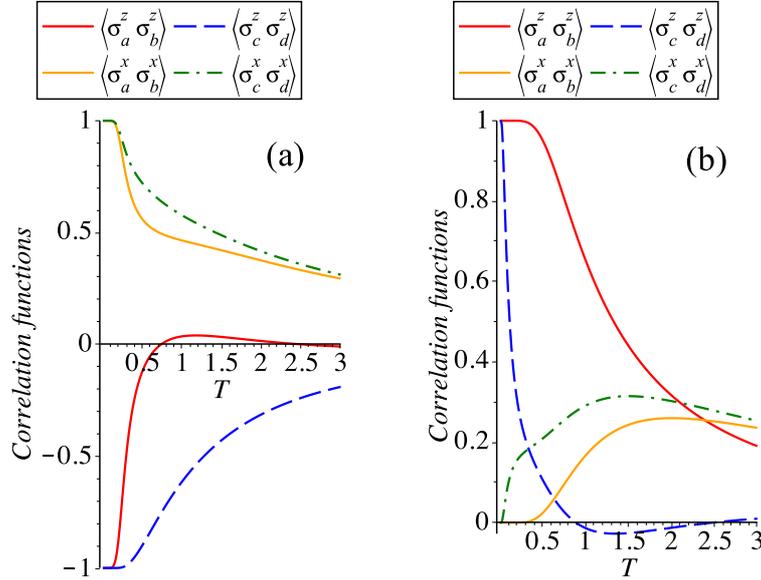


Figura 16 Função de correlação entre primeiros vizinhos para dímero- ab e dímero- cd definido pelas eqs. (5.23-5.26), assumindo fixo os parâmetros $J = 1.0$ e $J_0 = 1.0$. (a) Para o caso do parâmetro anisotrópico $\Delta = -0.3$. (b) E para o caso do parâmetro anisotrópico $\Delta = 0.3$

5.5 Emaranhamento térmico

Outra propriedade interessante que consideramos neste trabalho foi o emaranhamento quântico térmico da cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg.

As propriedades de emaranhamento quântico envolvendo uma estrutura de cadeia infinita são muito importantes, não só porque o cálculo matemático é complicado, mas também porque os materiais reais são bem representados por cadeias infinitas.

O emaranhamento quântico é um dos tipos mais interessantes de correlações que podem ser compartilhadas somente entre sistemas quânticos (GÜHNE;

TÓTH, 2009). Nos últimos anos, muitos esforços têm sido dedicados para a caracterização das propriedades de emaranhamento em sistemas de matéria condensada, que poderia ser o candidato natural para comunicação quântica e informação quântica. Neste sentido, é muito importante estudar o emaranhamento dos sistemas em estado sólido, tais como cadeias de spin (O'CONNOR; WOOTTERS, 2001). A cadeia de Heisenberg é um dos sistemas quânticos mais simples, que exhibe o emaranhamento quântico, em decorrência da interação Heisenberg no sistema de spins. Vários estudos foram realizados, para discutir a temperatura de limiar do emaranhamento térmico, entre 2 qubits, no modelo de Heisenberg, com um número finito de qubits na cadeia. O emaranhamento térmico da cadeia isotrópica de Heisenberg foi estudado na ausência (WANG, 2002) e na presença do campo magnético externo (ARNESEN; BOSE; VEDRALL, 2001).

Como uma medida de emaranhamento para dois estados mistos arbitrários de dímeros, usamos a quantidade chamada concorrência (WOOTTERS, 1998), a qual é definida em termos de matriz densidade reduzida apresentada na Seção 3.

Os elementos da matriz densidade reduzida podem ser expressos em termos da função de correlação entre primeiros vizinhos. Assim a concorrência(3.43) para o dímero- ab se torna

$$C_{ab} = \max \left\{ 0; |\langle \sigma_a^x \sigma_b^x \rangle| - \frac{1}{2} |1 + \langle \sigma_a^z \sigma_b^z \rangle| \right\}; \quad (5.27)$$

similarmente, a concorrência entre o dímero- cd será

$$C_{cd} = \max \left\{ 0; |\langle \sigma_c^x \sigma_d^x \rangle| - \frac{1}{2} |1 + \langle \sigma_c^z \sigma_d^z \rangle| \right\}. \quad (5.28)$$

Certamente, também, pode-se obter um resultado equivalente utilizando a abordagem descrita na referência Rojas et al. (2012).

