



UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

ARTHUR HENRIQUE FELINTO DA SILVA

**FASE DE HALDANE E FERRIMAGNETISMO EM CADEIAS DE TRÍMEROS**

Recife

2025

ARTHUR HENRIQUE FELINTO DA SILVA

**FASE DE HALDANE E FERRIMAGNETISMO EM CADEIAS DE TRÍMEROS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

**Área de Concentração:** FÍSICA TEÓRICA E COMPUTACIONAL

**Orientador (a):** Prof. Dr. Renê Rodrigues Montenegro Filho

Recife

2025

.Catalogação de Publicação na Fonte. UFPE - Biblioteca Central

Silva, Arthur Henrique Felinto da.

Fase de Haldane e ferrimagnetismo em cadeias de trímeros /  
Arthur Henrique Felinto da Silva. - Recife, 2025.  
89f.: il.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Pernambuco,  
Centro de Ciências Exatas e da Natureza, Programa de Pós-  
Graduação em Física, 2025.

Orientação: Renê Rodrigues Montenegro Filho.

Inclui referências.

1. Fase de Haldane; 2. Ferrimagnetismo; 3. Trímeros. I.  
Montenegro Filho, Renê Rodrigues. II. Título.

UFPE-Biblioteca Central

**ARTHUR HENRIQUE FELINTO DA SILVA**

**FASE DE HALDANE E FERRIMAGNETISMO EM CADEIAS DE TRÍMEROS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Área de Concentração: Física Teórica e Computacional

Data de aprovação: 29/07/2025.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. Renê Rodrigues Montenegro Filho  
Orientador  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Dr. Raí Maciel de Menezes  
Examinador Interno  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Profa. Dra. Maria Socorro Seixas Pereira  
Examinadora Externa  
Universidade Federal de Alagoas

A painho e a mainha

## AGRADECIMENTOS

A jornada de elaboração desta dissertação foi longa, repleta de desafios, mas também de inúmeros aprendizados e apoios valiosos. Muitas pessoas, com diferentes níveis de participação, contribuíram para que este trabalho se concretizasse. A todas elas, expresso minha profunda gratidão, mesmo não podendo citar nominalmente cada uma.

Aos meus amigos, pilares fundamentais ao longo de minha vida. Desde meus irmãos de Olinda, que me acompanham em todas as etapas da vida, até aqueles que a jornada me trouxe na fase adulta. Mesmo com a distância, o carinho e a presença permanecem imutáveis. A todos, meu sincero obrigado.

À minha família, que sempre esteve unida e me ofereceu suporte constante, mesmo nos momentos em que as circunstâncias nos impediram de desfrutar dos almoços de domingo ou das celebrações ao longo do ano. O amor e a união prevaleceram sempre.

Dentro deste círculo familiar, destaco com especial carinho o meu núcleo mais próximo, fonte diária de energia e inspiração. À minha companheira, Larissa Costa, que me acompanhou desde o início desta trajetória. À minha irmã, minha grande inspiração, como mulher, cidadã, professora e ser humano. Aos meus pais, Sandro Felinto e Ana Rosa, os melhores pais que alguém poderia ter. Faltam-me palavras para expressar a imensidão da minha gratidão por tudo o que fizeram e continuam a fazer por mim. Em vocês, encontro força e resiliência para seguir em frente.

Estendo meus agradecimentos a todos os profissionais que, com dedicação, fazem da universidade o que ela é e deve ser: diversa e acessível a todos. Não apenas aqueles com vínculo direto ao departamento de Física, mas também os que, em suas diversas funções, contribuíram para minha formação e jornada. Agradeço especialmente ao Professor Renê, meu orientador, cuja orientação começou antes mesmo da minha entrada no curso de Física. Sua dedicação e sorriso constante são uma verdadeira inspiração, e aspiro a me tornar um profissional tão competente e ético quanto ele.

Com imenso carinho, expresso minha gratidão aos profissionais de saúde que foram essenciais em momentos delicados da minha vida, verdadeiros salvadores. Sem o trabalho imprescindível de Carmen Jussara, Gustavo de Azevedo e Luciana Gropo, a concretização deste sonho não seria possível. A eles, reitero minha eterna gratidão.

Ao Espaço Ciência, onde me descobri e me consolidei como educador e pesquisador. Este

espaço ocupa um lugar especial em meu coração, desde a infância, quando me deslumbrava com a ciência, até a fase adulta, quando continuo a torcer por um futuro promissor para o museu e a divulgação científica.

À minha prezada banca examinadora, pelo valioso trabalho de revisão.

Finalmente, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo inestimável apoio financeiro durante o mestrado e em outros projetos cruciais para minha formação, como o PIBIC, PIBID e a Residência Pedagógica. Em especial, randeregistro meu reconhecimento à ex-presidenta Dilma Rousseff, pelo programa Ciências Sem Fronteiras, que representa um dos maiores marcos da minha trajetória acadêmica e pessoal.

## RESUMO

Esta dissertação investiga o magnetismo quântico e as fases de uma cadeia unidimensional específica: o modelo de T-trímeros. Este modelo é formado por uma célula unitária composta por um spin inteiro ( $S = 1$ ) acoplado a um spin semi-inteiro ( $S = 1/2$ ), formando o ramo principal, e outro spin semi-inteiro ( $S = 1/2$ ) pendurado, conectado ao seu correspondente por um parâmetro de troca  $J_T$ . O estudo utiliza simulações baseadas no método Density Matrix Renormalization Group (DMRG), implementado com a biblioteca ITensors.

Os resultados indicam que, para acoplamentos  $J_T > 0$ , a cadeia apresenta uma ordem ferrimagnética, com um momento magnético líquido do estado fundamental correspondente a um terço do valor máximo teórico. As curvas de magnetização apresentam um platô característico que aumenta com  $J_T$ , sugerindo que campos magnéticos consideráveis são necessários para excitar o sistema.

Para  $J_T$  negativo ( $J_T < 0$ ), o sistema é desordenado, com um gap finito. Neste regime, se o sistema tiver condições de contorno abertas, o estado fundamental é degenerado entre  $S_z = 0$  e  $S_z = 1$ . Nestas condições, o sistema exibe estados de borda, com um decaimento exponencial da magnetização local.

A análise dos platôs nas curvas de magnetização revelou uma fase similar à de Haldane para  $J_T < 0$ . Embora o platô relacionado ao gap de Haldane desapareça para  $J_T \rightarrow 0$ , para acoplamentos fortes ( $J_T \rightarrow \infty$ ), o gap extrapolado é aproximadamente 50% do valor do gap de Haldane. Duas hipóteses foram investigadas para explicar essa discrepância: a natureza mista do spin da célula unitária e a ausência de ligações simetrizadas. Modificações no modelo, como a cadeia de trímeros simetrizada e a cadeia T-modificada, foram testadas, mas ambas resultaram em gaps ainda menores. A dissertação se encerra com a sugestão de futuras investigações para entender completamente esse comportamento.

**Palavras-chaves:** Magnetismo Quântico, Cadeias de Spins Mistos, Fase de Haldane, Ferrimagnetismo, Modelo de T-trímeros, DMRG, ITensors, Gap de Haldane.

## ABSTRACT

This dissertation investigates the quantum magnetism and phases of a specific one-dimensional chain: the T-trimer model. This model is formed by a unit cell composed of an integer spin ( $S = 1$ ) coupled to a half-integer spin ( $S = 1/2$ ), forming the main branch, and an additional half-integer spin ( $S = 1/2$ ), connected to its counterpart by an exchange parameter  $J_T$ . The study employs simulations based on the Density Matrix Renormalization Group (DMRG) method, implemented with the ITensors library.

The results indicate that for couplings  $J_T > 0$ , the chain exhibits a ferrimagnetic order, with a ground state net magnetic moment corresponding to one-third of the maximum possible value. The magnetization curves feature a characteristic plateau that increases with  $J_T$ , suggesting that considerable magnetic fields are necessary to excite the system.

For negative  $J_T$  ( $J_T < 0$ ), the system is disordered, with a finite gap. In this regime, if the system has open boundary conditions, the ground state is degenerate between  $S_z = 0$  and  $S_z = 1$ . Under these conditions, the system exhibits edge states, characterized by an exponential decay of the local magnetization.

The analysis of the plateaus in the magnetization curves revealed a phase similar to the Haldane phase for  $J_T < 0$ . Although the plateau related to the Haldane gap disappears as  $J_T \rightarrow 0$ , for strong couplings ( $J_T \rightarrow \infty$ ), the extrapolated gap is approximately 50% of the Haldane gap value. Two hypotheses were considered to explain this discrepancy: the mixed-spin nature of the unit cell and the absence of symmetrized bonds. Modifications to the model, such as the symmetrized trimer chain and the modified T-chain, were tested, but both resulted in even smaller gaps. The dissertation concludes by suggesting future investigations to understand this behavior.

**Keywords:** Quantum Magnetism, Mixed-Species Spin Chains, Haldane Phase, Ferrimagnetism, T-Trimer Model, DMRG, ITensors, Haldane Gap.

## LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Em (a) a estrutura molecular do composto ferrimagnético (4-Br-o-MePy-V)FeCl<sub>4</sub>. A molécula é desenhada por pequenas esferas e suas ligações, com o distanciamento médio mostrado. Os carbonos são as esferas de cor cinza; os nitrogênios são as de cor azul; de verde, os cloros; marrom, os bromos; e as esferas que representam os ferros estão de laranja. Em (b) está a estrutura cristalina formando uma cadeia unidimensional ao longo do eixo indicado em (c); no qual é mostrada a representação da cadeia de spins, destacando os acoplamentos  $J'$  e  $J$ , e os nitrogênios ligados ao resto do conjunto representado por uma esfera roxa. O nitrogênio tem spin  $s = 1/2$  e o restante  $S = 5/2$ . . . . . 22
- Figura 2 – Representação esquemática de um composto antiferromagnético com a fase de Haldane: A cadeia é formada por esferas, onde as menores, as pretas, representam o carbono, as de cor azul são os nitrogênios. As esferas verdes representam o níquel, e as roxas, as maiores, o iodo. Os hidrogênios foram omitidos para maior legibilidade. O eixo "c" descreve a orientação da cadeia. No painel (b), o ambiente local do cristal é mostrado. . . . . 23
- Figura 3 – Estado de Néel em 2D, mostrando a configuração antiferromagnética ideal com spins alternados (azul e vermelho) e suas projeções em  $S^z$ . As setas pretas indicam a orientação dos spins. . . . . 30
- Figura 4 – Representação esquemática dos estados fundamentais dimerizados no modelo de Majumdar-Ghosh. Os círculos de cor azul indicam os spins semi-inteiros. As linhas indicam a formação de singletos entre spins vizinhos. Em (a), para uma cadeia finita orientada para direita e em (b) a esquerda. . . . 33

- Figura 5 – Representação esquemática do estado fundamental do modelo Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) como um sólido de ligações de valência (Valence-Bond Solid (VBS)). Cada spin-1 pode ser visto como uma projeção de dois spins-1/2 virtuais, que formam singletos entre sítios adjacentes, deixando spins-1/2 livres nas bordas de uma cadeia aberta. Os círculos azuis representam os spins meio virtuais que juntos formam o spin inteiro, dentro da elipse, e se ligam formando um tripleto. Os segmentos de reta formam a ligação singleto. . . . . 34
- Figura 6 – Gráfico pizza do modelo bilinear-biquadrático de spin-1, parametrizado pelo ângulo  $\theta$  tal que  $\hat{H}(\theta) = \hat{\Sigma}_j(\cos \theta \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} + \sin \theta (\vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1})^2)$ . A fase de Haldane, que é massiva ( $\Delta > 0$ ), contém tanto o ponto de Heisenberg ( $\theta = 0$ ) quanto o ponto AKLT ( $\theta = \arctan(1/3)$ ). Outras fases, como a ferromagnética e a dimerizada, também são mostradas. A ausência de um ponto crítico quântico entre os pontos de Heisenberg e AKLT indica que eles pertencem à mesma fase topológica. . . . . 35
- Figura 7 – Diagrama de fases esquemático para o modelo de grande anisotropia (*Large-D model*) em cadeias de spin-1. A figura ilustra a fase de Haldane e sua transição para uma fase paramagnética trivial quando a anisotropia  $D$  é suficientemente grande. O fechamento do gap ocorre nos pontos críticos quânticos que separam essas fases. . . . . 37
- Figura 8 – Classificação geral das fases quânticas com gap, organizada com base na presença de quebra de simetria espontânea e na natureza de seu emaranhamento quântico. As fases SPT, como a fase de Haldane, são caracterizadas por emaranhamento de curto alcance e ausência de quebra de simetria, mas são topologicamente distintas das fases triviais. A ordem topológica intrínseca, por outro lado, é definida pelo emaranhamento de longo alcance. 39
- Figura 9 – Objetos usados no DMRG. (a) Sítio unitário; (b) Bloco de múltiplos sítios; (c) Bloco estendido (bloco + sítio ponte); (d) Superbloco (sistema completo). 42
- Figura 10 – Representação esquemática da primeira iteração do DMRG. (1) Adição dos sítios-ponte; (2) Formação do Superbloco inicial; (3) Atualização do bloco direito após truncagem. . . . . 43

- Figura 11 – Modelo iterativo do DMRG representado esquematicamente. O processo de varredura é mostrado por etapas: bloco da esquerda crescendo; bloco da esquerda restando apenas um sítio; a virada, com o bloco da direita diminuindo até restar um sítio; por fim, o bloco da esquerda voltando a diminuir até voltar ao tamanho original. Assim, uma varredura é completada. 45
- Figura 12 – Método do MPS ilustrado. Inicialmente um tensor com muitas entradas é fatorado em várias matrizes. . . . . 47
- Figura 13 – Energia do estado fundamental de uma cadeia de Heisenberg com spin  $S = 1/2$  em função do número inverso de sítios. De vermelho estão os pontos obtidos pela simulação. O ajuste linear dos mesmos é representado pela reta preta. Foram simulados cinco tamanhos de cadeia  $N = 100, 200, 300, 400$  e  $500$ . . . . . 51
- Figura 14 – Energia do estado fundamental por sítio de cadeias quânticas em função do número inverso de sítios. De vermelho estão os pontos obtidos através da simulação e de preto está a reta que foi ajustada através dos mesmos. Foram simulados cinco tamanhos de cadeia  $N = 100, 200, 300, 400$  e  $500$ . 52
- Figura 15 – Energia do estado fundamental por sítio de cadeias quânticas em função do número inverso de sítios. De vermelho estão os pontos obtidos através da simulação e de preto está a reta que foi ajustada através dos mesmos. Foram simulados cinco tamanhos de cadeia  $N = 100, 200, 300, 400$  e  $500$ . 53
- Figura 16 – Curvas de magnetização ( $m$ ) em função do campo magnético externo ( $h$ ) para diferentes configurações de cadeia e tamanhos  $N$ . Resultados para  $N = 40, 80$  e  $120$ . Cadeia de Heisenberg  $S=1/2$ . Cadeia de Heisenberg  $S=1$ . Cadeia mista de Heisenberg com spins alternados. Cadeia AKLT  $S=1$ . 55
- Figura 17 – Representação esquemática da cadeia T-Trímeros. Cada unidade celular contém: (1) um spin-1 no sítio A (vermelho), (2) um spin-1/2 no sítio B (azul, ramo principal), e (3) um spin-1/2 no sítio C (azul, pendurado). As interações  $J_0$  (linha sólida) conectam os sítios A-B e B-A entre células, enquanto  $J_T$  (linha tracejada) conecta B-C dentro da mesma célula. . . . . 57

|  |    |
|--|----|
| Figura 18 – Energia do estado fundamental por sítio ( $E_0/N$ ) da cadeia T-trímeros em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de $J_T$ (ferromagnéticos e antiferromagnéticos). Os pontos representam os dados obtidos por DMRG e as linhas contínuas indicam extrapolações para o limite termodinâmico ( $1/N \rightarrow 0$ ). . . . .   | 61 |
| Figura 19 – Energia no setor $S^z = 0$ (linha preta) e setor excitado ( $S^z = 40$ ) para $N = 120$ em função do acoplamento $J_T$ . A degenerescência contrasta o comportamento para $J_T$ positivo e negativo. . . . .   | 62 |
| Figura 20 – Perfis de magnetização local para $J_T > 0$ (Fase Ferrimagnética) com $N = 480$ sítios. Em (a) a magnetização local $\langle S_i^z \rangle$ em função da posição do sítio $i$ para a cadeia de T-trímeros com $J_T = 0,5$ e $J_T = 1$ (comportamento ferrimagnético). Em (b) a magnetização local é mostrada em função do $j$ -ésimo trímero. . . . .  | 63 |
| Figura 21 – Perfis de magnetização local para $J_T < 0$ . A subfigura (a) mostra a configuração no setor $S^z = 0$ , onde os momentos antiparalelos nas bordas <b>decaem exponencialmente em direção ao bulk</b> . A subfigura (b) mostra o estado triplo no setor $S^z = 1$ com magnetização paralela nas extremidades. O decaimento exponencial em direção ao centro da cadeia, sendo mais rápido para $ J_T $ maiores, evidencia a natureza localizada dos estados de borda, característica da fase com gap. Gráfico feito para $N = 720$ . . . . . | 64 |
| Figura 22 – (a) . . . . .  | 64 |
| Figura 23 – (b) . . . . .  | 64 |
| Figura 24 – Perfis de magnetização local para $J_T < 0$ mostrando configuração tipo Haldane no setor $S^z = 2$ , o primeiro estado excitado. Gráfico feito para $N = 720$ . . . . .  | 64 |
| Figura 25 – Magnetização local por trímero em função da localização do trímero ( $j$ ) para $n_T = 240$ trímeros (equivalente a $N = 720$ sítios). Em cada gráfico foram utilizados cinco acoplamentos $J_T$ : -0,5; -1; -2; -3 e -4. A representação por trímero amplia a clareza dos estados de borda, mostrando como a magnetização decai rapidamente em direção ao centro da cadeia. Perfil de magnetização em (a), (b) e (c) para $S^z = 0, 1$ e $2$ respectivamente. . . . .   | 65 |
| Figura 26 – Logaritmo do módulo da magnetização local $\ln  \langle S_j^z \rangle $ em função da posição do trímero $j$ para a cadeia de T-trímeros com $J_T$ negativo, no setor $S^z = 0$ . . . . .   | 66 |

|   |    |
|---|----|
| Figura 27 – Curvas de magnetização da cadeia T-trímeros em função do campo magnético ( $h$ ) para três tamanhos de cadeia: $N = 120, 240, 480$ . Acoplamento (a) $J_T = 0,5$ e (b) $J_T = 1$ . . . . .  | 68 |
| Figura 28 – Curvas de magnetização ( $m$ ) em função do campo magnético externo ( $h$ ) para três tamanhos de cadeia: $N = 120, 240, 480$ . Os acoplamentos utilizados foram de (a) $J_T = -0,5$ ; (b) $J_T = -1$ ; (c) $J_T = -2$ ; (d) $J_T = -3$ ; e (e) $J_T = -4$ . . . . .  | 69 |
| Figura 29 – Largura dos platôs de magnetização centrais ( $\Delta h$ ) em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de $J_T$ negativos. As linhas indicam extrapolações para o limite termodinâmico ( $1/N \rightarrow 0$ ). . . . .  | 71 |
| Figura 30 – Largura do platô central de magnetização no limite do acoplamento fraco e forte, respectivamente em função de $J_T$ (a) e $1/J_T$ (b) para acoplamentos negativos. De vermelho os pontos obtidos via extrapolação no limite termodinâmico. De preto, a curva com ajuste exponencial em (a) e polinomial em (b). . . . . | 71 |
| Figura 31 – Gap ( $\Delta$ ) da cadeia T-trímeros em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de $J_T$ negativos. Os pontos representam os dados obtidos por DMRG e as linhas contínuas indicam extrapolações para o limite termodinâmico ( $1/N \rightarrow 0$ ). . . . .                           | 72 |
| Figura 32 – Gap de energia ( $\Delta$ ) no limite do acoplamento fraco e forte, respectivamente em função de $J_T$ (a) e $1/J_T$ (b) para acoplamentos negativos. O ajuste feito foi do tipo polinomial nos dois gráficos. . . . .  | 74 |
| Figura 33 – Estrutura simétrica da cadeia T-simetrizada. Cada spin-1 (A) conecta-se a dois spins-1/2 (B acima e C abaixo) formando um “T”. Os spins B conectam-se entre células via $J_0$ , enquanto cada par B-C conecta-se via $J_T$ . Os spins B e C também conectam-se ao spin A adjacente com $J_0$ . . . .                    | 75 |
| Figura 34 – Gap de energia ( $\Delta$ ) para a cadeia T-simetrizada em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de $J_T$ . O gráfico foi construído para três valores de $N = 60, 90$ e $120$ . . . . .  | 75 |
| Figura 35 – Gap de energia ( $\Delta$ ) no limite do acoplamento fraco e forte, respectivamente em função de $J_T$ (a) e $1/J_T$ (b) para acoplamentos negativos. O ajuste feito foi do tipo polinomial nos dois gráficos. . . . .  | 76 |

|  |    |
|--|----|
| Figura 36 – Representação modificada da cadeia T-Trímeros. Agora cada spin-1/2 pendurado (sítio C) está acoplado diretamente ao spin-1 (sítio A) mediante $J_C$ (linha pontilhada), enquanto os spins-1/2 do ramo principal (sítio B) continuam conectados via $J_0$ (linha sólida). Representação da cadeia T-deslocada, com acoplamento do spin pendurado ao spin-1 da cadeia principal. | 76 |
| Figura 37 – Gap de energia ( $\Delta$ ) para a cadeia T-deslocada (spin-1/2 pendurado no spin-1) em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de $J_T$ . O gráfico foi construído para três valores de $N = 60, 90$ e $120$ .  | 77 |
| Figura 38 – Largura do platô central de magnetização no limite do acoplamento fraco e forte, respectivamente em função de $J_T$ (a) e $1/J_T$ (b) para acoplamentos negativos. De vermelho os pontos obtidos via extrapolação no limite termodinâmico. De preto, a curva com ajuste exponencial em (a) e polinomial em (b).  | 77 |
| Figura 39 –  | 77 |
| Figura 40 –  | 77 |
| Figura 41 – Espectro de Schmidt ( $-2 \ln \lambda_i$ ) em função de $J_T$ . <b>Degenerescência par</b> em todos os níveis. Valores obtidos para $N = 720$ sítios.  | 79 |