Vale mencionar que o emaranhamento à temperatura zero para o dímero- ab é máximo ($C_{ab} = 1$) na região SS e TT, enquanto, na região restante, o dímero- ab se torna não emaranhado ($C_{ab} = 0$). O dímero- cd , também, é maximamente emaranhado na mesma região (SS e TT) $C_{cd} = 1$; além disso, a região DFA torna-se, também, uma região emaranhada cuja concorrência é $C_{cd} = \frac{|J|}{4J_0^2 + J^2}$, dependendo de J e J_0 . Vale observar que, para $J = 0$, a região se torna não emaranhada, o que é perfeitamente coerente, uma vez que o modelo se reduz a uma cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal Ising. Outra possibilidade especial é quando $J_0 = 0$, o dímero-plaqueta ortogonal diminui simplesmente para dímeros emaranhados independentes. Entretanto, as regiões FM e AFM são não emaranhadss $C_{cd} = 0$.

Na Figura 17, a concorrência C , em função da temperatura, é ilustrada: para $\Delta = -1$, as linhas tracejada e sólida correspondem ao dímero- ab e o dímero- cd , respectivamente. O emaranhamento do dímero- ab desaparece para $T \approx 2.9$, entretanto, para o dímero- cd , o emaranhamento desaparece em $T \approx 4.0$. Assumindo o acoplamento anisotrópico mais fraco (Δ), essa diferença se torna mais significativa, ou seja, com $\Delta = -0.24$, para o dímero- cd (linha sólida), o emaranhamento desaparece em $T \approx 2.25$; já para o dímero- ab , o emaranhamento desaparece em $T \approx 0.28$ (linha tracejada). Para um parâmetro anisotrópico ainda um pouco mais fraco, $\Delta = -0.22$, o dímero- ab torna-se não emaranhado para qualquer temperatura, enquanto que para o dímero- cd o emaranhamento desaparece em $T \approx 2.24$, sendo estas regiões emaranhadas representadas pelas fases TT e SS.

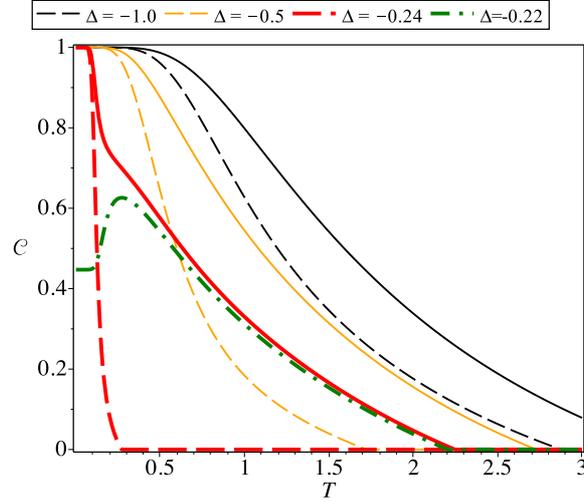


Figura 17 Concorrência para vários valores do parâmetro anisotrópico em função de T , assumindo fixo $J_0 = 1$ e $J = 1$. Linha tracejada corresponde ao dímero- ab , enquanto a linha sólida representa dímero- cd

5.6 Temperatura de Limiar

A fim de analisar as margens ou fronteiras da região emaranhada, em função da temperatura, estudamos a chamada temperatura de limiar, a qual pode ser obtida, quando a concorrência do dímero- ab torna-se nula ($|\langle \sigma_a^x \sigma_b^x \rangle| = \frac{1}{2} |1 + \langle \sigma_a^z \sigma_b^z \rangle|$) e, similarmente, para dímero- cd , a concorrência se tornará nula quando ($|\langle \sigma_c^x \sigma_d^x \rangle| = \frac{1}{2} |1 + \langle \sigma_c^z \sigma_d^z \rangle|$).

A temperatura de limiar está ilustrada na Figura 18, em função do parâmetro anisotrópico Δ para valores fixos de $J_0 = 1$ e $J = 1$. A linha tracejada corresponde à temperatura de limiar do dímero- ab , e, no limite inferior de temperatura, a temperatura de limiar vai para $\Delta = 2 - \sqrt{5}$. A linha sólida representa a temperatura de limiar do dímero- cd , e, no limite inferior, a temperatura tende para $\Delta = \sqrt{5} - 2$. Vale destacar que a temperatura de limiar

para o dímero- cd apresenta uma pequena reentrância em torno de $\Delta = 0.1$.