## LISTA DE TABELAS

|  |    |
|--|----|
| Tabela 1 – Gap de Haldane da cadeia de spin $S = 1$ comparado com o modelo AKLT. . . . .   | 54 |
| Tabela 3 – Parâmetros principais utilizados nas simulações DMRG. . . . .   | 59 |
| Tabela 5 – Comprimentos de correlação ( $\xi$ ) da cadeia de T-trímeros para diferentes valores de acoplamento $J_T$ negativos em cadeias com $n_T = 240$ trímeros. . . . .  | 67 |
| Tabela 7 – Larguras dos platôs ( $\Delta h$ ) e valores do gap ( $\Delta$ ) para acoplamentos $J_T$ negativos na cadeia T-trímeros. Os valores igualados a zero referem-se a extrapolações que indicam gaps muito pequenos, dentro do erro numérico. . . . . | 73 |

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

|             |                                      |
|-------------|--------------------------------------|
| <b>AFM</b>  | antiferromagnético                   |
| <b>AKLT</b> | Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki          |
| <b>DMRG</b> | Density Matrix Renormalization Group |
| <b>LSM</b>  | Lieb-Schultz-Mattis                  |
| <b>MPS</b>  | Matrix Product States                |
| <b>SPT</b>  | Symmetry-Protected Topological       |
| <b>SSB</b>  | Spontaneous Symmetry Breaking        |
| <b>TFQ</b>  | Transição de Fase Quântica           |
| <b>VBS</b>  | Valence-Bond Solid                   |

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\gamma$  Letra grega Gama

$\in$  Pertence

$\delta$  Delta

$\theta$  Teta

$\sigma$  Sigma

$\mu$  Mi

## SUMÁRIO

|              |   |           |
|--------------|---|-----------|
| <b>1</b>     | <b>INTRODUÇÃO</b>   | <b>20</b> |
| <b>2</b>     | <b>MODELOS DE SPIN</b>  | <b>25</b> |
| 2.1          | DO PRINCÍPIO DE EXCLUSÃO AO MODELO DE HEISENBERG                                  | 25        |
| 2.2          | TEOREMAS FUNDAMENTAIS   | 29        |
| 2.3          | MODELOS DE REFERÊNCIA   | 33        |
| <b>2.3.1</b> | <b>Modelo de Majumdar-Ghosh (<math>S = 1/2</math>)</b>                            | <b>33</b> |
| <b>2.3.2</b> | <b>Modelo AKLT de <math>S = 1</math></b>  | <b>34</b> |
| <b>2.3.3</b> | <b>Modelo de grande anisotropia (Large-D Model)</b>                               | <b>36</b> |
| 2.4          | FASES E ORDENS TOPOLÓGICAS  | 37        |
| <b>3</b>     | <b>DMRG</b>   | <b>40</b> |
| 3.1          | O ALGORITMO DMRG  | 40        |
| <b>3.1.1</b> | <b>Algoritmo Infinito</b>   | <b>41</b> |
| <b>3.1.2</b> | <b>Algoritmo Finito</b>   | <b>43</b> |
| <b>3.1.3</b> | <b>Matriz Densidade Reduzida e Truncagem</b>                                      | <b>45</b> |
| 3.2          | ESTADOS DE PRODUTOS DE MATRIZES (MPS)   | 46        |
| <b>3.2.1</b> | <b>Formalismo MPS</b>   | <b>47</b> |
| <b>3.2.2</b> | <b>Lei da Área e Eficiência do MPS</b>  | <b>48</b> |
| 3.3          | IMPLEMENTAÇÃO PRÁTICA: O PACOTE ITENSOR   | 49        |
| <b>3.3.1</b> | <b>Cadeia de Spin-1/2 antiferromagnética de Heisenberg</b>                        | <b>50</b> |
| <b>3.3.2</b> | <b>Cadeia de Heisenberg e Modelo AKLT (Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki) de Spin-1</b> | <b>51</b> |
| <b>4</b>     | <b>RESULTADOS</b>   | <b>57</b> |
| 4.1          | O MODELO T-TRÍMEROS   | 57        |
| <b>4.1.1</b> | <b>Detalhes da Simulação DMRG</b>   | <b>59</b> |
| 4.2          | RESULTADOS DE ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL                                       | 60        |
| 4.3          | RESULTADOS DE ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL                                       | 60        |
| 4.4          | MAGNETIZAÇÃO LOCAL  | 62        |
| <b>4.4.1</b> | <b>Perfis de Magnetização para <math>J_T &gt; 0</math> (Fase Ferrimagnética)</b>  | <b>62</b> |
| <b>4.4.2</b> | <b>Perfis de Magnetização para <math>J_T &lt; 0</math> (Fase Tipo Haldane)</b>    | <b>63</b> |
| 4.5          | LARGURA DOS PLATÔS PARA $J_T < 0$   | 65        |

|       |  |           |
|-------|--|-----------|
| 4.6   | CURVAS DE MAGNETIZAÇÃO . . . . .   | 67        |
| 4.6.1 | <b>Perfis de magnetização para <math>J_T &gt; 0</math> (Fase ferrimagnética)</b> . . . . . | <b>67</b> |
| 4.6.2 | <b>Perfis de Magnetização para <math>J_T &lt; 0</math> (Fase de Haldane)</b> . . . . .     | <b>68</b> |
| 4.7   | LARGURA DOS PLATÔS PARA $J_T < 0$ . . . . .  | 70        |
| 4.7.1 | <b>Largura do Platô Central (<math>m_T = 1</math>)</b> . . . . .                           | <b>70</b> |
| 4.7.2 | <b>Largura do Platô em <math>m_T = 0</math></b> . . . . .                                  | <b>72</b> |
| 4.8   | ANÁLISE DO GAP EM CADEIAS MODIFICADAS . . . . .  | 74        |
| 4.8.1 | <b>Cadeia de Trímeros Simetrizada (T-simetrizadas)</b> . . . . .                           | <b>74</b> |
| 4.8.2 | <b>Cadeia T-deslocada (Spin Pendurado no Spin-1)</b> . . . . .                             | <b>76</b> |
| 4.9   | ANÁLISE DO EMARANHAMENTO . . . . .   | 78        |
| 5     | <b>CONCLUSÕES</b> . . . . .  | <b>80</b> |
|       | <b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .   | <b>82</b> |

## 1 INTRODUÇÃO

A física da matéria condensada é um campo vasto e fascinante, dedicado ao estudo das propriedades macroscópicas e microscópicas de materiais. Dentro desse domínio, o magnetismo quântico representa uma área de intensa pesquisa, explorando fenômenos que emergem da interação entre momentos magnéticos em sistemas onde os efeitos quânticos são predominantes.

Particularmente interessantes são os sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade, como as cadeias unidimensionais (1D) de spins. Nesses sistemas, as **flutuações quânticas** desempenham um papel amplificado. Diferentemente das flutuações térmicas, as flutuações quânticas persistem mesmo no zero absoluto de temperatura e são uma consequência intrínseca do Princípio da Incerteza de Heisenberg. Elas impedem que os spins estejam simultaneamente em estados muito bem definidos (e.g., posição e momento, ou componentes de spin não comutáveis), levando a uma dinâmica intrínseca. A interação entre os spins, sob a influência dessas flutuações, pode levar ao surgimento de estados fundamentais exóticos, como líquidos de spin, fases topológicas com ordens de longo alcance complexas — não observadas em sistemas tridimensionais convencionais. Nessas fases com gap, o sistema se comporta como um isolante quântico em relação às suas excitações de spin. Modelos teóricos que descrevem essas cadeias, como o modelo de Heisenberg, servem como bancadas de teste para explorar conceitos fundamentais da mecânica quântica de muitos corpos. Essas complexidades levam a fenômenos como as transições de fase quânticas, os quais são o foco de grande interesse nesses sistemas.

A **Transição de Fase Quântica (TFQ)** desempenha um papel importante nesses sistemas. Diferentemente das transições de fase térmicas, que ocorrem em temperaturas finitas e são impulsionadas por flutuações térmicas, as TFQ ocorrem no zero absoluto de temperatura ( $T = 0$ ) e são induzidas por variações em parâmetros não térmicos do hamiltoniano, como um campo magnético, pressão ou uma constante de acoplamento. Essas transições são governadas puramente por flutuações quânticas e podem levar a mudanças drásticas no estado fundamental de um material (CARR, 2010; GIAMARCHI; RÜEGG; TCHERNYSHYOV, 2008; SACHDEV; KEIMER, 2011; TASAKI, 2020).

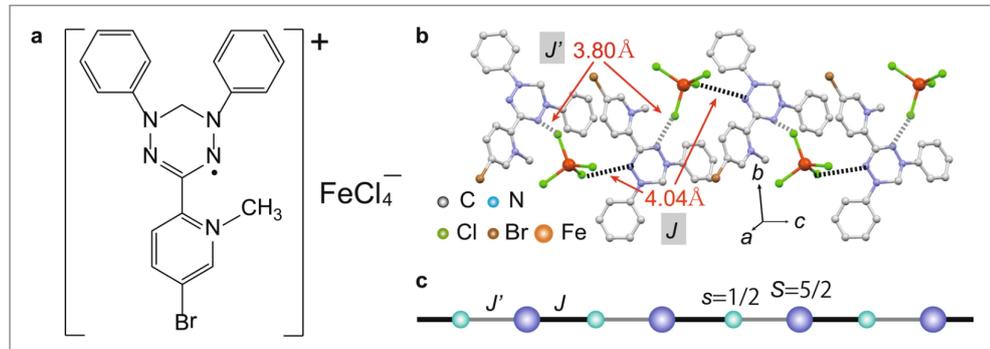
Entre as diversas formas de ordenamento magnético, as fases **ferrimagnéticas** e **antiferromagnéticas** são de particular interesse. Em um **antiferromagneto**, os momentos magnéticos

dos átomos vizinhos tendem a se alinhar de forma antiparalela, resultando em uma magnetização líquida nula em escala macroscópica. Exemplos de compostos antiferromagnéticos incluem o óxido de níquel (NiO) e o fluoreto de manganês (MnF<sub>2</sub>). Em cadeias unidimensionais com um spin por célula unitária, a ordem de longo alcance é tipicamente suprimida por flutuações quânticas (Teorema de Mermin-Wagner) (MERMIN; WAGNER, 1966), levando a estados desordenados – com comprimento de correlação finito entre os spins – ou com ordem de quase-longo alcance – com correlação tipo lei potência. Por outro lado, um caso comum de **ferrimagneto** é o que possui subredes de spins que se alinham antiparalelamente, mas com magnitudes desiguais de momento magnético, resultando em uma magnetização líquida espontânea (LIEB; MATTIS, 1962a; TIAN, 1994). Ferritas, como a magnetita (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>), são exemplos clássicos de materiais ferrimagnéticos, amplamente utilizados em eletrônica e armazenamento de dados (KONG et al., 2018). A figura 1 ilustra uma cadeia de spin-1/2 e spin-5/2 alternados que apresenta um estado fundamental ferrimagnético. A coexistência de spins de diferentes magnitudes em cadeias magnéticas mistas, como observado no polímero de coordenação heterotrimetálico [CuMn(L)][Fe(bpb)(CN)<sub>2</sub>] · ClO<sub>4</sub> · H<sub>2</sub>O (SOUZA et al., 2020; SOUZA et al., 2020; SOUZA et al., 2019), pode levar à formação de fases ferrimagnéticas em sistemas quase-unidimensionais.

A coexistência de spins de diferentes magnitudes em cadeias magnéticas mistas pode levar à formação de fases ferrimagnéticas em sistemas quase-unidimensionais, um fenômeno observado em compostos como Pb<sub>3</sub>Cu<sub>3</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>4</sub> (BELIK et al., 2005; MATSUDA et al., 2005) e outros compostos (SILVA; MONTENEGRO-FILHO, 2021; ALMEIDA et al., 2025; HAGIWARA et al., 1998; HAGIWARA et al., 1999; VERDAGUER et al., 1984; YAMAGUCHI et al., 2020; MONTENEGRO-FILHO; COUTINHO-FILHO, 2008a; NASCIMENTO-JUNIOR; MONTENEGRO-FILHO, 2019; MONTENEGRO-FILHO; COUTINHO-FILHO, 2008b; MONTENEGRO-FILHO; MATIAS; COUTINHO-FILHO, 2020; VERÍSSIMO et al., 2019; VERÍSSIMO et al., 2023b; VERÍSSIMO et al., 2023a; MONTENEGRO-FILHO; SILVA-JÚNIOR; COUTINHO-FILHO, 2022), onde a competição entre acoplamentos intra e inter-clusters gera platôs de magnetização e transições de fase induzidas por campo. Alguns compostos de trímeros, como o fosfato Cu<sub>3</sub>(P<sub>2</sub>O<sub>6</sub>OH)<sub>2</sub> (HASE et al., 2020), exibem platô na curva de magnetização e transições induzidas por campo, mas não apresentam um estado fundamental ferrimagnético.

Além das fases ferrimagnéticas e antiferromagnéticas, sistemas unidimensionais também podem exibir fases topológicas, como a fase de Haldane, que é uma das mais notáveis em cadeias 1D, caracterizada por um gap de energia e estados de borda de spin-1/2 em cadeias abertas (HALDANE, 1983a; HALDANE, 1983b; POLLMANN et al., 2012; WIERSCHEM; SEN-

Figura 1 – Em (a) a estrutura molecular do composto ferrimagnético (4-Br-o-MePy-V)FeCl<sub>4</sub>. A molécula é desenhada por pequenas esferas e suas ligações, com o distanciamento médio mostrado. Os carbonos são as esferas de cor cinza; os nitrogênios são as de cor azul; de verde, os cloros; marrom, os bromos; e as esferas que representam os ferros estão de laranja. Em (b) está a estrutura cristalina formando uma cadeia unidimensional ao longo do eixo indicado em (c); no qual é mostrada a representação da cadeia de spins, destacando os acoplamentos  $J'$  e  $J$ , e os nitrogênios ligados ao resto do conjunto representado por uma esfera roxa. O nitrogênio tem spin  $s = 1/2$  e o restante  $S = 5/2$ .



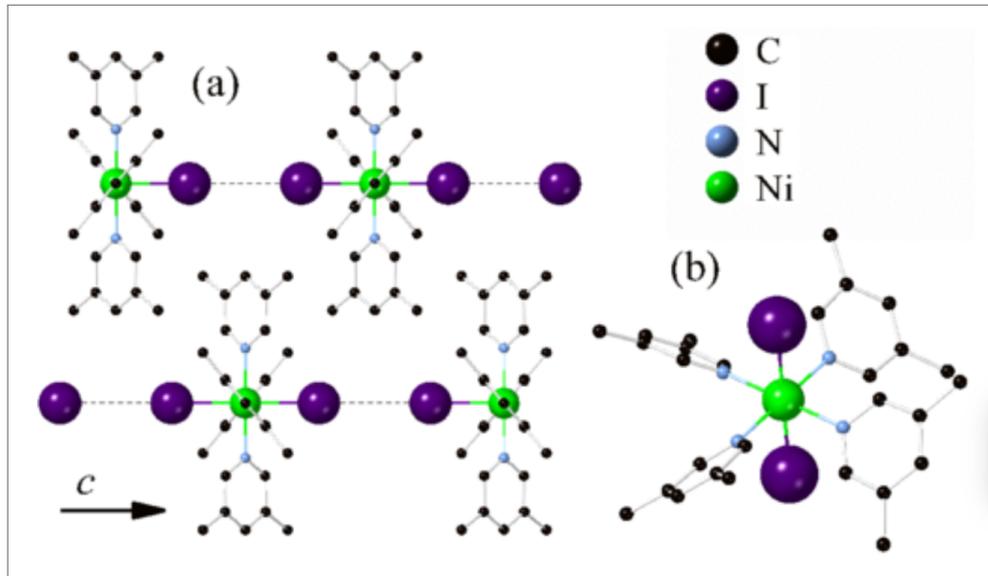
Fonte: Artigo YAMAGUCHI et al. (2020).

GUPTA, 2014). Experimentalmente, esta fase foi observada em diversos compostos, como Ni(C<sub>2</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>NO<sub>2</sub>(ClO<sub>4</sub>) (MISHRA et al., 2021; RENARD; REGNAULT; VERDAGUER, 2001), NiI<sub>2</sub>-(3,5 lut)<sub>4</sub> (WILLIAMS et al., 2020), ilustrada na figura 1, e mesmo em sistemas de átomos de Rydberg (MÖGERLE et al., 2025). A compreensão de suas propriedades topológicas é fundamental para a física da matéria condensada (GU; WEN, 2009; WEN, 2019) oferecendo uma nova perspectiva para a classificação da matéria e o desenvolvimento de novos materiais com funcionalidades quânticas (VERÍSSIMO et al., 2023b; VERÍSSIMO et al., 2023a; ROJAS et al., 2021; CIRINO et al., 2023a; FONSECA et al., 2025).

A descrição precisa de sistemas quânticos de muitos corpos representa um desafio computacional formidável. O **espaço de Hilbert** de tais sistemas cresce exponencialmente com o número de partículas, tornando a diagonalização exata inviável para cadeias com mais de algumas dezenas de sítios. Embora métodos analíticos, como o **Bethe Ansatz** (BETHE, 1931), ofereçam soluções exatas para modelos integráveis específicos em 1D, a inclusão de interações mais realistas (como alcances diferentes, anisotropias ou estruturas mais complexas) leva invariavelmente a cenários intratáveis analiticamente. Nesse contexto, métodos numéricos tornam-se ferramentas indispensáveis.

O **Density Matrix Renormalization Group (DMRG)**, desenvolvido por Steven White (WHITE, 1992; WHITE, 1993), revolucionou o estudo de sistemas quânticos unidimensionais. Este método numérico variacional é excepcionalmente eficiente para encontrar o estado fundamental e as excitações de baixa energia de hamiltonianos com interações de curto alcance,

Figura 2 – Representação esquemática de um composto antiferromagnético com a fase de Haldane: A cadeia é formada por esferas, onde as menores, as pretas, representam o carbono, as de cor azul são os nitrogênios. As esferas verdes representam o níquel, e as roxas, as maiores, o iodo. Os hidrogênios foram omitidos para maior legibilidade. O eixo "c" descreve a orientação da cadeia. No painel (b), o ambiente local do cristal é mostrado.



Fonte: Artigo WILLIAMS et al. (2020).

superando as limitações computacionais ao explorar a estrutura de **emaranhamento** dos estados quânticos. Sua eficácia é baseada na representação dos estados como **Matrix Product States (MPS)** (SCHOLLWÖCK, 2011; ÖSTLUND; ROMMER, 1995), que compactam a informação quântica de maneira eficiente para sistemas que obedecem à lei da área de entropia de **emaranhamento** (POULIN et al., 2011; LEGEZA; SÓLYOM, 2004; VIDAL et al., 2003; CALABRESE; CARDY, 2004; CRAMER et al., 2006) incluindo a investigação de cadeias de spin complexas e suas propriedades de emaranhamento (VERÍSSIMO et al., 2019; CIRINO et al., 2023b; FONSECA et al., 2025).

A presente dissertação insere-se nesse contexto, focando na investigação das propriedades quânticas da cadeia **T-trímeros**. Este modelo, caracterizado por uma arquitetura complexa de spins de diferentes magnitudes (spin-1 e spin-1/2) e uma topologia específica de interações, oferece um terreno fértil para explorar a competição entre interações intra (parametrizado por  $J_T$  e  $J_0$ ) e inter-trímeros ( $J_0$ ) – o acoplamento principal variado foi o  $J_T$  – e a emergência de fases magnéticas não triviais, como as fases ferrimagnéticas e antiferromagnéticas discutidas. A escolha deste modelo é motivada pela busca por análogos de sistemas magnéticos reais com estruturas moleculares complexas e pela curiosidade em relação ao comportamento do emaranhamento e dos gaps de spin em sistemas mistos.

A estrutura desta dissertação está organizada da seguinte forma:

- O **Capítulo 2** fornece a base teórica essencial, revisando os conceitos fundamentais do magnetismo quântico, operadores de spin e o modelo de Heisenberg, preparando o terreno para a compreensão dos sistemas investigados.
- O **Capítulo 3** é dedicado aos métodos numéricos, explicando em detalhes o algoritmo DMRG e o formalismo dos MPS. Serão apresentados os princípios subjacentes a esses métodos e a sua implementação prática, com exemplos de aplicação a modelos de referência.
- O **Capítulo 4** constitui o coração da dissertação, apresentando os resultados originais obtidos para a cadeia T-trímeros. Este capítulo detalha a análise da energia do estado fundamental, magnetização local, curvas de magnetização, o comportamento dos gaps de energia, e as propriedades de emaranhamento. Serão discutidas a identificação das fases magnéticas e as transições de fase induzidas pelo acoplamento intra-trímero, além de investigações em cadeias modificadas.
- Finalmente, o **Capítulo 5** apresenta as conclusões gerais do trabalho, sintetizando os principais achados e suas implicações físicas. Este capítulo também delinea diversas perspectivas para trabalhos futuros, sugerindo novas direções de pesquisa para aprofundar o entendimento deste e de outros sistemas de spin complexos.