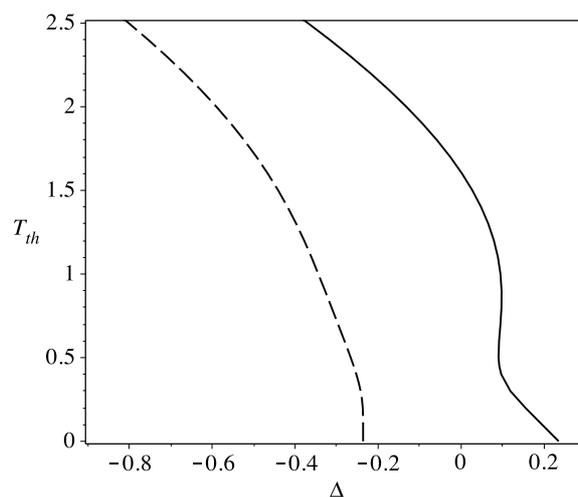


Figura 18 Temperatura de limiar T_{th} em função de Δ , para $J_0 = 1$ e $J = 1$ fixos. Linha tracejada corresponde ao dímero- ab , enquanto a linha sólida representa dímero- cd

Outra maneira de mostrar o diagrama de fase do estado emaranhado é em unidades de temperatura de limiar (T_{th}), como exibido na Figura 19. A fronteira entre a região emaranhada e a região não emaranhada é dada pela linha contínua (vermelha). A região em preto corresponde à região maximamente emaranhada, e a região branca corresponde à região não emaranhada. A região cinza claro corresponde à concorrência fraca, para a fase DFA, similarmente, o cinza escuro corresponde a uma concorrência mais forte, para as fases TT e SS. O diagrama de fase do estado emaranhado J versus Δ em unidades de T_{th} , comporta-se de forma bastante similar, tanto para o dímero- ab , quanto para o dímero- cd . Embora a região não emaranhada já apareça de forma significativa para $\Delta > -3$ e pequenos valores de J , para o dímero- ab , a região não emaranhada torna-se relevante apenas para $\Delta > -1$ e pequenos valores de J , para o dímero- cd . Certamente, isto está de

acordo com o diagrama de fase à temperatura zero apresentada na Figura 10(a).

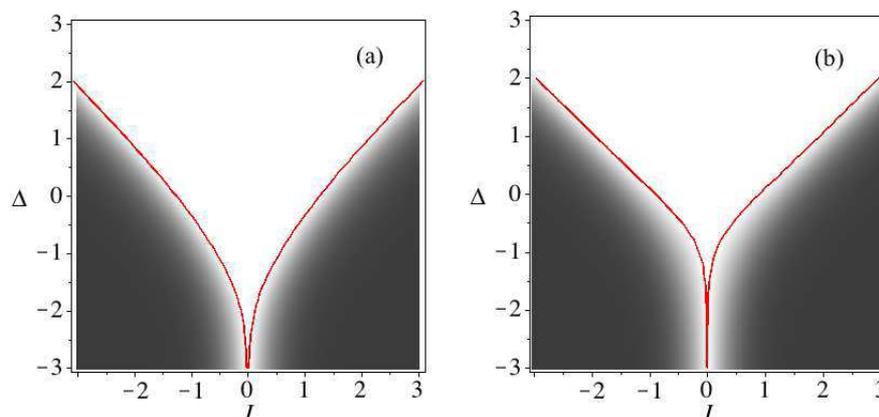


Figura 19 Gráfico de densidade para a concorrência em unidades de T_{th} . A região mais escura corresponde a um maior emaranhamento. (a) Concorrência para dímero- ab em função de Δ versus J para um valor fixo de $J_0 = 1$. (b) Concorrência para dímero- cd em função de Δ versus J para um valor fixo de $J_0 = 1$

Adicionalmente, o diagrama de fase do estado emaranhado é apresentado na Figura 20, em termos de Δ versus J_0 , mais uma vez, em unidades de T_{th} . Os diagramas de fase para o dímero- ab é dado na Figura 20(a), e o diagrama de fase para o dímero- cd é ilustrado na Figura 20 (b). Aqui, observa-se que o diagrama de fase entre o dímero- ab e cd são bastante diferentes, mas ainda estão intimamente relacionados com o diagrama de fase à temperatura zero ilustrado na Figura 20(b). As regiões mais escuras (fortemente emaranhadas) são muito semelhantes para ambos os dímeros.

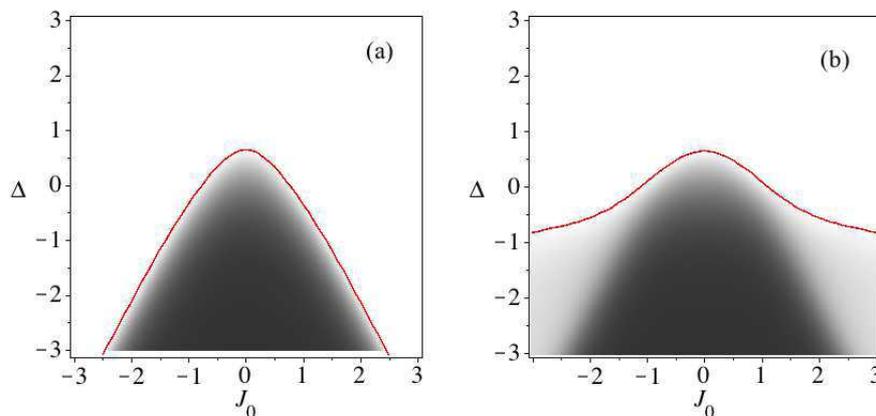


Figura 20 Gráfico de densidade para a concorrência em unidades T_{th} . A região mais escura corresponde a um maior emaranhamento. (a) Concorrência para dímero- ab em função de Δ versus J_0 para um valor fixo de $J = 1$. (b) Concorrência para dímero- cd em função de Δ versus J_0 para um valor fixo de $J = 1$

Nesta seção, apresentamos a solução exata da energia livre para este modelo. Além disso, usando esse resultado, exploramos algumas grandezas termodinâmicas do modelo, tais como entropia, calor específico e emaranhamento térmico. Para esse último, comparamos a concorrência entre os dímeros ab e cd , em que mostramos suas semelhanças e diferenças. Ressaltamos que parte destes resultados já foram discutidos na referência Paulinelli, Souza e Rojas (2013).

6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Nesse trabalho, estudou-se a cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento Ising-Heisenberg (IVANOV; RICHTER, 1997; KOGA; KAWAKAMI, 2002; KOGA; OKUNISHI; KAWAKAMI, 2000; OHANYAN; HONECKER, 2012; RICHTER; IVANOV; SCHULENBRUG, 1998; SCHULENBURG; RICHTER, 2002). Usando a simetria local de gauge desse modelo, fomos capazes de mapear o modelo em um misto de spin Heisenberg de spin- $\frac{1}{2}$ e spin de Ising de spin-1, além de um íon anisotrópico efetivo. Depois disso, esse modelo pode ser resolvido usando a transformação de decoração (FISHER, 1959; ROJAS; SOUZA, 2011b; ROJAS; VALVERDE; SOUZA, 2009; SYOZI, 1951) e o método da matriz de transferência (BAXTER, 1982). Primeiro discutimos o diagrama de fase à temperatura zero deste modelo, onde encontramos sete estados fundamentais, como ilustrado nas Figuras 10 e 11, uma fase ferromagnética (FM), uma antiferromagnética (AFM), uma fase tripleto-tripletto desordenado (TT) e singlete-singlete desordenado (SS), além de uma fase dímero-antiferromagnética(ferromagnético) (DFA) e por último duas fases frustradas (FRU_1)(FRU_2). Para $J = J'$ e $\Delta = \Delta'$ é interessante observar que, no limite do modelo de Ising puro, este exibe uma região frustrada. Além disso, são discutidas as propriedades termodinâmicas, tais como entropia, o calor específico, bem como a função de correlação. Ainda, usando a função de correlação dos sítios mais próximos, é possível analisar o emaranhamento térmico de pares tanto para dímero- ab e dímero- cd , assim como a temperatura de limiar das regiões emaranhadas em função dos parâmetros do Hamiltoniano. Ressaltamos ainda que existe algumas diferenças significativas, com o diagrama de fase do estado fundamental, entre os dois dímeros (dímero- ab e dímero- cd) que está de acordo no limite de baixa temperatura. No entanto, para um forte emaranhamento, ambos os

dímeros são bastante semelhantes. Como consequência dessa diferença, podemos ilustrar um resultado interessante, em relação ao tipo de reentrância da temperatura de limiar para dímero-*cd*, enquanto o dímero-*ab* não tem essa reentrância da temperatura de limiar.

Seria interessante, também, estudar o modelo de cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal com acoplamento de Heisenberg, por meio de cálculos numéricos e a expansão em série de altas temperaturas (ROJAS; SOUZA; THOMAZ, 2002), porque os materiais reais são melhor descritos por acoplamento Heisenberg, como o proposto por Ivanov e Richter (1997).

Como continuação natural desse trabalho, seria interessante, também, discutir a função de correlação entre dois spins distantes, para o qual seria usada a técnica da transformação de decoração. Além disso, propriedades térmicas da cadeia de spin dímero-plaqueta ortogonal Heisenberg-Heisenberg, poderiam ser estudada, usando cálculos numéricos e, também, expansão em série de altas temperaturas.

APÊNDICES

APÊNDICE A - Os termos das matrizes \mathbf{A} e \mathbf{A}^{-1}

Para iniciar, determinaremos a magnetização (2.24). Sendo assim, a magnetização será expressa por $M_s = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \ln \lambda_+$.