## 2 MODELOS DE SPIN

O entendimento do magnetismo em materiais - um fenômeno coletivo e macroscópico - está enraizado em princípios fundamentais da mecânica quântica, frequentemente contraintuitivos à luz da física clássica. Este capítulo estabelece a teoria essencial para desvendar o comportamento coletivo dos momentos magnéticos atômicos, progredindo desde a origem microscópica da interação de troca até modelos de spin sofisticados e suas manifestações em fases topológicas da matéria.

### 2.1 DO PRINCÍPIO DE EXCLUSÃO AO MODELO DE HEISENBERG

A chave para desvendar a cooperação entre momentos magnéticos atômicos não reside em interações magnéticas clássicas, que são tipicamente muito fracas, mas sim em uma consequência sutil da interação eletrostática de Coulomb, filtrada através das regras de simetria impostas a partículas idênticas. No cerne da mecânica quântica reside o postulado de que partículas idênticas, como os elétrons, são fundamentalmente indistinguíveis. Diferentemente do mundo clássico, onde partículas podem ser distinguidas e rastreadas, na mecânica quântica a troca de dois férmions idênticos não resulta em um novo estado físico, refletindo a natureza indistinguível dessas partículas. Essa indistinguíbilidade não decorre de limitações experimentais, mas sim de uma propriedade intrínseca da natureza, que impõe restrições rigorosas à forma matemática da função de onda.

A primeira e mais conhecida manifestação desta restrição é o Princípio de Exclusão de Pauli, formulado por Wolfgang Pauli em 1925. Este princípio, na verdade, é uma consequência direta de um postulado mais profundo sobre a simetria da função de onda total para partículas idênticas. A estatística do spin estabelece uma conexão fundamental entre a simetria da função de onda e o momento angular intrínseco (spin) da partícula: férmions (partículas com spin semi-inteiro, como elétrons, prótons e nêutrons) requerem funções de onda antissimétricas; já bósons (com spin inteiro, como fótons e mésons), funções simétricas.

Matematicamente, se  $\Psi(\xi_1, \xi_2)$  representa a função de onda total para duas partículas, onde  $\xi_i$  denota o conjunto completo de coordenadas (posição  $r_i$  e spin  $\sigma_i$  da partícula  $i$ ), a condição de antissimetria para férmions é expressa como:  $\Psi(\xi_1, \xi_2) = -\Psi(\xi_2, \xi_1)$ . A partir desta exigência fundamental, o Princípio de Exclusão de Pauli emerge diretamente. Se dois fé-

mions tentassem ocupar o mesmo estado quântico, teríamos  $\xi_1 = \xi_2$ . Substituindo na equação de antissimetria, obtemos  $\Psi(\xi_1, \xi_1) = -\Psi(\xi_1, \xi_1)$ , uma equação que só pode ser satisfeita se  $\Psi(\xi_1, \xi_1) = 0$ . Isso significa que a probabilidade de encontrar dois férmions idênticos no mesmo estado quântico é exatamente zero. A exigência de antissimetria é, portanto, a generalização mais rigorosa e a verdadeira origem do princípio de exclusão.

Para analisar as consequências energéticas da exigência de simetria, é útil decompor a função de onda total. Para muitos sistemas de interesse, a interação entre o momento angular orbital e o spin de um elétron (acoplamento spin-órbita) é relativamente fraca e pode ser negligenciada em uma primeira aproximação. Nestes casos, a função de onda total pode ser separada em um produto de uma parte puramente espacial e um fator puramente de spin:  $\Psi_{total} = \psi_{espacial}(r_1, r_2) \times \chi_{spin}(\sigma_1, \sigma_2)$ . A condição crucial é que a antissimetria de  $\Psi_{total}$  deve ser preservada. Isso só pode ser alcançado de duas maneiras possíveis para um sistema de dois férmions: (1) A parte espacial é simétrica e a parte de spin é antissimétrica. (2) A parte espacial é antissimétrica e a parte de spin é simétrica. Esta ligação inextricável entre a simetria espacial e a simetria de spin é a chave para a interação de troca.

Para dois elétrons (spin-1/2), as combinações de spin são:

- Estado de spin antissimétrico (singlete): Existe apenas uma combinação de spin que é antissimétrica sob a troca das partículas 1 e 2. Este estado corresponde a um spin total  $S_{total} = 0$  e é chamado de estado singlete:  $\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ . Este estado representa os dois spins de elétrons em uma configuração antiparalela.
- Estados de spin simétricos (Tripleto): Existem três combinações de spin que são simétricas sob a troca. Coletivamente, esses estados correspondem a um spin total  $S_{total} = 1$  e são chamados de estado tripleto:  $\chi_s = \{|\uparrow\uparrow\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), |\downarrow\downarrow\rangle\}$ . Estes estados representam os dois spins de elétrons em uma configuração paralela.

A conexão com a energia torna-se clara através da parte espacial. A simetria da função de onda espacial dita a distância média entre os elétrons. Uma função de onda espacial antissimétrica, da forma  $\Psi_A(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) - \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)]$ , tem uma propriedade notável: ela se anula quando  $r_1 = r_2$ . Isso significa que elétrons que devem ocupar um estado espacial antissimétrico (ou seja, aqueles com spins paralelos, no estado de tripleto) têm a probabilidade nula de serem encontrados no mesmo ponto do espaço. Efetivamente, são "empurrados" para longe um do outro por uma espécie de "repulsão estatística quântica". Em contraste, no estado

especial simétrico, a proximidade dos elétrons aumenta a energia de repulsão. Essa diferença de energia, que depende puramente da orientação relativa dos spins através da simetria da função de onda, é a essência da interação de troca.

Para exemplificar, se faz a análise da molécula de hidrogênio ( $H_2$ ) através do modelo de Heitler-London (desenvolvido em 1927 (HEITLER; LONDON, 1927)). O cálculo da energia de cada estado usando o princípio variacional introduz naturalmente duas integrais distintas e fundamentais: a Integral de Coulomb ( $C$ ):

$$C = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{4\pi r_{12}} \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2), \quad (2.1)$$

onde  $e$  representa a carga elétrica e  $\vec{r}_{12}$  é a distância entre os elétrons.

Esta integral possui uma interpretação clássica direta, representando a energia de repulsão eletrostática entre as nuvens de carga dos dois elétrons. É sempre uma quantidade positiva.

E a Integral de Troca ( $U$ ):

$$U = \int d^3r_1 d^3r_2 \psi_a^*(\vec{r}_1) \psi_b^*(\vec{r}_2) \frac{e^2}{4\pi r_{12}} \psi_a(\vec{r}_2) \psi_b(\vec{r}_1). \quad (2.2)$$

Esta integral não possui análogo clássico. Ela surge exclusivamente dos termos “cruzados” na função de onda simetrizada, onde os rótulos dos elétrons são trocados entre os estados inicial e final da integral. O sinal de  $J$  não é necessariamente positivo e depende criticamente da forma dos orbitais e da distância internuclear.

A energia dos estados singleto e tripleto é então dada por:

$$E_{singleto} = E_0 + \frac{C + U}{1 + \lambda^2} \quad (2.3)$$

$$E_{tripleto} = E_0 + \frac{C - U}{1 - \lambda^2}, \quad (2.4)$$

onde  $E_0$  inclui as energias dos átomos de hidrogênio isolados e outros termos, e  $\lambda$  é a integral de superposição:

$$\lambda \equiv \int d^3r \psi_a^*(\vec{r}) \psi_b^*(\vec{r}). \quad (2.5)$$

A diferença de energia entre os dois estados é:

$$\Delta E = E_{tripleto} - E_{singleto} \equiv J. \quad (2.6)$$

Para dois spins, pode-se escrever:

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} (\vec{S}_{\text{total}}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2), \quad (2.7)$$

onde  $\vec{S}_{\text{total}} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$  é o operador de spin total do par. Esta relação conecta o produto escalar dos spins individuais ao spin total do sistema, sendo fundamental para entender a energia de troca no modelo de Heisenberg. Utilizando esta relação, podemos calcular o valor esperado do produto escalar  $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$  para os estados singleto e tripleto. Os autovalores de  $\vec{S}^2$  são  $s(s+1)\hbar^2$ . Para um único spin-1/2,  $s = 1/2$ , então  $\vec{S}_1^2 = \vec{S}_2^2 = 1/2(1/2 + 1)\hbar^2 = 3\hbar^2/4$ . Para o estado singleto ( $S_{\text{total}} = 0$ ), temos  $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle_{\text{singleto}} = -3\hbar^2/4$ . Para o estado tripleto ( $S_{\text{total}} = 1$ ), temos  $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle_{\text{tripleto}} = +\hbar^2/4$ . Desta forma, a diferença de energia entre o estado singleto e o estado tripleto, Eq. 2.6, pode ser escrita como:

$$\Delta E = \frac{J}{\hbar^2} \langle S_1 \cdot S_2 \rangle, \quad (2.8)$$

e um hamiltoniano efetivo que reproduz as energias dos estados singleto ( $E_{\text{singleto}}$ ) e tripleto ( $E_{\text{tripleto}}$ ) é dado por:

$$H_{\text{eff}} = \frac{J}{\hbar^2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2. \quad (2.9)$$

Embora a generalização direta da molécula de  $H_2$  para sistemas macroscópicos não seja trivial, ao considerar interações dominantes apenas entre primeiros vizinhos e desprezar acoplamentos spin-órbita, obtém-se a forma canônica do modelo de Heisenberg:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (2.10)$$

onde a soma  $\sum_{\langle i,j \rangle}$  é realizada sobre todos os pares de spins  $i$  e  $j$  que são primeiros vizinhos na rede cristalina. A constante  $J$  determina a natureza da interação: se  $J > 0$ , favorece o alinhamento antiparalelo dos spins ( $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j < 0$ ), levando a uma ordem antiferromagnética; se  $J < 0$ , favorece o alinhamento paralelo dos spins ( $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j > 0$ ), resultando em uma ordem ferromagnética.

O modelo de Heisenberg pode ser generalizado para descrever sistemas magnéticos em diferentes dimensionalidades e geometrias de rede. O hamiltoniano também pode incluir outras interações:

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + H_{\text{anisotropia}} + H_{\text{campo}} + \dots \quad (2.11)$$

onde  $J_{ij}$  representa a constante de acoplamento entre os spins  $i$  e  $j$ , podendo variar dependendo da distância e da direção da ligação.  $H_{\text{anisotropia}}$  inclui termos que promovem o alinhamento dos spins em direções preferenciais no espaço, e  $H_{\text{campo}}$  representa a interação dos spins com um campo magnético externo. Esta formulação estendida do modelo de Heisenberg permite capturar uma vasta gama de fenômenos magnéticos em materiais, demonstrando o poder de teorias efetivas em física da matéria condensada.

## 2.2 TEOREMAS FUNDAMENTAIS

O modelo de Heisenberg unidimensional apresenta comportamentos quânticos notáveis que desafiam a intuição clássica e contrastam marcadamente com sistemas em dimensões superiores. Em particular, sistemas antiferromagnéticos em 1D exibem propriedades radicalmente diferentes devido ao papel dominante das flutuações quânticas.

Para redes bipartidas, que podem ser divididas em subredes  $A$  e  $B$  onde todas as ligações conectam apenas subredes diferentes, a ordem de Néel (configuração alternada de spins) seria uma solução natural. A Figura 3 ilustra o estado de Néel, mostrando a alternância dos spins em um antiferromagneto bipartido ideal. Em uma cadeia linear de spin uniforme, no entanto, as fortes flutuações quânticas destroem qualquer ordem magnética de longo alcance. Esta ausência de ordem é formalizada pelo **teorema de Shastry** (SHASTRY, 1992), que estabelece a ausência de quebra espontânea de simetria – Spontaneous Symmetry Breaking (SSB), em inglês – para o modelo antiferromagnético de Heisenberg 1D com spin  $S$  qualquer. Considerando o hamiltoniano com campo alternado:

$$\hat{H}_h = \sum_{i=1}^L \left( \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - (-1)^i h S_i^z \right), \quad (2.12)$$

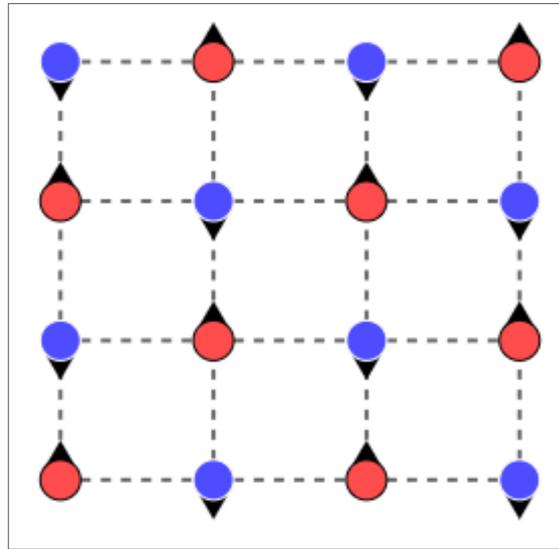
a magnetização alternada no estado fundamental satisfaz:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \Phi_{0,h} | \frac{\hat{M}}{L} | \Phi_{0,h} \rangle = 0, \quad (2.13)$$

onde  $\hat{M}$  é o operador magnetização alternada, definido como  $\hat{M} = \sum_i (-1)^i S_i^z$ . O Teorema de Kaplan-Horsch-von der Linden estende este resultado para o caso sem campo externo (HORSCH; LINDEN, 1988).

Outro resultado fundamental é o teorema de Lieb-Mattis (LM), apresentado a seguir.

Figura 3 – Estado de Néel em 2D, mostrando a configuração antiferromagnética ideal com spins alternados (azul e vermelho) e suas projeções em  $S^z$ . As setas pretas indicam a orientação dos spins.



Fonte: Elaborada pelo autor.

**Teorema 2.2.1 (Lieb-Mattis)** *Para sistemas bipartidos  $(A,B)$  com subredes  $A$  e  $B$ , o estado fundamental tem spin total  $S_{total} = |S_A - S_B|$ , onde  $S_A$  é o spin máximo da subrede  $A$ , e  $S_B$  é o spin máximo da subrede  $B$ , com degenerescência  $2S_{total} + 1$  (LIEB; MATTIS, 1962b).*

Este teorema tem implicações importantes. Considerando o caso de spin uniforme  $S$  e de tamanhos  $|A|$  e  $|B|$  de subredes iguais, o spin total é nulo. Se  $A \neq B$ , o spin total é diferente de zero.

A **conjectura de Haldane** (HALDANE, 2017), proposta em 1983 (HALDANE, 1983a; HALDANE, 1983b) por F.D.M. Haldane se aplica a cadeias lineares com um spin- $s$  por célula unitária. Ela sugere que a natureza do estado fundamental do modelo de Heisenberg antiferromagnético (AFM) unidimensional depende criticamente do valor de  $s$ :

- **Spin inteiro:** para spins inteiros, o sistema é *massivo*, o que significa que existe um gap de energia ( $\Delta > 0$ ) separando o estado fundamental de todos os estados excitados. As correlações de spin neste regime apresentam um decaimento exponencial com a distância ( $\vec{r}$ ), indicando a ausência de ordem de longo alcance, mas com correlações de curto alcance finitas.
- **Spin semi-inteiro:** para spins semi-inteiros, o sistema é *crítico*, ou seja, não possui gap de energia ( $\Delta = 0$ ). As correlações de spin decaem algebricamente com a distância ( $\vec{r}$ ), característico de um líquido de Luttinger de spin (GIAMARCHI; RÜEGG; TCHERNYSHYOV, 2008).

Haldane fundamentou sua conjectura em argumentos derivados de teoria de campos efetivos e análises topológicas. A ideia central é mapear o modelo discreto de Heisenberg para uma teoria de campo contínua – o modelo sigma não-linear  $O(3)$ . A presença ou ausência de um termo topológico específico nesta teoria de campo, determinado pelo valor do spin, dita se o sistema terá um gap ou não. Para spins inteiros, o termo topológico  $\theta$  na ação efetiva é nulo ( $\theta = 0$ ), o que permite a geração de massa na teoria de campo, resultando em um estado fundamental único e com gap. Para spins semi-inteiros,  $\theta = \pi$  induz um termo topológico não-trivial que impede a geração de massa, mantendo o sistema sem gap (crítico).

Apesar do ceticismo inicial da comunidade científica, a conjectura foi amplamente confirmada para a cadeia  $S = 1$  por uma combinação robusta de simulações numéricas e experimentos. Métodos como o DMRG (SCHOLLWÖCK, 2011; MIYASHITA; YAMAMOTO, 1993) para  $S = 1$  mostraram claramente a existência de um gap de energia, com valores numéricos próximos de  $\Delta \approx 0,41J$ . Experimentalmente, medições em compostos quasi-1D que realizam cadeias de spin-1, como  $\text{CsNiCl}_3$  (RENARD; REGNAULT; VERDAGUER, 2001), forneceram evidências da fase de Haldane. Compostos mais recentes, como  $\text{Ni}_2-(3,5\text{ lut})_4$  (WILLIAMS et al., 2020) e  $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$  (MISHRA et al., 2021; RENARD; REGNAULT; VERDAGUER, 2001), e mesmo em sistemas de átomos de Rydberg (MÖGERLE et al., 2025), também demonstraram a fase de Haldane. O modelo AKLT (AFFLECK et al., 1987) forneceu uma solução exata para uma cadeia de spin-1 que exhibe um estado fundamental com gap, servindo como uma realização explícita da fase de Haldane.

O teorema de **Lieb-Schultz-Mattis (LSM)** (LIEB; MATTIS, 1962b), formulado em 1962, é um pilar da teoria de sistemas de spin correlacionados, fornecendo suporte matemático robusto à conjectura de Haldane para cadeias de spins semi-inteiros. Ele estabelece uma relação fundamental entre a simetria do hamiltoniano e a natureza do espectro de energia no limite termodinâmico.

**Teorema 2.2.2 (Lieb-Schultz-Mattis)** *Para cadeias unidimensionais com acoplamentos antiferromagnéticos, se o spin por célula unitária for semi-inteiro, o sistema não pode ter um gap de energia finito no limite termodinâmico a campo nulo, ou seja, o estado fundamental é degenerado ou o primeiro estado excitado é degenerado com o fundamental no limite de cadeia infinita. Matematicamente, a cota superior para o gap de energia ( $E_1 - E_0$ ) se anula no limite termodinâmico:*

$$0 < E_1 - E_0 \leq \frac{8\pi S^2}{L}, \quad (2.14)$$

onde  $S$  é a magnitude do spin e  $L$  é o comprimento da cadeia. Isto é  $L \rightarrow \infty \Rightarrow \Delta \rightarrow 0$ .

Oshikawa-Yamanaka-Affleck (OYA) (YAMANAKA; OSHIKAWA; AFFLECK, 1997) estenderam os argumentos do teorema LSM para sistemas sob campo magnético. Eles mostraram a possibilidade da existência de platôs na curva de magnetização, desde que a seguinte condição fosse satisfeita:

$$S_u - m_u = \text{Inteiro}, \quad (2.15)$$

onde  $S_u$  e  $m_u$  é o spin total e a magnetização total por célula unitária, respectivamente.

Esta implicação é crucial, pois para spins semi-inteiros, o teorema prevê um comportamento crítico (sem gap).

O comportamento assintótico das funções de correlação de spin, que medem como o spin em um ponto da cadeia influencia o spin em outro ponto distante, confirma a dicotomia prevista pela conjectura de Haldane e pelos teoremas como o LSM. Para cadeias com spin semi-inteiro, as correlações de spin decaem algebricamente com a distância ( $r$ ), muitas vezes com modificações logarítmicas:

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle \sim (-1)^r \frac{\sqrt{\ln r}}{r}. \quad (2.16)$$

Para cadeias com spin inteiro, as correlações de spin decaem exponencialmente com a distância:

$$\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle \sim (-1)^r e^{-r/\xi}, \quad (2.17)$$

onde  $\xi$  é o comprimento de correlação, que é finito e inversamente proporcional ao gap de energia.

Em termos conceituais, a conjectura de Haldane e os teoremas fundamentais em 1D revelaram implicações profundas para a física da matéria condensada. Os teoremas fundamentais em 1D e a conjectura de Haldane demonstraram que novas fases da matéria — fora do escopo da descrição de Landau — podem emergir em sistemas fortemente correlacionados. O papel da topologia, emaranhamento e simetrias discretas, tornou-se central na moderna classificação de fases quânticas da matéria. Isso levou ao reconhecimento de novas categorias de fases topológicas (WEN, 2019).

## 2.3 MODELOS DE REFERÊNCIA

Esta seção explora três modelos fundamentais que ilustram os princípios da conjectura de Haldane e introduzem conceitos-chave como estados dimerizados, fases topológicas e o limite de grande anisotropia.

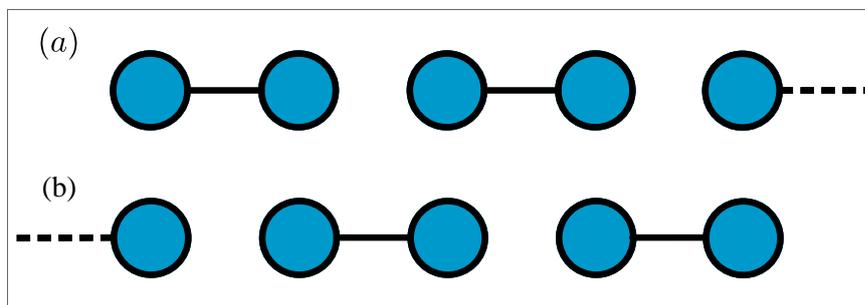
### 2.3.1 Modelo de Majumdar-Ghosh ( $S = 1/2$ )

O modelo de Majumdar-Ghosh (MG) é um sistema que possui um estado fundamental degenerado e dimerizado como solução exata. Seu hamiltoniano, que inclui interações entre primeiros e segundos vizinhos, é dado por:

$$\hat{H}_{\text{MG}} = \sum_{i=1}^N \left( \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2} \right). \quad (2.18)$$

As propriedades fundamentais do modelo MG são notáveis. Ele possui estados fundamentais exatos que são combinações de singletos entre spins vizinhos, ilustrados na Figura 4. Essa característica leva a uma quebra de simetria de período 1 para período 2, e suas correlações de spin exibem um decaimento exponencial, com gap  $\Delta_{\text{MG}} \approx 0,38J$  (SANO; TAKANO, 2000). A origem desse gap reside na dimerização induzida pela interação de segundos vizinhos  $J_2$ , conforme demonstrado numericamente (SANO; TAKANO, 2000).