Após algumas manipulações algébricas, a magnetização resulta em

$$M_s = \frac{(e^{\beta h} \tilde{W}_{++} - e^{-\beta h} \tilde{W}_{--})}{\sqrt{[e^{\beta h} \tilde{W}_{++} - e^{-\beta h} \tilde{W}_{--}]^2 + 4(\tilde{W}_{+-} \tilde{W}_{-+})}}. \quad (.1)$$

Com o valor da magnetização, podemos determinar os elementos das matrizes \mathbf{A} e \mathbf{A}^{-1} na eq.(2.11).

Para isso, tomamos a propriedade trigonométrica dada por

$$\cos \theta = \sqrt{\frac{1}{2}(1 + \cos 2\theta)}, \quad (.2)$$

e substituindo a magnetização(2.24) na equação anterior, temos

$$\cos \theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + M_s} \quad \text{e} \quad \sin \theta = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - M_s}. \quad (.3)$$

Desta forma, as matrizes que diagonalizam a matriz de transferência são escritas por

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1+M_s}{2}} & -\sqrt{\frac{1-M_s}{2}} \\ \sqrt{\frac{1-M_s}{2}} & \sqrt{\frac{1+M_s}{2}} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1+M_s}{2}} & \sqrt{\frac{1-M_s}{2}} \\ -\sqrt{\frac{1-M_s}{2}} & \sqrt{\frac{1+M_s}{2}} \end{pmatrix}. \quad (.4)$$

Este resultado está de acordo com o proposto por Bellucci e Ohanyan (2013).

APÊNDICE B - Elementos da matriz densidade, em termos de valores esperados

Reproduzimos aqui os resultados obtidos na referência Bukman, An e Leeuwen (1991), em que a matriz densidade pode ser expressa em termos dos valores esperados de spin e da função de correlação do modelo.

Inicialmente introduzimos a matriz densidade reduzida para um sistema de um elemento $a(b)$, representado por $\rho_a^{(1)} \left(\rho_b^{(1)} \right)$ e descrito da seguinte maneira

$$\rho_i^{(1)} = \frac{1}{2} (1 + g_i^x \sigma_i^x + g_i^y \sigma_i^y + g_i^z \sigma_i^z). \quad (.5)$$

Aqui estamos assumindo que a matriz densidade(.5) pode ser escrita como uma combinação linear das matrizes de Pauli, e g_i^α , que são os coeficientes a serem determinados, com $\alpha = \{x, y, z\}$ e $i = a, b$.

Multiplicando a matriz de Pauli σ^x na matriz densidade(.5), temos

$$\sigma_i^x \rho_i^{(1)} = \sigma_i^x \frac{1}{2} (1 + g_i^x \sigma_i^x + g_i^y \sigma_i^y + g_i^z \sigma_i^z). \quad (.6)$$

Lembrando que o produto entre duas matrizes de Pauli resulta em uma matriz $\sigma^\alpha \sigma^\beta = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} \sigma^\gamma$ para $\alpha \neq \beta$ e $\sigma^\alpha \sigma^\beta = \mathbf{1}$ quando $\alpha = \beta$. Desta forma, é fácil verificar que o traço da eq. (.6) se simplifica. Com isso, podemos obter o coeficiente g_i^x , como segue

$$g_i^x = \text{tr}(\sigma_i^x \rho_i^{(1)}) = \langle \sigma_i^x \rangle. \quad (.7)$$

De forma análoga, podemos encontrar o valor para $g_i^y = \text{tr}(\sigma_i^y \rho_i^{(1)}) = \langle \sigma_i^y \rangle$ e para $g_i^z = \text{tr}(\sigma_i^z \rho_i^{(1)}) = \langle \sigma_i^z \rangle$. Desta forma, a matriz densidade $\rho_i^{(1)}$ fica

expressa por

$$\rho_i^{(1)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + g_i^z & g_i^x - i g_i^y \\ g_i^x + g_i^y & 1 - g_i^z \end{pmatrix}. \quad (.8)$$

Assim como foi feito anteriormente, apresentamos a matriz densidade para um modelo com dois elementos a e b

$$\rho^{(2)} = \frac{1}{4} \left(1 + \sum_i \sum_{\alpha=x,y,z} g_i^\alpha \sigma_i^\alpha + \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} g^{\alpha\beta} \sigma_a^\alpha \sigma_b^\beta \right). \quad (.9)$$