Figura 4 – Representação esquemática dos estados fundamentais dimerizados no modelo de Majumdar-Ghosh. Os círculos de cor azul indicam os spins semi-inteiros. As linhas indicam a formação de singletos entre spins vizinhos. Em (a), para uma cadeia finita orientada para direita e em (b) a esquerda.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Embora o modelo MG descreva spins  $S = 1/2$  (semi-inteiros), sua natureza com gap não contradiz a conjectura de Haldane. Isso ocorre porque a conjectura aplica-se estritamente ao modelo de Heisenberg puro (com interações apenas entre primeiros vizinhos) (HALDANE, 1983a). A inclusão de interações de segundos vizinhos (representadas pelo termo  $J_2$ ) intro-

duz dimerização, criando um estado massivo (AIZENMAN; DUMINIL-COPIN; WARZEL, 2020). O modelo de Majumdar-Ghosh, portanto, ilustra como perturbações específicas no hamiltoniano podem levar a estados fundamentais qualitativamente diferentes, abrindo um gap em um sistema que, de outra forma, seria crítico conforme a conjectura de Haldane.

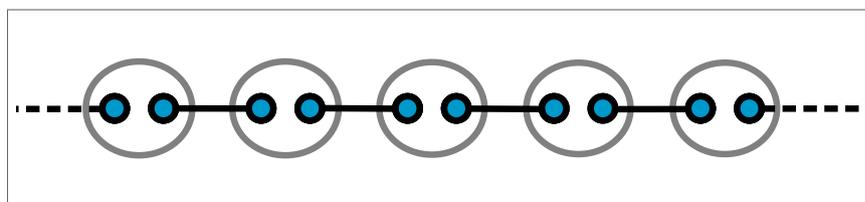
### 2.3.2 Modelo AKLT de $S = 1$

O modelo exatamente solúvel de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) (AFFLECK et al., 1987) apresenta um estado fundamental similar ao da cadeia de spin-1 e é fundamental para a compreensão das fases topológicas protegidas por simetria. Seu hamiltoniano, que é do tipo bilinear-biquadrática, e dado por:

$$\hat{H}_{\text{AKLT}} = \sum_i \left( \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2 \right). \quad (2.19)$$

O estado fundamental do modelo AKLT é um sólido de ligações de valência (VBS), que possui propriedades notáveis. A construção desse estado envolve a projeção de spins  $S = 1$  em pares de spins  $S = 1/2$  virtuais. As correlações de spin no estado AKLT decaem exponencialmente ( $\langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_r \rangle \sim (-1)^r e^{-r/\xi}$ ), e o modelo possui um gap de energia exato de  $\Delta_{\text{AKLT}} = \frac{2}{3}J$  (AFFLECK et al., 1987). Uma característica marcante do modelo AKLT são seus modos de borda: em cadeias abertas, surgem spins  $S = 1/2$  efetivos desemparelhados nas extremidades (AFFLECK et al., 1987; MIYASHITA; YAMAMOTO, 1993; HAGIWARA et al., 1990). A Figura 5 representa esquematicamente esse estado VBS e seus modos de borda.

Figura 5 – Representação esquemática do estado fundamental do modelo AKLT como um sólido de ligações de valência (VBS). Cada spin-1 pode ser visto como uma projeção de dois spins-  $1/2$  virtuais, que formam singletos entre sítios adjacentes, deixando spins-  $1/2$  livres nas bordas de uma cadeia aberta. Os círculos azuis representam os spins meio virtuais que juntos formam o spin inteiro, dentro da elipse, e se ligam formando um tripleto. Os segmentos de reta formam a ligação singleto.



Fonte: Artigo AFFLECK et al. (1987).

O hamiltoniano bilinear-biquadrática geral para cadeias de spin-1, da qual o modelo AKLT é um caso particular, é dado por:

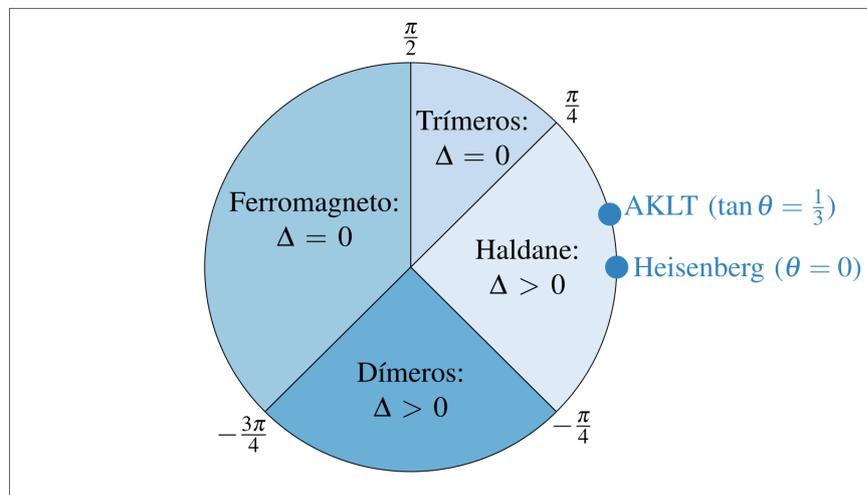
$$H = \cos \theta \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \sin \theta \sum_i (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2. \quad (2.20)$$

A Figura 6S mostra o diagrama de fases do modelo bilinear-biquadrático para cadeias de spin-1, parametrizado pelo ângulo  $\theta$ , que controla a competição entre os termos de Heisenberg ( $\cos \theta \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$ ) e biquadrático ( $\sin \theta (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2$ ). Cada setor do diagrama corresponde a uma fase distinta:

- **Fase Haldane** ( $-\pi/4 < \theta < \pi/4$ ): Inclui o ponto de Heisenberg ( $\theta = 0$ ) e o AKLT ( $\tan \theta = 1/3$ ), caracterizada por um gap de energia ( $\Delta > 0$ ) e ordem topológica.
- **Fase trimerizada** ( $\pi/4 < \theta < \pi/2$ ): Apresenta formação de trímeros.
- **Fase ferromagnética** ( $\theta > \pi/2$  e  $\theta > -3\pi/4$ ): Dominada pelo alinhamento paralelo dos spins.
- **Fase dimerizada** ( $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$ ): Apresenta quebra espontânea de simetria translacional e formação de dímeros.

A ausência de um ponto crítico entre os pontos de Heisenberg e AKLT indica que ambos pertencem à mesma fase topológica (Haldane), evidenciando a robustez dessa fase contra variações no hamiltoniano.

Figura 6 – Gráfico pizza do modelo bilinear-biquadrático de spin-1, parametrizado pelo ângulo  $\theta$  tal que  $\hat{H}(\theta) = \sum_j (\cos \theta \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} + \sin \theta (\vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1})^2)$ . A fase de Haldane, que é massiva ( $\Delta > 0$ ), contém tanto o ponto de Heisenberg ( $\theta = 0$ ) quanto o ponto AKLT ( $\theta = \arctan(1/3)$ ). Outras fases, como a ferromagnética e a dimerizada, também são mostradas. A ausência de um ponto crítico quântico entre os pontos de Heisenberg e AKLT indica que eles pertencem à mesma fase topológica.



Fonte: Diagrama adaptado de (HALLER, 2014).

O modelo AKLT possui significado teórico relevante. Ele não apenas confirmou a conjectura de Haldane para  $S = 1$  (AFFLECK et al., 1987), mas também introduziu o conceito crucial de *fases topológicas protegidas por simetria* (Symmetry-Protected Topological (SPT)) (GU; WEN, 2009). Além disso, demonstra a relação borda-volume característica de sistemas topológicos (GU; WEN, 2009; WEN, 2019) e fornece um paradigma para o estudo de estados quânticos não triviais.

### 2.3.3 Modelo de grande anisotropia (Large-D Model)

Outro modelo paradigmático, especialmente relevante para cadeias de spin inteiro, é o **Modelo de Grande Anisotropia** (ou *Large-D Model*). Este modelo adiciona um termo de anisotropia do cristal (crystal-field anisotropy, em inglês) ao hamiltoniano de Heisenberg:

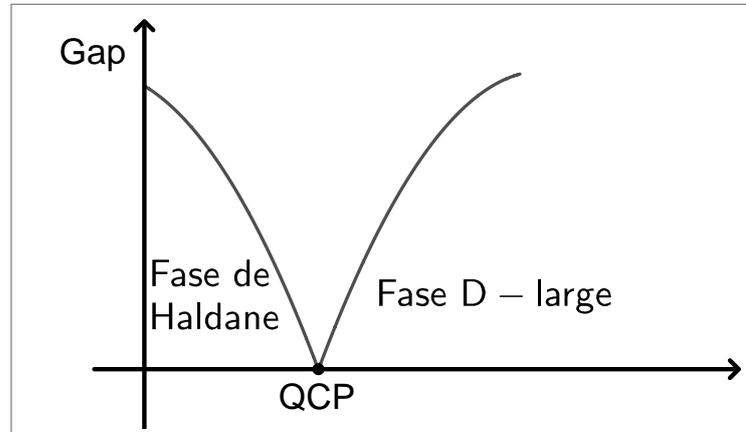
$$H_{\text{Large-D}} = J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (2.21)$$

onde  $D$  é a constante de anisotropia. Este termo favorece o alinhamento dos spins ao longo de um eixo específico (geralmente o eixo  $z$ ) ou a sua projeção perpendicular.

Para cadeias de spin-1, a competição entre o termo de troca antiferromagnética  $J$  e o termo de anisotropia  $D$  leva a um diagrama de fases rico. Em particular, para  $D \gg J$ , o sistema pode sofrer uma transição para uma fase paramagnética trivial com um gap de energia, onde os spins se comportam de forma quase independente. O fechamento do gap entre a fase de Haldane e a fase paramagnética trivial do *Large-D model* é um fenômeno de TFQ que tem sido extensivamente estudado. A Figura 6 ilustra um diagrama de fases esquemático mostrando a transição entre a fase de Haldane e o regime de grande anisotropia  $D$ .

O estudo do Modelo de Grande Anisotropia é importante porque demonstra como a introdução de termos de anisotropia pode modificar fundamentalmente as propriedades de sistemas de spin, podendo fechar o gap de Haldane e levar a uma fase paramagnética trivial, mesmo para spins inteiros. Isso adiciona uma camada de complexidade na classificação e compreensão das fases quânticas da matéria.

Figura 7 – Diagrama de fases esquemático para o modelo de grande anisotropia (*Large-D model*) em cadeias de spin-1. A figura ilustra a fase de Haldane e sua transição para uma fase paramagnética trivial quando a anisotropia  $D$  é suficientemente grande. O fechamento do gap ocorre nos pontos críticos quânticos que separam essas fases.



Fonte: Gráfico adaptado de CARR (2010).

## 2.4 FASES E ORDENS TOPOLÓGICAS

Modelos como os de Heisenberg e AKLT revelam comportamentos quânticos que escapam à descrição clássica de Landau, abrindo caminho para o entendimento de fases topológicas. Nesta seção, exploramos como fases topológicas emergem nesses sistemas, caracterizadas por propriedades globais não capturadas por parâmetros de ordem locais. Essas fases são robustas contra perturbações e exibem características únicas, como modos de borda protegidos por simetria. Essas propriedades se manifestam de maneira concreta em modelos específicos. Por exemplo, o modelo AKLT ilustra uma fase topológica protegida por simetria  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  (WEN, 2019; TASAKI, 2020), com modos de borda que persistem mesmo na presença de desordem local.

A **teoria de Landau** tem sido o pilar para a compreensão e classificação das fases da matéria, baseando-se no conceito de quebra espontânea de simetria e na introdução de um parâmetro de ordem local. No entanto, o campo da física da matéria condensada testemunhou uma revolução com a descoberta e o aprofundamento das fases topológicas, que representam um novo e profundo paradigma, transcendendo a descrição tradicional de Landau.

Fases topológicas possuem propriedades intrínsecas que lhes conferem estabilidade frente a perturbações locais e que não se manifestam por parâmetros de ordem convencionais. Suas características-chave incluem a **ausência de quebra de simetria espontânea (SSB)** (WEN, 2019). Além disso, exibem um **gap de energia no espectro** (WEN, 2019), implicando que

o *bulk* do sistema é isolante, e uma **ordem não-local codificada em emaranhamento quântico** (WEN, 2019). Esta ordem de longo alcance, baseada em emaranhamento, sustenta tal estabilidade de forma não trivial. As transições entre fases topológicas – com topologias diferentes – exigem o fechamento do gap de energia, caracterizando mudanças genuínas de fase, ainda que sem um parâmetro de ordem local.

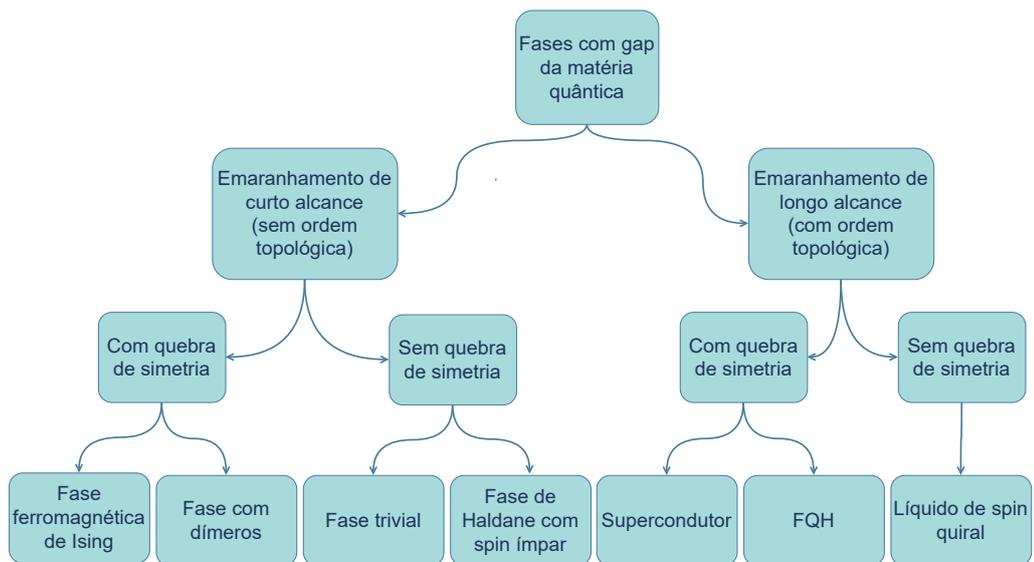
Uma subclasse importante e amplamente estudada de fases topológicas são as **Fases Topológicas Protegidas por Simetria (SPT)**. Estas fases são topologicamente não-triviais apenas na presença de certas simetrias globais do hamiltoniano, o que confere proteção à sua natureza topológica. As fases SPT exibem características específicas: (i) um **bulk com gap com estado fundamental único em geometrias fechadas** (GU; WEN, 2009), similarmente a outras fases topológicas; (ii) a presença de **modos de borda robustos em sistemas abertos** (GU; WEN, 2009), que são estados exóticos localizados nas extremidades do sistema e protegidos pelas simetrias. Para a fase de Haldane ( $S = 1$ ), por exemplo, os modos de borda comportam-se como spins efetivos  $S = 1/2$  (RENARD; REGNAULT; VERDAGUER, 2001).

No modelo AKLT uma evidência da ordem topológica pode ser detectada por um operador de ordem de *string* não-local, que se mantém não-nulo a longas distâncias:

$$\mathcal{O}_{\text{string}} = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \langle S_i^z e^{i\pi \sum_{k=i+1}^{j-1} S_k^z} S_j^z \rangle \neq 0. \quad (2.22)$$

A Figura 8 oferece uma visão geral da classificação das fases quânticas com gap, distinguindo entre aquelas com e sem quebra de simetria espontânea, e a natureza de seu emaranhamento. Este diagrama contextualiza as fases SPT (como a de Haldane) como um subgrupo das fases topológicas que não exibem quebra de simetria e possuem emaranhamento de curto alcance.

Figura 8 – Classificação geral das fases quânticas com gap, organizada com base na presença de quebra de simetria espontânea e na natureza de seu emaranhamento quântico. As fases SPT, como a fase de Haldane, são caracterizadas por emaranhamento de curto alcance e ausência de quebra de simetria, mas são topologicamente distintas das fases triviais. A ordem topológica intrínseca, por outro lado, é definida pelo emaranhamento de longo alcance.



Fonte: Diagrama adaptado de WEN (2019).

### 3 DMRG

A descrição precisa de sistemas quânticos de muitos corpos, como as cadeias de spin, é um dos principais desafios da física da matéria condensada. Isso se deve, principalmente, ao crescimento exponencial do **espaço de Hilbert**, cuja dimensão aumenta drasticamente com o número de partículas no sistema. Para um sistema com  $N$  sítios e  $d$  graus de liberdade locais por sítio (por exemplo,  $d = 2$  para um spin-1/2), a dimensão total do espaço de Hilbert é dada por:

$$\dim \mathcal{H} = d^N \quad (3.1)$$

Essa dependência exponencial torna inviável a diagonalização exata ou a análise analítica completa mesmo para valores moderados de  $N$ . Por exemplo, uma cadeia com apenas 20 spins-1/2 ( $N = 20$ ,  $d = 2$ ) já possui um espaço de Hilbert com  $2^{20} = 1.048.576$  estados — e esse número cresce rapidamente com cada sítio adicional.

Embora métodos analíticos, como o **Bethe Ansatz** (BETHE, 1931), tenham oferecido soluções exatas e *insights* fundamentais para modelos unidimensionais ideais, sua aplicação é limitada a hamiltonianos integráveis específicos. A introdução de interações mais realistas — como interações de longo alcance, anisotropias, desordem ou o aumento da dimensionalidade — leva, em geral, a situações para as quais não há solução analítica conhecida. Nesses casos, o estudo do sistema exige o uso de **métodos numéricos** capazes de contornar a explosão combinatória do espaço de Hilbert.

É nesse cenário que o **Density Matrix Renormalization Group (DMRG)** surge como uma ferramenta computacionalmente eficiente e versátil. Diferente de abordagens que tentam lidar com o espaço de Hilbert completo, o DMRG explora a estrutura de **entropia de emaranhamento** presente em sistemas unidimensionais. Isso permite uma truncagem inteligente do espaço de estados, focando nos graus de liberdade mais relevantes (SCHOLLWÖCK, 2011; ??).

#### 3.1 O ALGORITMO DMRG

O método DMRG surgiu no início da década de 1990 como uma resposta à limitação dos métodos numéricos convencionais, especialmente para sistemas fortemente correlacionados em uma dimensão. Desde então, tornou-se uma das ferramentas mais confiáveis e precisas para o

estudo do estado fundamental e de excitações de baixa energia em cadeias de spin, sistemas fermiônicos e bosônicos unidimensionais. Sua eficiência e acurácia tornaram-no indispensável em pesquisas de física da matéria condensada, química quântica e até mesmo em simulações de computação quântica (WU et al., 2024).

Desenvolvido por Steven White em 1992 (WHITE, 1992), o DMRG revolucionou o estudo de sistemas unidimensionais ao oferecer uma abordagem eficiente para obter o estado fundamental e estados de baixa energia. O DMRG pode ser visto como uma evolução do conceito de **Grupo de Renormalização (RG)** de Wilson (Wilson, 1975), originalmente concebido para sistemas em espaço real. O RG de Wilson apresenta limitações quando aplicado a sistemas quânticos (WHITE, 1992). O DMRG supera essas dificuldades ao introduzir a utilização da **matriz densidade reduzida** para selecionar a base de estados:

$$\rho_A = \text{Tr}_B (|\psi\rangle \langle\psi|), \quad (3.2)$$

onde  $\text{Tr}_B$  denota o traço parcial sobre os graus de liberdade do subsistema  $B$ , privilegiando o estudo do sistema principal  $A$ . Este procedimento garante que apenas os graus de liberdade mais relevantes permaneçam no sistema simulado.

A ideia central por trás do DMRG é a **truncagem adaptativa do espaço de estados**. Em vez de tentar lidar com o espaço de Hilbert completo – uma tarefa impossível para sistemas maiores – o DMRG constrói iterativamente um subespaço otimizado que contém os graus de liberdade mais relevantes para descrever o estado de interesse (geralmente o estado fundamental). Essa relevância é determinada pela **entropia de emaranhamento**, uma medida de quão emaranhado um subsistema está com o restante.