Expandindo os somatórios, temos que a matriz densidade(.9) será escrita como

$$\begin{aligned} \rho^{(2)} = \frac{1}{4} \{ & g_a^x \sigma_a^x + g_b^x \sigma_b^x + g_a^y \sigma_a^y + g_b^y \sigma_b^y + g_a^z \sigma_a^z + g_b^z \sigma_b^z + \\ & + g^{xx} \sigma_a^x \sigma_b^x + g^{yy} \sigma_a^y \sigma_b^y + g^{zz} \sigma_a^z \sigma_b^z + g^{xy} \sigma_a^x \sigma_b^y + g^{yx} \sigma_a^y \sigma_b^x + \\ & + g^{zy} \sigma_a^z \sigma_b^y + g^{yz} \sigma_a^y \sigma_b^z + g^{zx} \sigma_a^x \sigma_b^z + g^{xz} \sigma_a^z \sigma_b^x + 1 \}. \end{aligned} \quad (.10)$$

Vale ressaltar que a matriz densidade $\rho^{(2)}$ se refere a um sistema com dois elementos a e b , que estão em espaços de Hilbert distintos. Desta forma, o produto entre dois operadores σ deve obedecer à ordem dos espaços em que ocupam.

Assim como apresentado para o cálculo de g_i^α , vamos ilustrar como determinar cada coeficiente $g^{\alpha\beta}$. Inicialmente, escolhemos a componente x , por exemplo. Logo, multiplicamos pelo operador $\sigma_a^x \sigma_b^x$ cada lado da igualdade na matriz densidade(.10), e, em seguida, toma-se o traço dela, resultando em

$$g^{xx} = \text{tr} (\sigma_a^x \sigma_b^x \rho^{(2)}) = \langle \sigma_a^x \sigma_b^x \rangle. \quad (.11)$$

Este processo será análogo para qualquer outra configuração. Desta forma, podemos determinar todos os coeficientes da matriz densidade(.9).

A fim de simplificar a matriz densidade(.9), consideramos o caso da cadeia de Heisenberg XXZ que a invariância translacional é satisfeita, na qual $g^{xx} = g^{yy}$ e $g_i^x = g_i^y$, e a invariância de paridade $g^{xy} = g^{yx}$. Na ausência de campo magnético $h = 0$, temos $g_i^x = 0$. A função de correlação entre componentes distintos será nula, $g^{xy} = 0$. Levando em conta essas considerações, a matriz densidade resulta em

$$\rho^{(2)} = \begin{bmatrix} \frac{1+2m_z+g^{zz}}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+2\bar{m}_z-g^{zz}}{4} & \frac{g^{xx}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{g^{xx}}{2} & \frac{1-2\bar{m}_z-g^{zz}}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2m_z-g^{zz}}{4} \end{bmatrix}, \quad (.12)$$

sendo $m_z = g_a^z + g_b^z$ e $\bar{m}_z = g_a^z - g_b^z$.

Assim, mostramos que os elementos da matriz densidade, também, podem ser expressos em termos dos valores esperados de spins e da função de correlação.

REFERÊNCIAS

- AGUIAR, F. I. de R. **Emaranhamento em sistemas de partículas indistinguíveis**. 2011. 59 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2011.
- AMARAL, B. L. **Emaranhamento em sistemas de dois qubits**. 2010. 75 p. Dissertação (Mestrado em Matemática) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2010.
- AMICO, L. et al. Dynamics of entanglement in one-dimensional spin systems. **Physical Review A**, New York, v. 69, n. 1, p. 22304-22328, Feb. 2004.
- ANANIKIAN, N. S. et al. Thermal entanglement of a spin-1/2 Ising–Heisenberg model on a symmetrical diamond chain. **Journal of Physics: Condensed Matter**, Bristol, v. 24, n. 25, p. 256001, May 2012.
- ARNESEN, M. C.; BOSE, S.; VEDRALL, V. Natural thermal and magnetic entanglement in the 1D Heisenberg model. **Physical Review Letter**, New York, v. 87, n. 1, p. 17901-17905, May 2001.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Física do estado sólido**. São Paulo: Cengage Learning, 2011. 870 p.
- BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. New York: Academic, 1982. 486 p.
- BELLUCCI, S.; OHANYAN, V. Correlation functions in one-dimensional spin lattices with Ising and Heisenberg bonds. **The European Physical Journal B**, Orsay, v. 86, n. 11, p. 446-458, Nov. 2013.
- BENNETT, C. H. et al. Mixed State entanglement and quantum error correction. **Physical Review A**, New York, v. 54, n. 5, p. 3824-3851, Nov. 1996.
- BLUNDELL, S. **Magnetism in condensed matter**. New York: Oxford University, 2001. 238 p.

BUKMAN, D. J.; AN, G.; LEEUWEN, J. M. J. van. Cluster-variation approach to the spin-1/2 XXZ model. **Physical Review B**, New York, v. 43, n. 16, p. 13352-13364, June 1991.