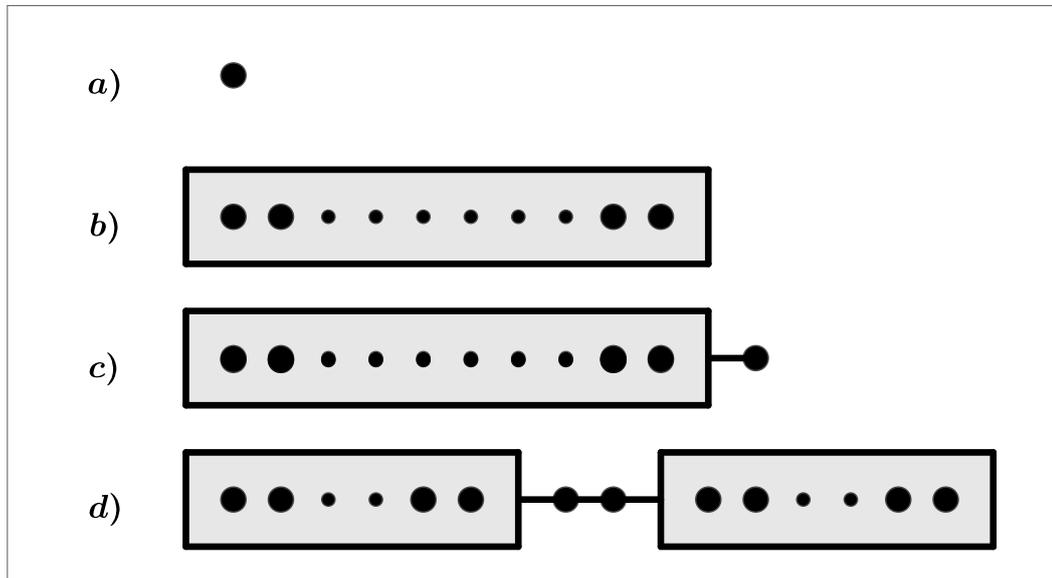
O DMRG opera construindo o sistema gradualmente, sítio por sítio ou bloco por bloco (9), e otimizando a representação do estado a cada passo. O processo pode ser conceitualmente dividido em dois formatos: o **algoritmo infinito** e o **algoritmo finito**.

### 3.1.1 Algoritmo Infinito

O algoritmo infinito do DMRG expande progressivamente o sistema, adicionando sítios e renormalizando blocos em cada iteração. Na prática, entretanto, o interesse em sistemas de tamanho fixo é mais comum, demandando a transição para o algoritmo finito.

O processo iterativo do algoritmo infinito segue os passos, ilustrados na Figura 10:

Figura 9 – Objetos usados no DMRG. (a) Sítio unitário; (b) Bloco de múltiplos sítios; (c) Bloco estendido (bloco + sítio ponte); (d) Superbloco (sistema completo).



Fonte: Elaborada pelo autor.

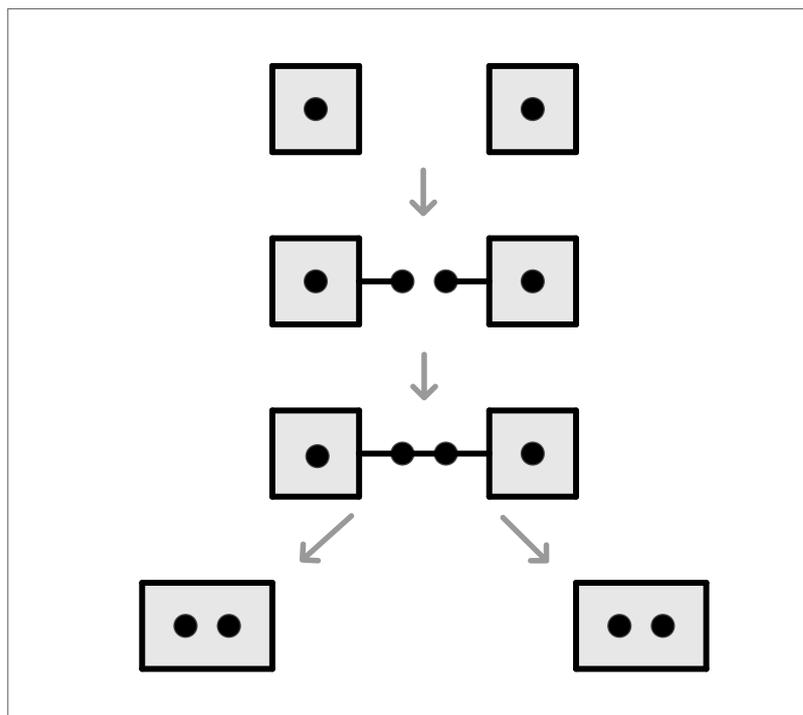
1. **Inicialização:** Começa-se com dois blocos mínimos (ex: um sítio para o bloco esquerdo e um para o direito) e dois sítios centrais como ponte.
2. **Formação do Superbloco:** Combina-se o bloco esquerdo atual, um novo sítio, outro novo sítio e o bloco direito atual na configuração ótima “bloco-sítio-sítio-bloco” (SCHOLLWÖCK, 2011).
3. **Diagonalização do Hamiltoniano:** O hamiltoniano do Superbloco é diagonalizado para encontrar o estado alvo (tipicamente o estado fundamental).
4. **Construção da matriz densidade reduzida:** Para o bloco esquerdo estendido (bloco original + primeiro novo sítio), constrói-se a matriz densidade reduzida traçando sobre os graus de liberdade do ambiente (segundo novo sítio + bloco direito).
5. **Truncagem adaptativa:** Diagonaliza-se a matriz densidade reduzida e mantêm-se apenas os  $m$  autovetores correspondentes aos maiores autovalores, formando uma nova base truncada que preserva os graus de liberdade mais relevantes.
6. **Atualização do bloco:** O bloco esquerdo estendido, agora representado na nova base truncada, torna-se o novo bloco esquerdo. Repete-se o processo simétrico para o bloco direito.

7. **Iteração:** Repetem-se os passos 2-6 até convergência da energia e observáveis, indicando aproximação ao limite termodinâmico (ÖSTLUND; ROMMER, 1995).

### 3.1.2 Algoritmo Finito

Após a expansão inicial via algoritmo infinito, o método finito realiza varreduras de refinamento, durante as quais o tamanho total do sistema permanece constante. Nessas varreduras, os blocos 'sistema' e 'ambiente' são redimensionados e reotimizados ao mover iterativamente o 'centro' do Superbloco através da cadeia. Nesta fase, os blocos são sistematicamente expandidos e contraídos, movendo a "janela" de otimização ao longo da cadeia. Ela se move de uma ponta à outra, refinando o estado fundamental e a representação dos blocos em cada passo. A figura 11 exemplifica os passos para uma única varredura.

Figura 10 – Representação esquemática da primeira iteração do DMRG. (1) Adição dos sítios-ponte; (2) Formação do Superbloco inicial; (3) Atualização do bloco direito após truncagem.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Em cada passo de uma varredura, um novo sistema é formado por dois blocos (um à esquerda, um à direita) e os dois sítios centrais. O hamiltoniano é construído e seu estado fundamental (ou outro estado de interesse) é determinado. A **matriz densidade reduzida** de um dos blocos (por exemplo, o bloco da esquerda) é computada a partir desse estado fundamental. Os autovetores de maior autovalor encontrados a partir da matriz reduzida são

---

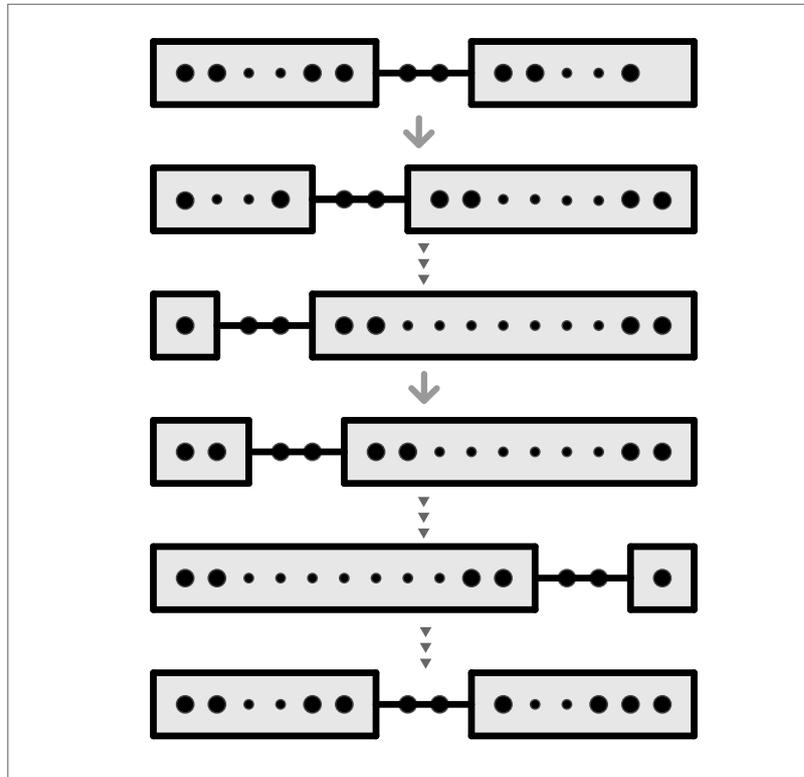
usados para formar uma nova base truncada para o bloco. Isso descarta as componentes menos emaranhadas do estado, mantendo apenas os graus de liberdade mais relevantes. O processo de formação da nova base é repetido para os outros blocos.

A varredura continua até que a energia do estado fundamental convirja para um valor estável, indicando que a representação dos blocos e do estado estão otimizadas. O procedimento de varredura é uma otimização poderosa que aumenta significativamente a precisão para sistemas finitos. Ao mover iterativamente o “*centro*” do Superbloco através da cadeia (primeiro para a direita, depois para a esquerda), ele garante que todos os sítios sejam tratados como parte do “sistema” ou do “ambiente” em diferentes pontos refinando sistematicamente a base de estados e corrigindo as aproximações feitas durante a etapa de crescimento do algoritmo infinito. Isso leva a uma precisão significativamente maior para sistemas finitos, reduzindo o impacto das aproximações iniciais. Múltiplas varreduras são realizadas até que a energia e outras observáveis convirjam para uma precisão desejada, indicando que o estado fundamental foi determinado com precisão para o sistema finito. A Figura 11 ilustra o processo de varredura.

Em cada passo de uma varredura, um novo sistema é formado por dois blocos (um à esquerda, um à direita) e os dois sítios centrais. O hamiltoniano é construído e seu estado fundamental (ou outro estado de interesse) é determinado. A **matriz densidade reduzida** de um dos blocos (por exemplo, o bloco da esquerda) é computada a partir desse estado fundamental. Os autovetores de maior autovalor encontrados a partir da matriz reduzida são usados para formar uma nova base truncada para o bloco. Isso descarta as componentes menos emaranhadas do estado, mantendo apenas os graus de liberdade mais relevantes. O processo de formação da nova base é repetido para os outros blocos.

A varredura continua até que a energia do estado fundamental convirja para um valor estável, indicando que a representação dos blocos e do estado estão otimizadas. O procedimento de varredura é uma otimização poderosa que aumenta significativamente a precisão para sistemas finitos. Ao mover iterativamente o “*centro*” do Superbloco através da cadeia (primeiro para a direita, depois para a esquerda), ele garante que todos os sítios sejam tratados como parte do “sistema” ou do “ambiente” em diferentes pontos refinando sistematicamente a base de estados e corrigindo as aproximações feitas durante a etapa de crescimento do algoritmo infinito. Isso leva a uma precisão significativamente maior para sistemas finitos, reduzindo o impacto das aproximações iniciais. Múltiplas varreduras são realizadas até que a energia e outras observáveis convirjam para uma precisão desejada, indicando que o estado fundamental foi determinado com precisão para o sistema finito. A Figura 11 ilustra o processo de varredura.

Figura 11 – Modelo iterativo do DMRG representado esquematicamente. O processo de varredura é mostrado por etapas: bloco da esquerda crescendo; bloco da esquerda restando apenas um sítio; a virada, com o bloco da direita diminuindo até restar um sítio; por fim, o bloco da esquerda voltando a diminuir até voltar ao tamanho original. Assim, uma varredura é completada.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Este processo iterativo de construção de blocos, cálculo da matriz densidade reduzida e truncagem, garante que o DMRG mantenha os graus de liberdade mais importantes à medida que o sistema cresce, permitindo a exploração eficiente de sistemas de muitos corpos em uma dimensão.

Com a estrutura refinada pelos dois algoritmos, o DMRG está pronto para representar eficientemente estados altamente correlacionados em 1D.

### 3.1.3 Matriz Densidade Reduzida e Truncagem

A eficiência do DMRG em lidar com a complexidade exponencial do espaço de Hilbert decorre de uma propriedade fundamental dos estados quânticos de baixa energia em sistemas unidimensionais: a **lei da área para a entropia de emaranhamento** (POULIN et al., 2011; LEGEZA; SÓLYOM, 2004; VIDAL et al., 2003; CALABRESE; CARDY, 2004; CRAMER et al., 2006). Para a maioria dos estados fundamentais em 1D com gap de energia (ou seja, não críticos), a entropia de emaranhamento entre um bloco e o restante do sistema permanece aproximada-

mente constante, independentemente do tamanho do bloco. Isso contrasta com o crescimento linear em dimensões superiores ou com o crescimento logarítmico para sistemas críticos em 1D.

Essa propriedade permite uma descrição eficiente dos estados fundamentais em 1D: a quantidade de informação relevante está limitada a um número reduzido de graus de liberdade, mesmo para sistemas extensos. O DMRG explora essa estrutura por meio da **matriz densidade reduzida**. Para um sistema bipartido em dois subsistemas,  $A$  (o bloco) e  $B$  (o ambiente), com o sistema total em um estado puro  $|\psi\rangle$ , a matriz densidade reduzida de  $A$  (3.2). Os autovalores  $\lambda_i$  de  $\rho_A$  representam as probabilidades associadas aos autoestados do subsistema  $A$ . A soma desses autovalores é sempre igual a 1.

A **truncagem** é realizada selecionando os  $m$  autoestados correspondentes aos maiores autovalores  $\lambda_i$ . Esses estados formam uma nova base truncada para o bloco  $A$ . Os autovalores negligenciados — associados a estados com baixa probabilidade e pequena contribuição para o emaranhamento — são descartados. O número  $m$  (conhecido como *bond dimension*) é um parâmetro chave do DMRG: valores maiores de  $m$  garantem maior precisão, mas aumentam o custo computacional.

A entropia de emaranhamento, definida como:

$$S = - \sum_i \lambda_i \ln \lambda_i, \quad (3.3)$$

quantifica o grau de correlação entre o bloco  $A$  e o ambiente  $B$ . Para sistemas com gap, os autovalores da matriz densidade reduzida tendem a decair rapidamente, permitindo uma truncagem eficiente com pouca perda de informação. Já em sistemas críticos, o crescimento logarítmico da entropia exige valores maiores de  $m$  para manter a mesma precisão, tornando as simulações mais custosas.

### 3.2 ESTADOS DE PRODUTOS DE MATRIZES (MPS)

O **Density Matrix Renormalization Group (DMRG)** não é apenas um algoritmo numérico; ele constrói implicitamente uma classe específica de estados quânticos que se mostrou extremamente poderosa para descrever sistemas unidimensionais: os **Estados de Produtos de Matrizes (Matrix Product States - MPS)**. O formalismo MPS fornece uma representação compacta e eficiente para estados quânticos de muitos corpos que obedecem à lei da

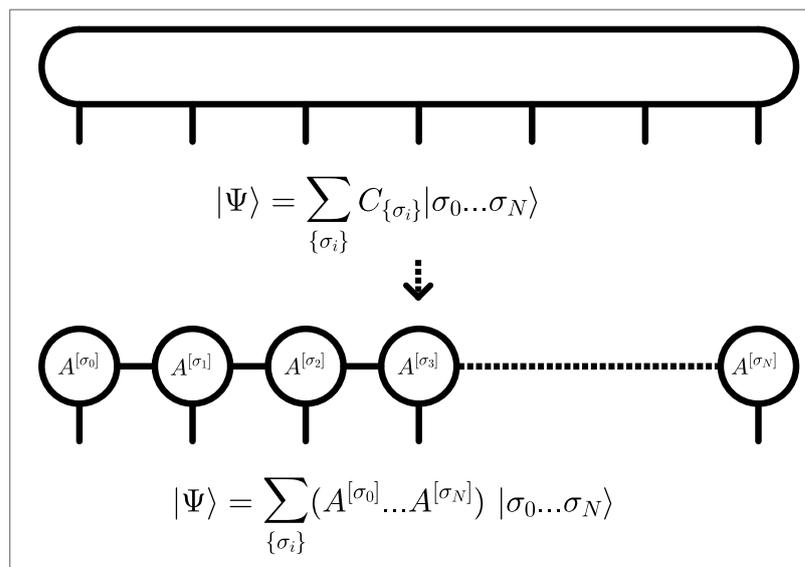
área de entropia de emaranhamento, que já discutimos. De fato, o sucesso do DMRG pode ser compreendido como a sua capacidade de otimizar um estado do tipo MPS para encontrar o estado fundamental de um dado Hamiltoniano.

### 3.2.1 Formalismo MPS

Um estado quântico de  $N$  sítios,  $|\psi\rangle$ , geralmente exigiria um número exponencial de coeficientes  $C_{\sigma_1\sigma_2\dots\sigma_N}$ , pode ser escrito na forma MPS como:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} A_{[1]}^{\sigma_1} A_{[2]}^{\sigma_2} \cdots A_{[N]}^{\sigma_N} |\sigma_1 \cdots \sigma_N\rangle. \quad (3.4)$$

Figura 12 – Método do MPS ilustrado. Inicialmente um tensor com muitas entradas é fatorado em várias matrizes.



Fonte: Elaborada pelo autor.

Nesta expressão, cada  $A_{[j]}^{\sigma_j}$  é uma matriz associada ao sítio  $j$  e ao estado local  $\sigma_j$  (e.g., spin up ou spin down). Para o primeiro e último sítios, as matrizes se reduzem a vetores – do tipo  $1 \times m$  no primeiro sítio e  $m \times 1$  no último –, enquanto para os sítios intermediários são matrizes de dimensão  $m_{j-1} \times m_j$ . As dimensões  $m_j$  são conhecidas como **bond dimensions** (ou dimensões de ligação) e são diretamente relacionadas ao parâmetro  $m$  discutido no DMRG. A cada ligação (ou “bond”) entre os sítios  $j$  e  $j + 1$ , a dimensão  $m_j$  limita o número de estados virtuais que podem ser emaranhados, e é essa limitação que torna a representação MPS eficiente.

A grande vantagem do formalismo MPS é que o número de parâmetros necessários para representar o estado cresce linearmente com o número de sítios,  $N \times d \times m^2$  (onde  $d$  é a dimensão local e  $m$  é a *bond dimension* máxima), em contraste com o crescimento exponencial da representação completa do vetor de estado.

O DMRG, em sua essência, é um algoritmo variacional que otimiza os tensores (as matrizes  $A_{[j]}^{\sigma_j}$ ) de um estado MPS para encontrar o estado fundamental de um hamiltoniano. A varredura de um lado para o outro na cadeia, a construção dos blocos e a truncagem pela matriz densidade reduzida são, de fato, operações que atualizam e otimizam esses tensores MPS, minimizando a energia do sistema. Portanto, um estado fundamental obtido via DMRG é intrinsecamente um estado MPS otimizado.

### 3.2.2 Lei da Área e Eficiência do MPS

A eficácia dos MPS na descrição de estados fundamentais de sistemas unidimensionais com gap — ou seja, sistemas com um **gap de energia** finito entre o estado fundamental e o primeiro excitado — é justificada pela **lei da área para a entropia de emaranhamento** (SCHOLLWÖCK, 2011; CRAMER et al., 2006; CALABRESE; CARDY, 2004; LEGEZA; SÓLYOM, 2004; VIDAL et al., 2003). Nesses sistemas, a entropia de emaranhamento de um subsistema de tamanho  $L$  em uma cadeia infinita tende a saturar em um valor constante,  $S \sim \text{const.}$ , independentemente de  $L$ . Isso significa que a quantidade de informação necessária para descrever o emaranhamento entre duas partes do sistema não cresce com o tamanho das partes, mas apenas com a “fronteira” entre elas — que, em 1D, é um único ponto.

Essa característica é crucial porque a *bond dimension*  $m$  de um MPS determina a quantidade de emaranhamento que o estado pode representar. Especificamente, a entropia de emaranhamento  $S$  está limitada por  $S \leq \log_2 m$ . Assim, para sistemas que obedecem à lei da área, um valor constante e finito de  $m$  é suficiente para representar o estado com alta fidelidade.

Em contraste, para sistemas críticos unidimensionais — como a cadeia de Heisenberg de spin-1/2 — a entropia de emaranhamento cresce de forma logarítmica com o tamanho do subsistema:  $S \sim \frac{c}{3} \ln L$ , onde  $c$  é a **carga central** da teoria de campos conformes que descreve o ponto crítico. Nesses casos, a *bond dimension*  $m$  deve crescer polinomialmente com o sistema para manter a mesma precisão, tornando as simulações com DMRG/MPS mais desafiadoras, embora ainda bastante eficientes quando comparadas a outras abordagens.

### 3.3 IMPLEMENTAÇÃO PRÁTICA: O PACOTE ITENSOR

Compreender a teoria e os algoritmos por trás do DMRG e dos MPS é essencial, mas a aplicação prática em problemas reais exige ferramentas computacionais robustas. Diversas bibliotecas implementam o DMRG e operações com redes de tensores. Nesta dissertação, utilizamos o pacote **ITensor** (*Intelligent Tensor*) (FISHMAN; WHITE; STOUDEMIRE, 2022).

O ITensor é uma biblioteca de código aberto, com versões em C++ e Julia. Sua versão em Julia (ITensor.jl) oferece desempenho elevado aliado a uma interface expressiva, sendo projetada especificamente para cálculos envolvendo redes de tensores como MPS e MPO (Operadores de Produto de Matrizes).

Entre suas principais características, destacam-se:

- **Interface intuitiva:** ITensor abstrai os detalhes de baixo nível da manipulação de tensores, facilitando a implementação de algoritmos sofisticados. Sua sintaxe baseada em índices é fortemente inspirada na notação de Einstein, tornando o código mais legível e próximo da notação teórica.
- **Aproveitamento de simetrias:** O pacote permite incluir simetrias explícitas no sistema (como conservação de  $S^z$  ou número de partículas), reduzindo significativamente o custo computacional ao trabalhar apenas no subespaço relevante do espaço de Hilbert.
- **Desempenho elevado:** Escrita em Julia, a biblioteca combina a flexibilidade de uma linguagem de alto nível com desempenho comparável ao C++. Isso torna viável a simulação de sistemas extensos ou altamente correlacionados com eficiência.
- **Ecossistema e documentação:** O ITensor se integra bem com o ecossistema de Julia para computação científica, paralelização e visualização, e conta com documentação extensa, exemplos claros e uma comunidade ativa.

A seguir, apresentamos um exemplo de código baseado na lógica do ITensor.jl, que implementa uma simulação DMRG para uma cadeia de spin-1/2 com interação de Heisenberg:

```
using ITensors
```

```
N = 100 # Número de sítios
```

```
sites = siteinds("S=1/2", N) # Conjunto de sítios de spin-1/2
```

---

```

# Construção do Hamiltoniano de Heisenberg
ampo = OpSum()
for j = 1:N-1
    ampo += "Sz", j, "Sz", j+1
    ampo += 0.5, "S+", j, "S-", j+1
    ampo += 0.5, "S-", j, "S+", j+1
end
H = MPO(ampo, sites)

# Estado inicial aleatório com dimensão de ligação inicial 10
psi0 = randomMPS(sites, 10)

# Parâmetros do DMRG
nsweeps = 10
maxdim = [20, 40, 80, 100, 200]
cutoff = [1E-8]

# Execução do algoritmo
energy, psi = dmrg(H, psi0; nsweeps, maxdim, cutoff)

println("Energia do estado fundamental = $(energy)")

```

Esse exemplo ilustra como o ITensor facilita a construção de Hamiltonianos, definição de estados iniciais e execução do DMRG com controle preciso sobre os parâmetros numéricos. A clareza da estrutura permite focar no modelo físico e em sua interpretação, sem se perder em detalhes técnicos de implementação.

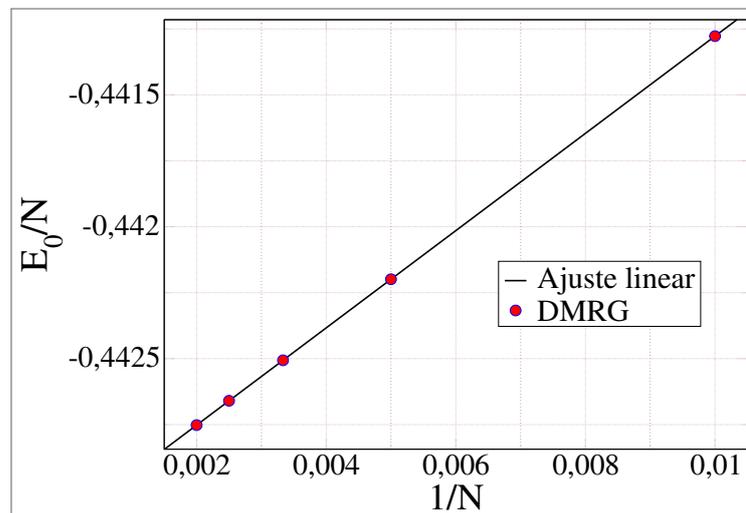
### 3.3.1 Cadeia de Spin-1/2 antiferromagnética de Heisenberg

A análise do estado fundamental de uma cadeia de Heisenberg com spin  $S = 1/2$  e acoplamento antiferromagnético exige atenção a diversos aspectos sutis. O acoplamento deste tipo, para o caso do hamiltoniano de Heisenberg isotrópico (Equação 2.10 na Seção 2.1) é dado

por  $J > 0$ , pois assim o perfilamento antiparalelo é preferido pelos spins. Nesse caso, haveria a formação de um antiferromagneto. Contudo, como demonstrado pelos teoremas de Shastry (SHASTRY, 1992) e Lieb-Mattis (LIEB; MATTIS, 1962b) (2.2.1), as flutuações quânticas em uma dimensão são fortes o suficiente para impedir a formação de ordem magnética de longo alcance.

Para o caso descrito, foram simulados cinco tamanhos de cadeia  $N$  (100, 200, 300, 400 e 500) e a energia foi colhida. Na figura 13, é apresentada a energia por sítio  $E_0/N$  em função do inverso do tamanho da cadeia.

Figura 13 – Energia do estado fundamental de uma cadeia de Heisenberg com spin  $S = 1/2$  em função do número inverso de sítios. De vermelho estão os pontos obtidos pela simulação. O ajuste linear dos mesmos é representado pela reta preta. Foram simulados cinco tamanhos de cadeia  $N = 100, 200, 300, 400$  e  $500$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Através do ajuste linear, é possível extrapolar o valor da energia por sítio para o limite termodinâmico, isto é,  $N \rightarrow \infty$ . Foi obtido o valor de  $E_0/N = -0,443120$ , valor que está consonante com o previsto pelo Bethe Ansatz:  $E_0/N = -0,44317$  (BETHE, 1931; WHITE, 1992).

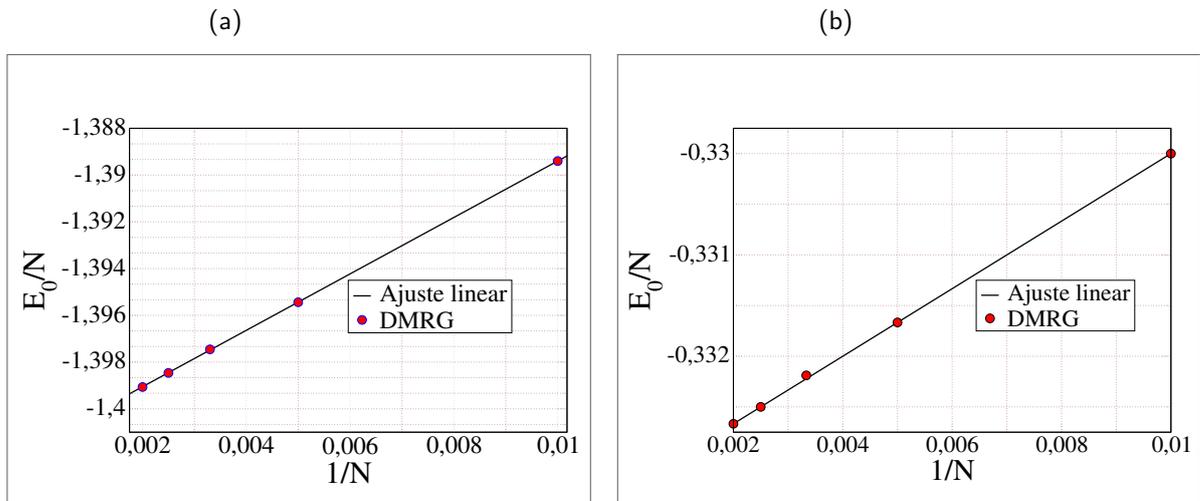
### 3.3.2 Cadeia de Heisenberg e Modelo AKLT (Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki) de Spin-1

O modelo AKLT (AFFLECK et al., 1987) é um marco teórico para a fase de Haldane. Seu estado fundamental é um *spin liquid* com ordem topológica, explicitando propriedades-chave como bordas magnéticas e um gap robusto. Sua inclusão aqui serve como referência para

validar não apenas nosso método numérico, mas também a transição de fases na cadeia de spin-1 de Heisenberg.

A energia por sítio e os estados de borda do modelo AKLT e da cadeia de spin-1 é analisada a seguir. Na figura 14a é exibida a energia por sítio da cadeia de spin-1 e na figura 14b é mostrada para o caso AKLT.

Figura 14 – Energia do estado fundamental por sítio de cadeias quânticas em função do número inverso de sítios. De vermelho estão os pontos obtidos através da simulação e de preto está a reta que foi ajustada através dos mesmos. Foram simulados cinco tamanhos de cadeia  $N = 100, 200, 300, 400$  e  $500$ .



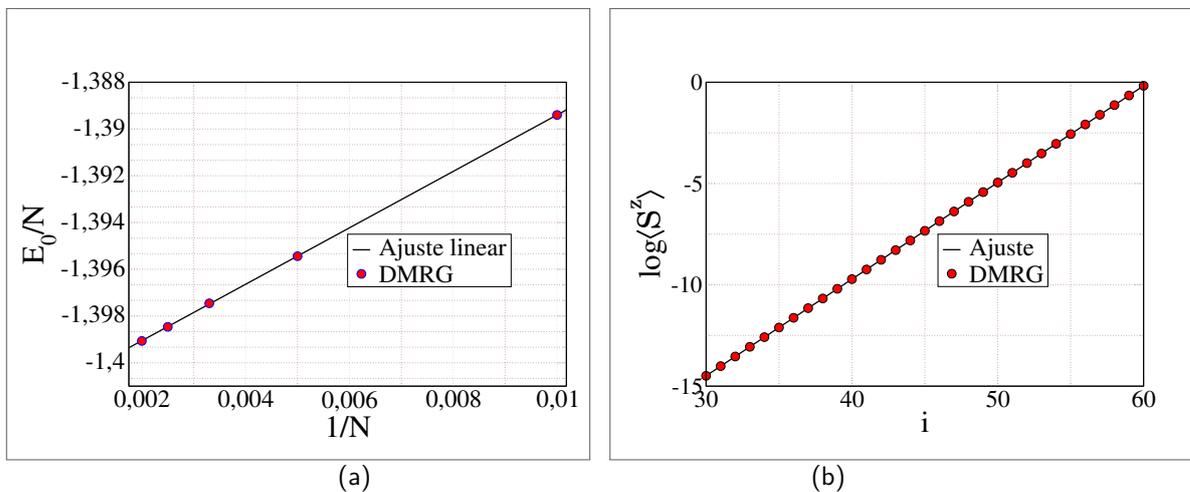
Fonte: Elaborada pelo autor.

Da mesma forma, para cadeias de mesmos  $N$ , os gráficos são lineares. O mesmo ajuste foi feito, fornecendo energias de  $-0.589839$  para o caso Heisenberg e  $-0.701978$  para o AKLT, respectivamente (WHITE, 1992; AFFLECK et al., 1987). Apesar da previsão teórica para o caso AKLT ter um *offset* de valor  $1/3$  (referente à constante no Hamiltoniano, Equação 2.19), os resultados correspondem às previsões.

Pelo fato de ser uma fase topológica, a cadeia de  $S = 1$  de Heisenberg com o acoplamento antiferromagnético possui características próprias, como a formação dos estados de borda (MIYASHITA; YAMAMOTO, 1993; HAGIWARA et al., 1990). Esse fenômeno se deve à fracionalização dos spins, que, ao serem excitados, formam quase-partículas com o valor de spin semi-inteiro, conhecidas como mágnons, as quais se concentram nas bordas. Esse comportamento resulta em uma separação clara entre os estados de borda — onde as excitações se concentram — e o **Bulk State**, a região central da cadeia caracterizada por magnetização líquida praticamente nula. Tal separação confere robustez à cadeia contra perturbações externas, protegendo a integridade do estado fundamental.

Os spins da borda, para o caso de  $N$  finito, levam a uma degenerescência quádrupla: afinal, eles se acoplam podendo formar um singlete ou três tripletos. No limite termodinâmico, a degenerescência some, resultando no estado fundamental único. Para visualizar esses estados de borda, se acopla um spin  $1/2$  à cadeia de spin  $1$  com  $N = 60$  sítios. O resultado é apresentado na Figura 15. O ajuste foi feito com o intuito de captar o comportamento devido ao *Bulk State*, assim, considerou-se o efeito entre os spins  $i = 20$  e  $i = 40$ .

Figura 15 – Energia do estado fundamental por sítio de cadeias quânticas em função do número inverso de sítios. De vermelho estão os pontos obtidos através da simulação e de preto está a reta que foi ajustada através dos mesmos. Foram simulados cinco tamanhos de cadeia  $N = 100, 200, 300, 400$  e  $500$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Como esperado, as cadeias tanto de spin  $1$  quanto AKLT possuem decaimento exponencial das funções de spin. Com as excitações concentradas nas bordas, a magnetização local cai rapidamente em direção ao centro, para depois subir novamente, como mostrado na Figura 15b para o caso AKLT. Com o acoplamento de um spin  $1/2$  em 15a é possível quebrar a excitação inicial, tendo neste caso concentração somente no final. Substituindo a magnetização local no eixo  $y$  pelo logaritmo do módulo do mesmo, em função do  $i$ -ésimo sítio, obtém-se uma reta. Com o ajuste linear em escala logarítmica, é possível extrair o comprimento de correlação que é o inverso do coeficiente linear — conforme previsto pela Equação 2.17 na Seção 2.2. Os valores coincidiram com os existentes na literatura, sendo  $\xi = 6.031$  para o caso spin  $1$  (tal qual o observado por White) (WHITE, 1992) e de  $\xi = 0.9102$  no caso AKLT (AFFLECK et al., 1987).

Esses spins na borda levaram os autores Affleck et al. a prepararem um estado de produto de singletos para o estado fundamental de spin  $1$ . Ao simetrizá-los, é possível obter  $S_{total} = 1$ .

Inclusive, essas razões, tais quais a formação da borda e do *Bulk State*, se misturam com a existência de um poço de energia entre o estado fundamental e os excitados. Para chegar no  $S^z = 2$ , o primeiro excitado, é preciso “vencer” primeiro o tripleto — também conhecido como tripleto de Kennedy (KENNEDY, 1990) — formado pelos spins da borda que se acoplam. É preciso superar o gap de Haldane de valor  $\Delta_H = 0.41J$  (WHITE, 1992).

Para tanto, as energias dos estados  $S^z = 2$  e  $S^z = 1$  também foram simuladas para os mesmos valores de  $N$ . Os resultados são obtidos ao subtrair o segundo do primeiro. Também coincidiram com a previsão teórica, mostrados na Tabela 1.

Tabela 1 – Gap de Haldane da cadeia de spin  $S = 1$  comparado com o modelo AKLT.

| 1/N   | Gap Heisenberg $S = 1$ | Gap AKLT |
|-------|------------------------|----------|
| 0.010 | 0.417622               | 0.350804 |
| 0.005 | 0.413184               | 0.35106  |
| 0.003 | 0.413099               | 0.350989 |
| 0.002 | 0.413098               | 0.350987 |
| 0.002 | 0.413101               | 0.351190 |

**Fonte:** Elaborada pelo autor (2025)

Outro estudo importante, talvez o principal, é a curva de magnetização das cadeias. Ela é obtida a partir das diferenças de energia entre estados consecutivos de magnetização total  $S^z$ . O campo necessário para induzir a transição entre esses estados é dado por

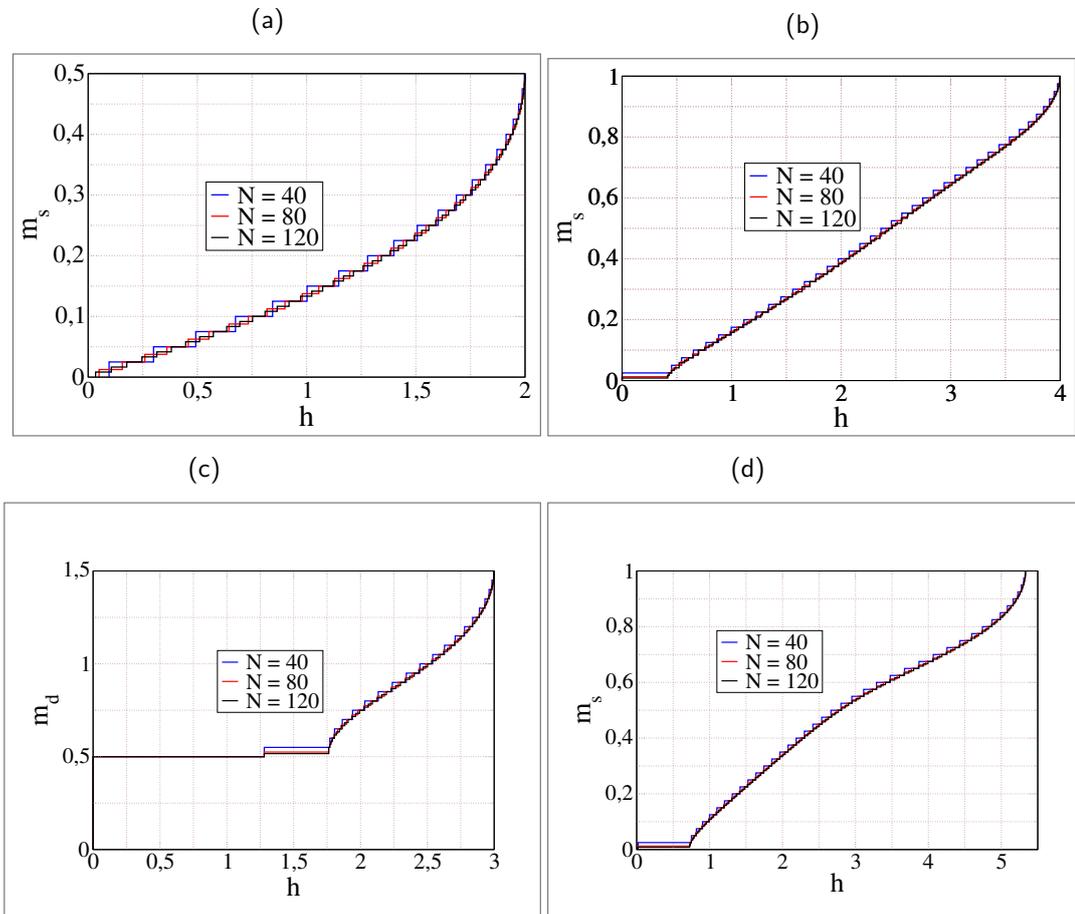
$$E(S_z + 1) - E(S_z) = h_t, \quad (3.5)$$

onde  $h_t$  é o campo necessário para levar para o próximo estado da fila.

Assim, foi necessário simular todos os valores de  $S^z$  das cadeias. O objetivo é plotar a magnetização  $m$  normalizada (isto é, dividida pela quantidade de sítios) em função do campo aplicado  $h_t$ . As curvas foram feitas para três tamanhos de cadeia ( $N = 40, 80$  e  $120$ ) para três casos de Heisenberg e o AKLT. Além do caso de spin um e spin meio, também foi feito para uma cadeia mista destes mesmos spins, alternadamente dispostos. O resultado é anunciado na Figura 16.

Como previsto, é possível ver a representação do gap nos casos spin 1 e AKLT, mostrado nas Figuras 16b e 16d, através dos platôs presentes no início das curvas. Da mesma forma que não há no caso de spin meio (Figura 16a), somente uma curva que cresce monotonicamente

Figura 16 – Curvas de magnetização ( $m$ ) em função do campo magnético externo ( $h$ ) para diferentes configurações de cadeia e tamanhos  $N$ . Resultados para  $N = 40, 80$  e  $120$ . Cadeia de Heisenberg  $S=1/2$ . Cadeia de Heisenberg  $S=1$ . Cadeia mista de Heisenberg com spins alternados. Cadeia AKLT  $S=1$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

— com exceção do platô esperado para o  $S^z$  máximo, o caso saturado em todas as curvas de magnetização. Com o aumento de  $N$ , mais precisa a representação e degraus menores são mostrados.

A Figura 16c também possui um platô no início, apesar de não ser uma cadeia de spin  $S$  inteiro. Este platô, por outro lado, é diferente, não se trata de um devido ao gap de Haldane, mas surge por conta da mistura de spins. A normalização da curva foi feita pela divisão do número de dímeros  $n_d = N/2$ . Esse caso não se trata de estados desordenados como foi visto nas seções de spin semi-inteiros e inteiros, é um caso de ordenamento *ferrimagnético* da cadeia de Heisenberg. Com o intuito de minimizar a energia, os spins de valor  $S$  diferentes apontam em sentidos opostos. O resultado é um estado fundamental com magnetização  $m = S^z/2$ . Esse platô é consistente com a condição de quantização da magnetização prevista pelo critério de Oshikawa-Yamanaka-Affleck (OYA), apresentada na equação 2.15 na seção 2.2 do capítulo

anterior.

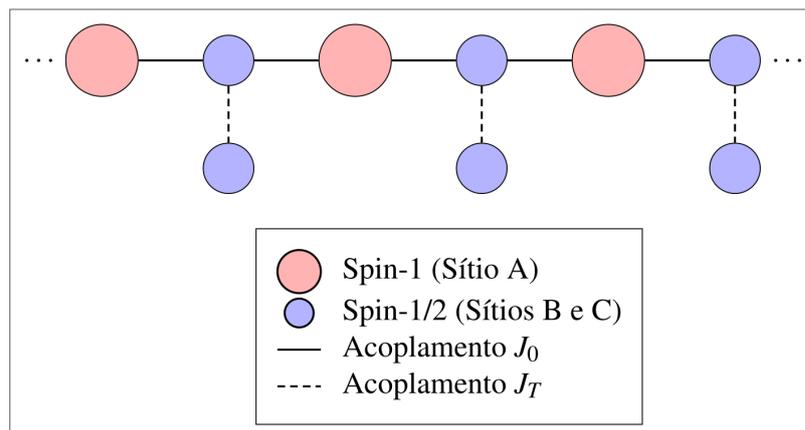
As técnicas aqui validadas – desde a implementação do DMRG via *ITensor* até a análise de curvas de magnetização – serão diretamente aplicadas no próximo capítulo. Investiga-se a **cadeia de T-trímeros**, um sistema com acoplamentos assimétricos e frustração, onde fenômenos como transições de fase topológica e estados magnéticos exóticos serão explorados à luz dos resultados de referência aqui obtidos.

## 4 RESULTADOS

Este capítulo apresenta os resultados fundamentais da investigação numérica da cadeia de T-trímeros por meio do método DMRG. Identificou-se uma transição de fase quântica em  $J_T = 0$ , que separa dois regimes distintos: uma fase ferrimagnética ( $J_T > 0$ ) caracterizada por magnetização espontânea não-nula e ausência de gap, e uma fase antiferromagnética ( $J_T < 0$ ) com estados de borda topológicos e gap finito. Através de análises sistemáticas de energia, magnetização local, curvas de magnetização sob campo externo e gaps de energia, demonstrou-se como a competição entre escalas intra e inter-trímero governa o comportamento quântico deste sistema. Particularmente, revelamos que o gap na fase antiferromagnética ( $\Delta \approx 0,195$ ) é quase 50% menor que o valor canônico do gap de Haldane para cadeias de spin-1 puro ( $\Delta_h \approx 0,41$ ), indicando a influência decisiva dos spins-1/2 terminais na renormalização das propriedades topológicas.