CALLEN, H. B. **Thermodynamics and an introduction to thermostatics**. 2nd ed. New York: J. Wiley, 1985. 493 p.

CĀNOVÁ, L.; STREČKA, J.; LUCIVJANSKY, T. Exact solution of the mixed spin-1/2 and spin-S Ising-Heisenberg diamond chain. **Condensed Matter Physical**, Lviv, v. 12, n. 20, p. 353-368, May 2009.

COHEN-TANOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. **Quantum mechanics**. New York: J. Wiley; Hermann, 2005. v. 1, 914 p.

DIEP, H. T. **Frustrated spin systems**. Hackensack: World Scientific, 2004. 599 p.

EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Physical Review**, New York, v. 47, p. 777-779, 1935.

FISHER, M. E. Transformations of Ising models. **Physics Review**, New York, v. 113, n. 4, p. 969-981, Feb. 1959.

FLIESSBACH, T. **Curso de física estatística**. 3. ed. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 2000. 395 p.

GRIFFITHS, D. J. **Eletrodinâmica**. 3. ed. São Paulo: Pearson, 2011. 406 p.

GRIFFITHS, D. J. **Introduction to quantum mechanics**. 2nd ed. Upper Saddle River: Pearson Prentice Hall, 2005. 468 p.

GÜHNE, O.; TÓTH, G. Entanglement detection. **Physics Reports**, Bristol, v. 474, n. 1/6, p. 1-75, Apr. 2009.

HILL, S.; WOOTTERS, W. K. Entanglement of a pair of quantum bits. **Physical Review Letter**, New York, v. 78, n. 26, p. 5022-5025, June 1997.

IVANOV, N. B.; RICHTER, J. Competition between plaquette and dimer phases in Heisenberg chains. **Physics Letters A**, Amsterdam, v. 232, n. 3/4, p. 308-312, July 1997.

KAGEYAMA, H. et al. Exact dimer ground state and quantized magnetization plateaus in the two-dimensional spin system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. **Physical Review Letter**, New York, v. 82, n. 15, p. 3168-3171, Apr. 1999.

KITTEL, C. **Introdução à física do estado sólido**. 5. ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978. 572 p.

KOGA, A.; KAWAKAMI, N. Frustration-induced phase transitions in the spin-S orthogonal-dimer chain. **Physical Review B**, New York, v. 65, n. 21, p. 214415-214420, May 2002.

KOGA, A.; OKUNISHI, K.; KAWAKAMI, N. First-order quantum phase transition in the orthogonal-dimer spin chain. **Physical Review B**, New York, v. 62, n. 9, p. 5558-5563, Sept. 2000.

LAGE, E. J. S. **Física estatística**. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1995. 650 p.

LANGVILLE, A. N.; MEYER, C. D. **Google's pagerank and beyond the science of search engine rankings**. Princeton: Princeton University, 2006. 240 p.

LISNII, B. M. Distorted diamond Ising-Hubbard chain. **Low Temperature Physics**, Cham, v. 37, n. 4, p. 296-304, June 2011.

MIYAHARA, S.; UEDA, K. Exact dimer ground state of the two dimensional heisenberg spin system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. **Physical Review Letter**, New York, v. 82, n. 18, p. 3701-3704, May 1991.

NOVAK, M. A. Introdução ao magnetismo. In: ESCOLA BRASILEIRA DE MAGNETISMO, 2., 1999, Rio de Janeiro. **Anais...** Rio de Janeiro: IF-UFRJ, 1999. 1 CD-ROM.

O'CONNOR, K. M.; WOOTTERS, W. K. Entangled rings. **Physical Review A**, New York, v. 63, n. 5, p. 52302-52311, Apr. 2001.

OHANYAN, V.; HONECKER, A. Magnetothermal properties of the Heisenberg-Ising orthogonal-dimer chain with triangular XXZ clusters. **Physical Review B**, New York, v. 86, n. 5, p. 54412-54429, Aug. 2012.

PAULINELLI, H. G.; SOUZA, S. M. de; ROJAS, O. Thermal entanglement in an orthogonal dimer-plaquette chain with alternating Ising-Heisenberg coupling. **Journal Physics: Condensed Matter**, Bristol, v. 25, n. 30, p. 306003-306010, July 2013.

PEREIRA, L. J. **Emaranhamento e desigualdade de Bell no modelo XXZ**. 2012. 82 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal Fluminense, Niterói, 2012.

PEREIRA, M. S. S.; MOURA, F. A. B. F. de; LYRA, M. L. Magnetocaloric effect in kinetically frustrated diamond chains. **Physical Review B**, New York, v. 79, n. 5, p. 54427-54434, Feb. 2009.