### 4.1 O MODELO T-TRÍMEROS

Figura 17 – Representação esquemática da cadeia T-Trímeros. Cada unidade celular contém: (1) um spin-1 no sítio A (vermelho), (2) um spin-1/2 no sítio B (azul, ramo principal), e (3) um spin-1/2 no sítio C (azul, pendurado). As interações  $J_0$  (linha sólida) conectam os sítios A-B e B-A entre células, enquanto  $J_T$  (linha tracejada) conecta B-C dentro da mesma célula.



Fonte: Elaborada pelo autor.

O modelo da cadeia T-trímeros é composto por unidades celulares periódicas que consistem em três sítios de spin: um spin-1 ( $\vec{S}_{j,A}$ ) e dois spins-1/2 ( $\vec{S}_{j,B}$  e  $\vec{S}_{j,C}$ ). A sequência de spins ao longo da cadeia é composta alternadamente por spin-1 e spin-1/2, com um spin-1/2 adicional acoplado abaixo de cada spin-1/2 da cadeia principal, formando uma estrutura em forma de “T”. A representação esquemática de uma unidade celular é dada pela figura 17.

O Hamiltoniano de Heisenberg isotrópico que descreve este sistema é dado por:

$$H = \sum_j \left[ J_0 \left( \vec{S}_{j,A} \cdot \vec{S}_{j,B} + \vec{S}_{j,B} \cdot \vec{S}_{j+1,A} \right) + J_T \vec{S}_{j,B} \cdot \vec{S}_{j,C} \right]. \quad (4.1)$$

Neste modelo, os índices  $j$  percorrem as células unitárias ao longo da cadeia, cada uma composta por três sítios de spin. Em cada célula, há um trímero formado por um spin-1, representado por  $\vec{S}_{j,A}$ , e dois spins-1/2: o primeiro,  $\vec{S}_{j,B}$ , ocupa o ramo principal da cadeia, enquanto o segundo,  $\vec{S}_{j,C}$ , está acoplado, como um spin pendurado à estrutura principal.

As interações entre esses spins são determinadas por dois parâmetros principais. O primeiro,  $J_0$ , é uma constante de acoplamento antiferromagnética que conecta o spin-1 ao spin-1/2 do ramo principal dentro da mesma célula unitária, assim como conecta o spin-1/2 do ramo principal com o spin-1 da próxima célula. Em todas as nossas simulações, este parâmetro foi mantido fixo em  $J_0 = 1$ . O segundo parâmetro,  $J_T$ , controla a interação entre o spin-1/2 do ramo principal e o spin-1/2 pendurado. Seu sinal pode ser positivo ou negativo, correspondendo a acoplamentos antiferromagnéticos ou ferromagnéticos, respectivamente. Ele foi o principal parâmetro variado ao longo deste estudo.

A estrutura em T impõe uma competição intrínseca entre escalas de energia: as interações intra-trímero ( $J_T$  e  $J_0$ ) atuam em uma escala local, enquanto a interação inter-trímero ( $J_0$ ) define o acoplamento ao longo da espinha dorsal magnética. Essa hierarquia é crítica, especialmente quando  $J_T < 0$ , onde o alinhamento ferromagnético dos spins  $B$  e  $C$  em um trímero entra em conflito com a tendência antiferromagnética entre trímeros adjacentes. Geometricamente, a assimetria entre os sítios (spin-1 central vs. spins-1/2 terminais) quebra a simetria de translação convencional, criando um background ideal para fases topológicas, como potenciais análogos ao estado de Haldane. O parâmetro  $J_T$ , portanto, não apenas modula a força das interações locais, mas também atua como um parâmetro de controle quântico responsável por sintonizar transições entre ordens magnéticas distintas.

### 4.1.1 Detalhes da Simulação DMRG

Tabela 3 – Parâmetros principais utilizados nas simulações DMRG.

| Parâmetro                                   | Descrição   |
|---|---|
| <b>Tamanho da cadeia (<math>N</math>)</b>   | As simulações consideraram cadeias com número total de sítios variando de $N = 60$ a $N = 720$ , com valores específicos em $N = 60, 90, 120, 240, 480$ e $720$ . Cada trímero contribui com três sítios (um de spin-1 e dois de spin-1/2). Foram adotadas condições de contorno abertas. |
| <b>Dimensão de ligação (<math>m</math>)</b> | A precisão dos cálculos foi controlada pela <i>bond dimension</i> máxima permitida, que variou de $m = 4$ a $2000$ , aumentando gradualmente ao longo das varreduras para garantir a convergência e a fidelidade do estado fundamental (veja Seção 3.2.1).                                |
| <b>Número de varreduras (<i>sweeps</i>)</b> | O número total de varreduras do algoritmo DMRG variou entre 30 e 70, conforme o conjunto de parâmetros simulados (por exemplo, para cada valor de $J_T$ ).  |
| <b>Cutoff de truncamento</b>                | O erro máximo tolerado na truncagem de autovalores da matriz densidade foi, em geral, fixado em valores muito baixos, como $10^{-10}$ , para garantir alta precisão nos resultados.   |
| <b>Termo de ruído (<i>noise</i>)</b>        | Em etapas iniciais de algumas simulações, foi incluído um termo de ruído artificial com magnitude típica entre $10^{-6}$ e $10^{-9}$ , visando evitar aprisionamento em mínimos locais e acelerar a convergência. Esse ruído foi gradualmente reduzido nas varreduras subsequentes.       |
| <b>Método de Krylov</b>                     | Em certos casos, a diagonalização foi realizada utilizando o método de subespaço de Krylov, com dimensão padrão de 3. Entretanto, em alguns casos, foi utilizada a dimensão de valor 7 e 10, o que aumenta consideravelmente o tempo de simulação.  |

**Fonte:** Elaborada pelo autor (2025).

As simulações numéricas da cadeia de T-trímeros foram realizadas com o algoritmo DMRG, tal como implementado na biblioteca *ITensor*, utilizando a linguagem de programação Julia. Os parâmetros computacionais foram ajustados conforme a necessidade de cada execução, sendo os principais resumidos na Tabela 3.

## 4.2 RESULTADOS DE ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL

O primeiro resultado obtido foi o das energias da cadeia. Nele estão inclusos os casos do estado fundamental e os casos com  $S^z = 1$  e  $S^z = 2$ . Estes resultados fornecem *insights* cruciais sobre a natureza da fase quântica do sistema, como a existência ou não de gap de energia.

As energias do estado fundamental ( $E_0$ ) foram calculadas para diferentes tamanhos de cadeia T-trímeros e para uma gama de valores do parâmetro de acoplamento intra-trímero,  $J_T$ , mantendo fixo o acoplamento principal  $J_0 = 1$ . A energia de  $S^z = 0$  por sítio ( $E_0/N$ ) é uma quantidade importante para analisar o comportamento da cadeia no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). As simulações foram realizadas para cadeias com  $N = 120, 240$  e  $480$  sítios, cobrindo um conjunto de acoplamentos  $J_T \in \{1; 0,5; -0,5; -1; -1,5; -2; -2,5; -3; -3,5; -4\}$ .

## 4.3 RESULTADOS DE ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL

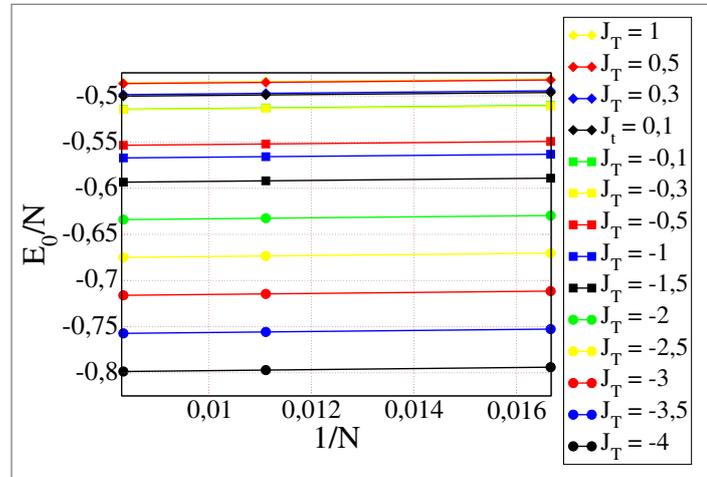
O primeiro resultado obtido foi o das energias da cadeia. Nele estão inclusos os casos do estado fundamental e os casos com  $S^z = 1$  e  $S^z = 2$ . Estes resultados fornecem *insights* cruciais sobre a natureza da fase quântica do sistema, como a existência ou não de gap de energia.

As energias do estado fundamental ( $E_0$ ) foram calculadas para diferentes tamanhos de cadeia T-trímeros e para uma gama de valores do parâmetro de acoplamento intra-trímero,  $J_T$ , mantendo fixo o acoplamento principal  $J_0 = 1$ . A energia de  $S^z = 0$  por sítio ( $E_0/N$ ) é uma quantidade importante para analisar o comportamento da cadeia no limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ). As simulações foram realizadas para cadeias com  $N = 120, 240$  e  $480$  sítios, cobrindo um conjunto de acoplamentos  $J_T \in \{1; 0,5; -0,5; -1; -1,5; -2; -2,5; -3; -3,5; -4\}$ .

Conforme observado na Figura 18, para cada valor de  $J_T$ , a energia por sítio exibe uma clara dependência com o tamanho finito do sistema. As curvas mostram uma tendência linear (ou quase linear) para os tamanhos de cadeia maiores. A extrapolação para o limite termodinâmico ( $1/N \rightarrow 0$ ) foi realizada através do ajuste linear entre os dois maiores valores de  $N$  simulados ( $N = 240$  e  $N = 480$ ). O coeficiente linear desse ajuste foi utilizado como a estimativa da energia do estado fundamental no limite termodinâmico  $E_0$ .

Para valores positivos de  $J_T$  (1,0 e 0,5), as curvas de  $E_0/N$  vs.  $1/N$  são bastante planas, indicando uma rápida convergência para o limite termodinâmico e menor influência de efeitos

Figura 18 – Energia do estado fundamental por sítio ( $E_0/N$ ) da cadeia T-trímeros em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de  $J_T$  (ferromagnéticos e antiferromagnéticos). Os pontos representam os dados obtidos por DMRG e as linhas contínuas indicam extrapolações para o limite termodinâmico ( $1/N \rightarrow 0$ ).



Fonte: Elaborada pelo autor.

de borda. À medida que  $J_T$  se torna mais negativo, a inclinação dessas curvas aumenta ligeiramente, sugerindo uma maior dependência do tamanho do sistema, embora a convergência continue robusta. Os valores extrapolados para  $E_0/N$  no limite termodinâmico variam aproximadamente de  $-0,5$  para  $J_T = 1,0$  até  $-0,8$  para  $J_T = -4$ , apresentando uma tendência monotonicamente decrescente com  $J_T$ .

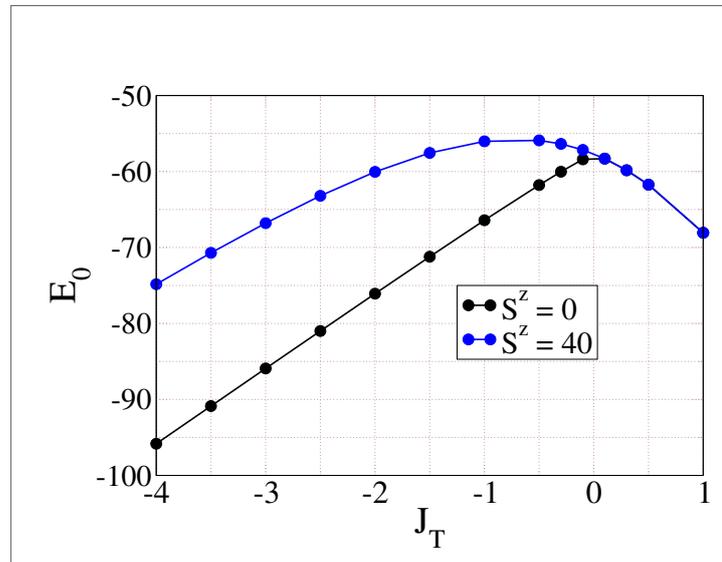
A degenerescência entre os estados com acoplamento positivo/negativo é evidente ao analisar a energia do estado fundamental em função do parâmetro de acoplamento  $J_T$ . A Figura 19 apresenta a energia do estado fundamental ( $E_0$ ), juntamente com a energia do estado excitado no setor  $S^z = 40$ . As simulações para este gráfico foram realizadas para o tamanho de cadeia de  $N = 120$  sítios.

Para valores positivos de  $J_T$ , a energia por sítio para  $S^z = 0$  decai com o aumento de  $J_T$ . Neste regime, as energias para  $S^z = 0$  e  $40$  são coincidentes ou muito próximas, sugerindo que o sistema se encontra em uma **fase ferrimagnética**. Nela, a magnetização total do estado fundamental é não nula, e os estados com magnetização total crescente são degenerados com o estado  $S^z = 0$ .

À medida que  $J_T$  se torna negativo (diminui de 0 para valores mais negativos), observa-se uma mudança abrupta no comportamento da energia. Para  $J_T < 0$ , a curva de energia para  $S^z = 0$  decresce quase que linearmente com  $J_T$ .

A curva de  $S^z = 40$  também apresenta uma mudança em  $J_T = 0$ , mas de forma mais suave. Embora sua energia decaia para  $J_T < 0$ , ela permanece em valores significativamente

Figura 19 – Energia no setor  $S^z = 0$  (linha preta) e setor excitado ( $S^z = 40$ ) para  $N = 120$  em função do acoplamento  $J_T$ . A degenerescência contrasta o comportamento para  $J_T$  positivo e negativo.



Fonte: Elaborada pelo autor.

mais altos em comparação com os setores de baixa magnetização, confirmando que  $S^z = 40$  representa um estado altamente excitado.

#### 4.4 MAGNETIZAÇÃO LOCAL

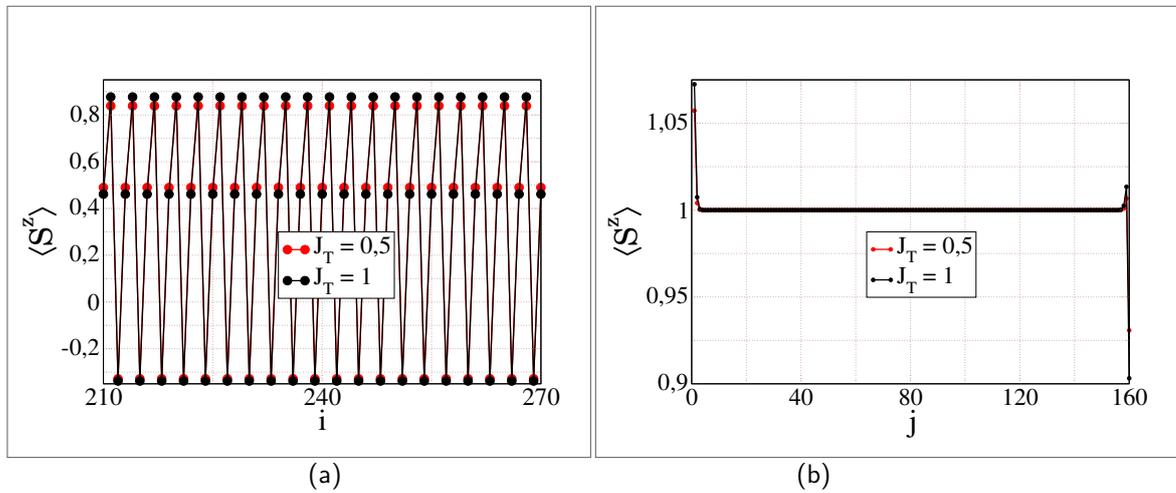
A magnetização local,  $\langle S_i^z \rangle$ , pode ser usada para inferir a estrutura do estado fundamental e a presença de diferentes tipos de ordem magnética nas cadeias T-trímeros.

##### 4.4.1 Perfis de Magnetização para $J_T > 0$ (Fase Ferrimagnética)

Para valores positivos do acoplamento intra-trímero ( $J_T > 0$ ), a cadeia T-trímeros exibe um comportamento magnético característico de uma fase ferrimagnética. A Figura 20a ilustra o perfil da magnetização local  $\langle S_i^z \rangle$  em função da posição do sítio ao longo da cadeia com  $N = 480$  sítios, para os valores  $J_T = 0,5$  e  $J_T = 1$ . Os sítios foram ordenados segundo a sequência ( $i = 1, 2, 3, 4, 6..$ ) dos spins em cada trímero  $j$ , respectivamente ( $A_1, B_1, C_1, A_2, B_2, C_2...$ ). De maneira similar, a magnetização local foi construída em função de cada trímero  $j$  em 20b.

A Figura 20 demonstra um padrão de magnetização local que se repete com precisão para cada unidade de trímero ao longo da cadeia, para ambos os valores de  $J_T$  (0,5 e 1). Especificamente para  $J_T = 1$ : o spin-1 (sítio central do trímero,  $\vec{S}_{j,A}$ ) apresenta uma magnetização

Figura 20 – Perfis de magnetização local para  $J_T > 0$  (Fase Ferrimagnética) com  $N = 480$  sítios. Em (a) a magnetização local  $\langle S_i^z \rangle$  em função da posição do sítio  $i$  para a cadeia de T-trímeros com  $J_T = 0,5$  e  $J_T = 1$  (comportamento ferrimagnético). Em (b) a magnetização local é mostrada em função do  $j$ -ésimo trímero.



Fonte: Elaborada pelo autor.

$\langle S_{j,A}^z \rangle$  de aproximadamente 0,9; o spin-1/2 do ramo principal ( $\vec{S}_{j,B}$ ) exibe uma magnetização de aproximadamente -0,3; e o spin-1/2 pendurado ( $\vec{S}_{j,C}$ ) mostra uma magnetização positiva em torno de 0,4.

#### 4.4.2 Perfis de Magnetização para $J_T < 0$ (Fase Tipo Haldane)

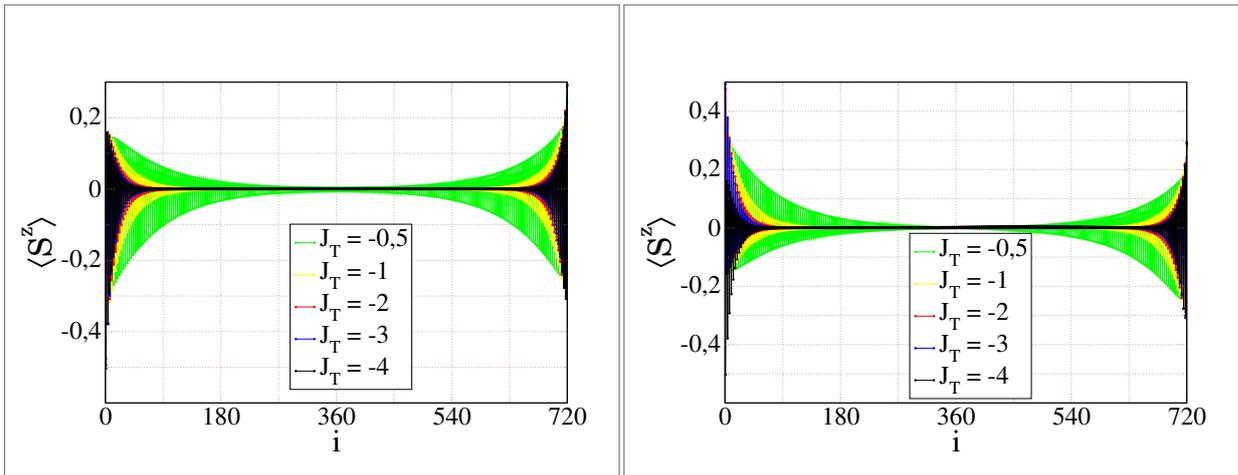
Para valores negativos do acoplamento ( $J_T < 0$ ), a cadeia T-trímeros assume uma fase com características do tipo Haldane. A Figura 21 mostra como o padrão de magnetização varia ao longo da cadeia para acoplamentos negativos  $(-0,5, -1, -2, -3, -4)$  com  $N = 720$  sítios nos setores de magnetização total  $S^z = 0$  e  $S^z = 1$ . Para o setor  $S^z = 2$ , o perfil de magnetização local é apresentado na Figura 24.

O perfil da magnetização local para  $J_T < 0$  exibe um comportamento oscilatório, porém qualitativamente distinto daquele observado na fase ferrimagnética. Em ambas as figuras (Figura 21 e Figura 24), observa-se a formação proeminente de **estados de borda**, onde os spins nas extremidades da cadeia possuem uma magnetização local significativa que decai rapidamente em direção ao *centro* da cadeia. Este decaimento é mais suave para valores de  $J_T$  próximos de zero (e.g.,  $J_T = -0,5$ ), enquanto para valores mais negativos (e.g.,  $J_T = -3$  e  $J_T = -4$ ), a magnetização local no *bulk* desaparece rapidamente, aproximando-se de zero já por volta do sítio  $i = 90$ . Isso indica um estado fundamental no setor  $S^z = 0$  onde a

Figura 21 – Perfis de magnetização local para  $J_T < 0$ . A subfigura (a) mostra a configuração no setor  $S^z = 0$ , onde os momentos antiparalelos nas bordas **decaem exponencialmente em direção ao bulk**. A subfigura (b) mostra o estado tripla no setor  $S^z = 1$  com magnetização paralela nas extremidades. O decaimento exponencial em direção ao centro da cadeia, sendo mais rápido para  $|J_T|$  maiores, evidencia a natureza localizada dos estados de borda, característica da fase com gap. Gráfico feito para  $N = 720$ .