PINTO, D. de O. S. **Emaranhamento térmico e simulações quânticas de sistemas magnéticos por ressonância magnética nuclear**. 2009. 123 p. Tese (Doutorado em Física) - Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, 2009.

PORTELA, F. S. **Efeito da diluição magnética pela dopagem com ítrio nas propriedades estruturais, microestruturais e magnéticas do pirocloro $Gd_2Ru_2O_7$** . 2010. 75 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2010.

RICHTER, J.; IVANOV, N. B.; SCHULENBRUG, J. The antiferromagnetic spin-1/2 chain with competing dimers and plaquettes: numerical versus exact results. **Journal of Physics: Condensed Matter**, Bristol, v. 10, n. 16, p. 3635-3650, Apr. 1998.

RIGOLIN, G. G. **Estado quânticos emaranhados**. 2005. 168 p. Tese (Doutorado em Física) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.

ROJAS, O. et al. Exactly solvable mixed-spin Ising-Heisenberg diamond chain with biquadratic interactions and single-ion anisotropy. **Physical Review B**, New York, v. 83, n. 9, p. 94430-94439, Mar. 2011.

ROJAS, O. et al. Thermal entanglement in an exactly solvable Ising-XXZ diamond chain structure. **Physical Review A**, New York, v. 86, n. 4, p. 42330-42338, Oct. 2012.

ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de. Direct algebraic mapping transformation for decorated spin models. **Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical**, Bristol, v. 44, n. 24, p. 245001, June 2011a.

ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de. Spinless fermion model on diamond chain. **Physics Letters A**, Amsterdam, v. 375, n. 10, p. 1295-1299, Mar. 2011b.

ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de; ANANIKIAN, N. S. Geometrical frustration of an extended Hubbard diamond chain in the quasicrystalline limit. **Physical Review E**, New York, v. 85, n. 6, p. 61123-61133, June 2012.

ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de; THOMAZ, M. T. High temperature expansion for a chain model. **Journal of Mathematical Physics**, Melville, v. 43, n. 3, p. 1390-1407, Mar. 2002.

ROJAS, O.; VALVERDE, J. S.; SOUZA, S. M. Generalized transformation for decorated spin models. **Physica A**, Amsterdam, v. 388, n. 8, p. 1419-1430, Apr. 2009.

SALINAS, S. R. A. **Introdução à física estatística**. 2. ed. São Paulo: EDUSP, 2008. 464 p.

SCHULENBURG, J.; RICHTER, J. Infinite series of magnetization plateaus in the frustrated dimer-plaquette chain. **Physical Review B**, New York, v. 65, n. 5, p. 54420-54423, Jan. 2002.

SHASTRY, B. S.; SUTHERLAND, B. Exact ground state of a quantum mechanical antiferromagnet. **Physica B**, Amsterdam, v. 108, n. 1/3, p. 1069-1070, Aug./Sept. 1981.

SILVA, S. L. L. da. **Um estudo sobre medida de emaranhamento**. 2011. 50 p. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, 2011.

SPALDIN, N. A. **Magnetic materials: fundamentals and applications**. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University, 1969. 285 p.

STREČKA, J. Generalized algebraic transformations and exactly solvable classical-quantum models. **Physical Review A**, Amsterdam, v. 374, n. 36, p. 3718-3722, Aug. 2010.

SYOZI, I. Statistics of kagome lattice. **Progress of Theoretical Physics**, Tokyo, v. 6, n. 3, p. 306-308, May/June 1951.

SYOZI, I.; NAKANO, H. Statistical models of ferrimagnetism. **Progress of Theoretical Physics**, Tokyo, v. 13, n. 1, p. 69-78, Jan. 1955.

TANIGUCHI, S. et al. Spin gap behavior of $S=1/2$ quasi-two-dimensional system CaV_4O_9 . **Journal of the Physical Society of Japan**, Tokyo, v. 64, n. 8, p. 2758-2761, Aug. 1995.

VERKHOLYAK, T.; STREČKA, J. Exact solution for a quantum spin-1/2 Ising-Heisenberg orthogonal-dimer chain with Heisenberg intradimer and Ising interdimer interactions. **Physical Review B**, New York, v. 88, n. 13, p. 134419-134428, Oct. 2013.

WANG, X. Threshold temperature for pairwise and many-particle thermal entanglement in the isotropic Heisenberg model. **Physical Review A**, New York, v. 66, n. 4, p. 44305-33409, Oct. 2002.

WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. **Physical Review Letters**, New York, v. 80, n. 10, p. 2245-2248, Mar. 1998