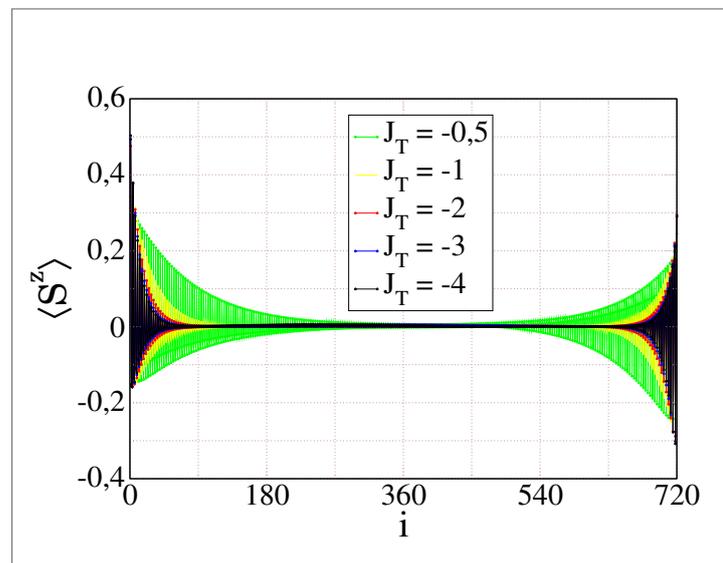
Figura 22 – (a)

Figura 23 – (b)



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 24 – Perfis de magnetização local para  $J_T < 0$  mostrando configuração tipo Haldane no setor  $S^z = 2$ , o primeiro estado excitado. Gráfico feito para  $N = 720$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

magnetização líquida no *bulk* da cadeia é suprimida.

Foi preciso usar um tamanho maior de cadeia para que o efeito no *bulk* pudesse ser observado. Para  $N$  menores, a magnetização líquida no centro da cadeia persiste para um valor diferente de 0.

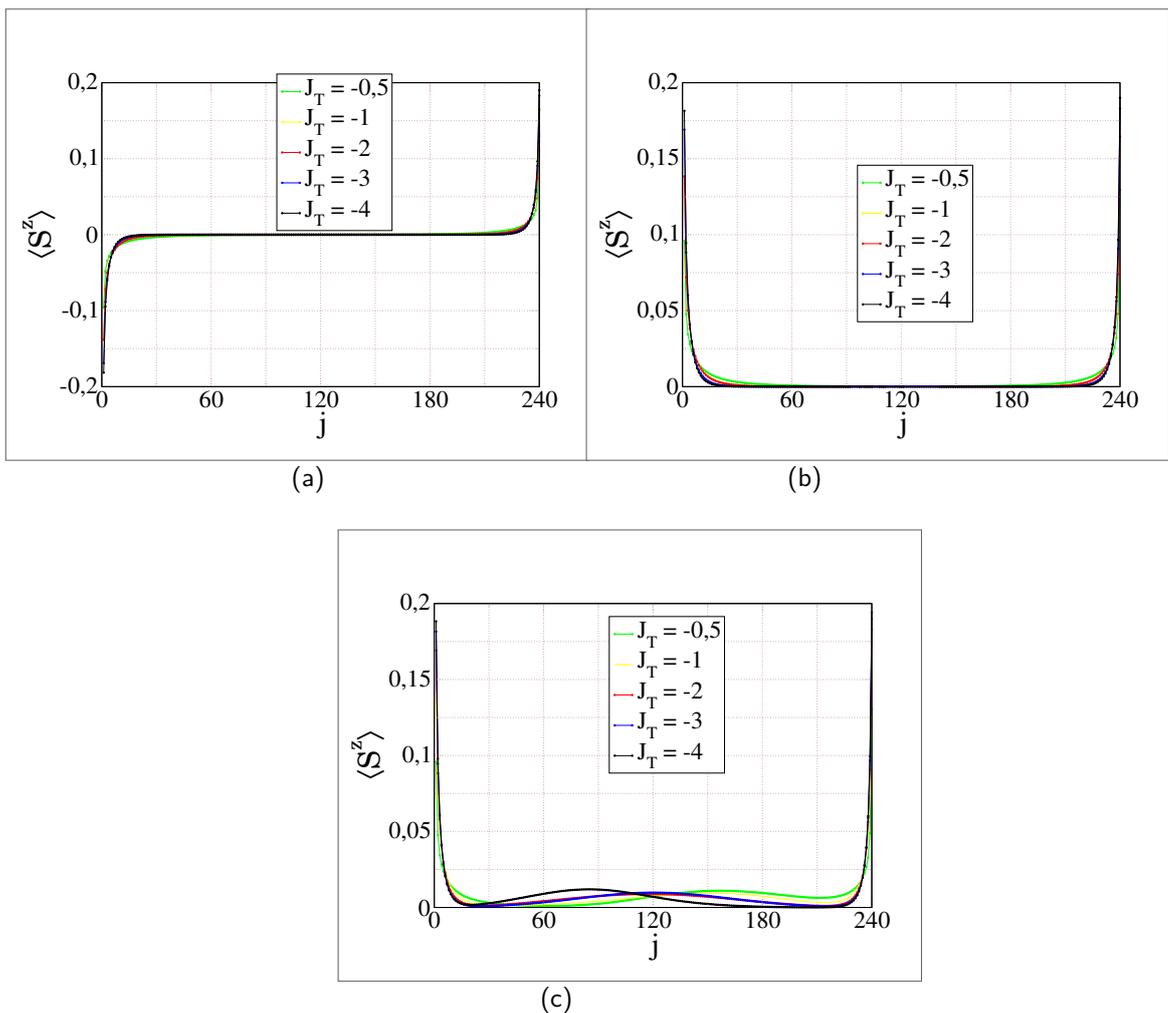
Para análise global destacando os estados de borda, foi calculada a magnetização local

somada por trímero. A Figura 25 apresenta a magnetização local por trímero em função da localização do trímero ( $j$ ) para  $n_T = 240$  trímeros (equivalente a  $N = 720$  sítios) nos setores  $S^z = 0, 1$  e  $2$ , respectivamente.

#### 4.5 LARGURA DOS PLATÔS PARA $J_T < 0$

A largura de um platô de magnetização,  $\Delta h$ , está relacionada ao gap de spin na excitação do sistema, funcionando como uma medida indireta da abertura de energia associada à transição entre estados de magnetização. A dependência de  $\Delta h$  com o tamanho do sistema e com o parâmetro de acoplamento  $J_T$  fornece *insights* sobre a natureza das fases.

Figura 25 – Magnetização local por trímero em função da localização do trímero ( $j$ ) para  $n_T = 240$  trímeros (equivalente a  $N = 720$  sítios). Em cada gráfico foram utilizados cinco acoplamentos  $J_T$ : -0,5; -1; -2; -3 e -4. A representação por trímero amplia a clareza dos estados de borda, mostrando como a magnetização decai rapidamente em direção ao centro da cadeia. Perfil de magnetização em (a), (b) e (c) para  $S^z = 0, 1$  e  $2$  respectivamente.

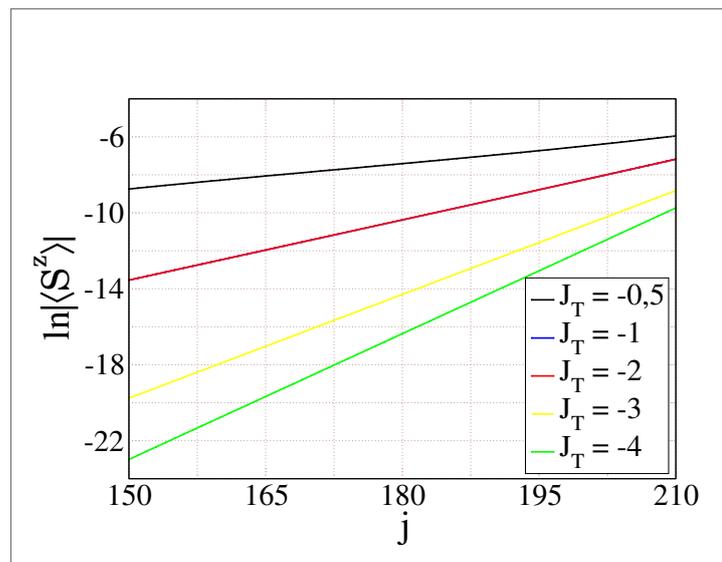


Fonte: Elaborada pelo autor.

Os estados de borda se tornam ainda mais claros na representação por trímero, onde o valor da magnetização por trímero cai rapidamente à medida que se afasta das extremidades da cadeia. No setor  $S^z = 2$ , observa-se uma leve ondulação no perfil da magnetização local por trímero no *bulk*, o que pode ser um indicativo de flutuações de uma convergência que poderia ser aprimorada para esses parâmetros específicos.

Para caracterizar a natureza da ordem (ou desordem) de longo alcance e quantificar o alcance das correlações, o estudo do decaimento da magnetização local em escala logarítmica é revelador. Esta análise é particularmente importante para a fase tipo Haldane ( $J_T < 0$ ), onde se espera um decaimento exponencial das correlações em sistemas com gap. A Figura 26 mostra o logaritmo do módulo da magnetização local,  $\ln |\langle S_j^z \rangle|$ , em função da posição do trímero  $j$  (para uma cadeia de  $n_T = 240$  trímeros, equivalente a 720 sítios) para acoplamentos  $J_T$  negativos e para o valor de  $S^z = 0$ .

Figura 26 – Logaritmo do módulo da magnetização local  $\ln |\langle S_j^z \rangle|$  em função da posição do trímero  $j$  para a cadeia de T-trímeros com  $J_T$  negativo, no setor  $S^z = 0$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Com base nessas retas, os comprimentos de correlação ( $\xi$ ) foram calculados como o inverso do módulo do coeficiente linear obtido a partir do ajuste linear das regiões mais “centrais” das retas crescentes (na segunda metade do gráfico, entre os trímeros  $j = 150$  e  $j = 210$ ). Este procedimento é apropriado para estimar  $\xi$  em sistemas com gap. Os valores calculados para os comprimentos de correlação, em unidades de trímeros, são apresentados na Tabela 5. À medida que  $|J_T|$  aumenta (tornando-se mais negativo), o comprimento de correlação  $\xi$  diminui e seu valor permanece finito para todos os  $J_T$  negativos estudados.

Tabela 5 – Comprimentos de correlação ( $\xi$ ) da cadeia de T-trímeros para diferentes valores de acoplamento  $J_T$  negativos em cadeias com  $n_T = 240$  trímeros.

| $J_T$ | $\xi$ (Trímeros) |
|-------|------------------|
| -0,5  | 21,979           |
| -1    | 9,4412           |
| -2    | 9,4412           |
| -3    | 5,4914           |
| -4    | 4,5325           |

Fonte: Elaborada pelo autor (2025).

O parâmetro de rede neste caso é o dobro do usado no caso de spin-1 (por White (WHITE, 1992) e referido no capítulo ??), sendo então maior que os casos de spin-1 de Heisenberg puro e o modelo de spin-1 AKLT.

#### 4.6 CURVAS DE MAGNETIZAÇÃO

Foi calculada a magnetização por trímero ( $m_T = \langle S^z \rangle / n_T$  em função do campo magnético externo  $h$  (aplicado na direção  $z$ ) para acoplamentos  $J_T$  positivos e negativos em diferentes tamanhos de cadeia ( $N = 120, 240, 480$  sítios).

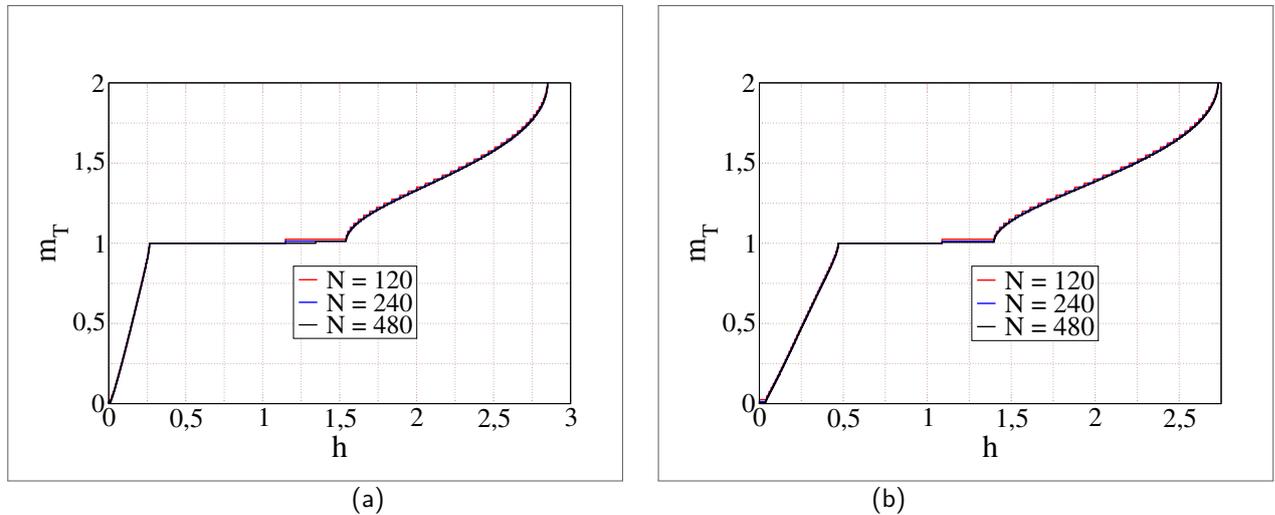
A presença de platôs de magnetização é por extensões do teorema 2.2.2 para sistemas sob campo magnético, que preveem a quantização da magnetização em valores fracionários ou inteiros em certas condições – os quais obedecem à equação 2.15 (OSHIKAWA; YAMANAKA; AFFLECK, 1997; YAMANAKA; OSHIKAWA; AFFLECK, 1997) – sem quebra da simetria de translação.

##### 4.6.1 Perfis de magnetização para $J_T > 0$ (Fase ferrimagnética)

Inicialmente, consideraram-se os valores positivos do acoplamento  $J_T$ . A curva de magnetização reflete os estados fundamentais acessados à medida que o campo externo aumenta, indicando os valores discretos de  $S^z$  alcançados durante a varredura. Para os três valores de cadeia ( $N$ ) e também para os dois valores positivos de acoplamento ( $J_T$ ), a curva foi traçada. A expressão usada para obter os resultados foi a equação ??.

O platô observado em  $m_T = 1$  corresponde a fase ferrimagnética identificada anterior-

Figura 27 – Curvas de magnetização da cadeia T-trímeros em função do campo magnético ( $h$ ) para três tamanhos de cadeia:  $N = 120, 240, 480$ . Acoplamento (a)  $J_T = 0,5$  e (b)  $J_T = 1$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

mente. Sua largura cresce com  $J_T$ . O valor do campo externo necessário para vencer esse platô foi de aproximadamente  $h = 2,063$  no caso de  $J_T = 0,5$  e de  $h = 2,435$  para o acoplamento  $J_T = 1$ . A curva cresce monotonicamente a partir de então, até o seu segundo platô, relativo à saturação do sistema ( $S_z$  máximo).

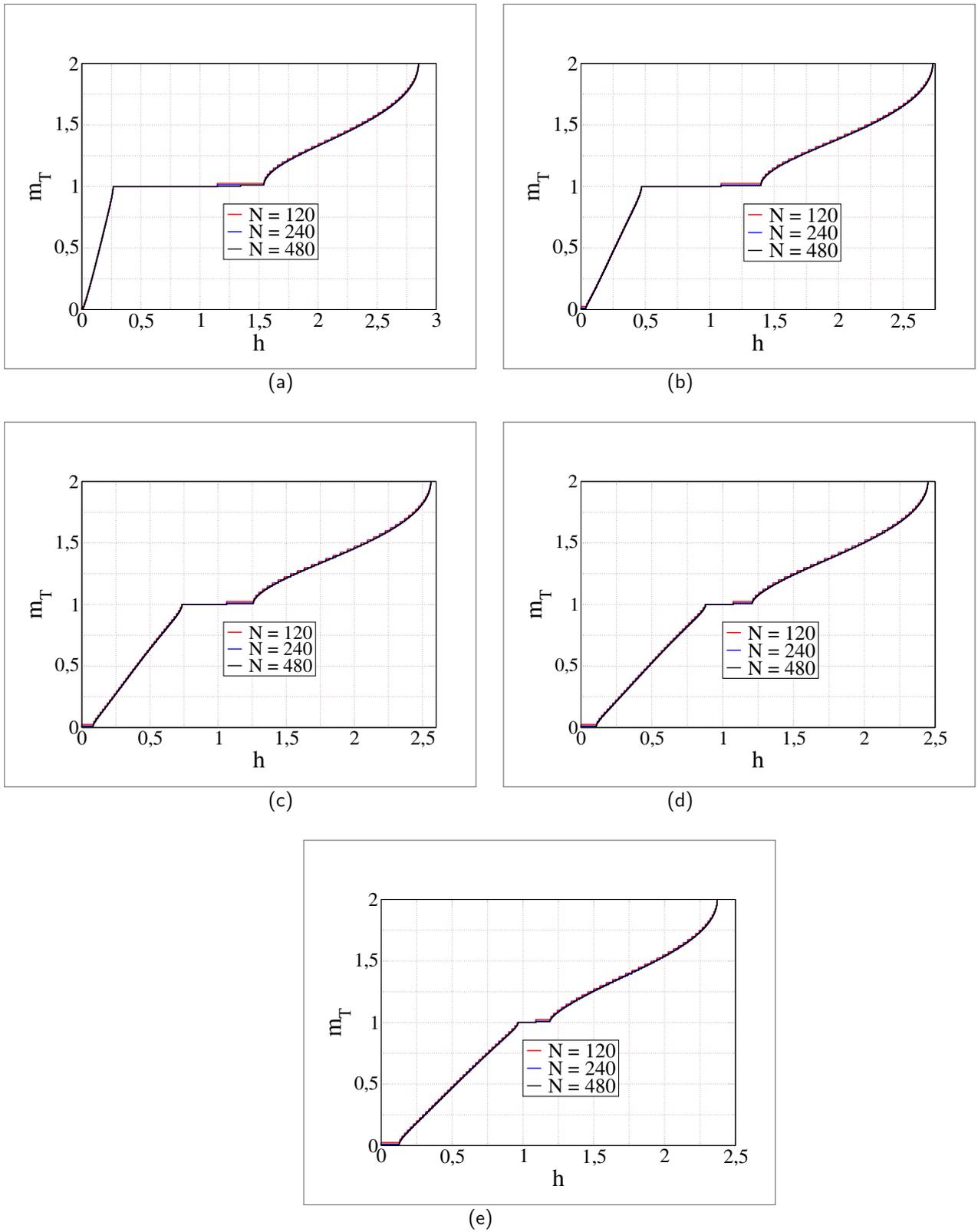
#### 4.6.2 Perfis de Magnetização para $J_T < 0$ (Fase de Haldane)

A Figura 28 apresenta as curvas de magnetização para os valores de  $J_T = -0,5, -1, -2, -3$  e  $-4$ . As curvas revelaram dois platôs não triviais: um inicial em  $m_T = 0$ , associado à presença de um gap entre o estado fundamental e os estados excitados, e outro central em  $m_T = 1$ . Um terceiro platô, em  $m_T = 2$ , surge na saturação magnética. Em todos os casos, as curvas iniciam em  $m_T = 0$  para  $h = 0$  e exibem um crescimento contínuo e monotônico com o aumento do campo.

Entre os platôs em  $m_T = 0$  e  $m_T = 1$ , a magnetização cresce quase linearmente. Após o platô central em  $m_T = 1$ , a curva continua a crescer até a saturação, apresentando uma leve mudança na concavidade. Para o maior tamanho de cadeia simulado ( $N = 480$  sítios), as curvas se tornam mais precisas, isto é, mais contínuas, com menos degraus visíveis, o que indica uma boa convergência dos resultados com o aumento do tamanho do sistema, aproximando-se do limite termodinâmico.

A análise da evolução dos platôs com  $J_T$  é crucial. À medida que o valor do acoplamento

Figura 28 – Curvas de magnetização ( $m$ ) em função do campo magnético externo ( $h$ ) para três tamanhos de cadeia:  $N = 120$ ,  $240$ ,  $480$ . Os acoplamentos utilizados foram de (a)  $J_T = -0,5$ ; (b)  $J_T = -1$ ; (c)  $J_T = -2$ ; (d)  $J_T = -3$ ; e (e)  $J_T = -4$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

$J_T$  se aproxima de zero (de  $-4$  para  $-0,5$ ), as curvas de magnetização se deslocam para a esquerda, significando que um campo magnético menor é necessário para induzir a magnetização. Este comportamento assemelha-se mais às curvas de magnetização para  $J_T$  positivas (fase ferrimagnética), o que é consistente com a degenerescência observada em  $J_T = 0$  na análise de energia – tal qual foi visto no caso alternado no capítulo anterior 16b.

Inversamente, à medida que o acoplamento  $J_T$  se torna mais negativo (de  $-0,5$  para  $-4$ ), o platô inicial em  $m_T = 0$  (o platô tipo Haldane) aumenta de largura e se torna mais evidente, enquanto o platô central em  $m_T = 1$  diminui de largura. Isso sugere que o gap de excitação no setor de  $m_T = 0$  se cresce com o aumento da magnitude do acoplamento intra-trímero.

#### 4.7 LARGURA DOS PLATÔS PARA $J_T < 0$

A largura de um platô de magnetização,  $\Delta h$ , está relacionada ao gap de spin na excitação do sistema, funcionando como uma medida indireta da abertura de energia associada à transição entre estados de magnetização. A dependência de  $\Delta h$  com o tamanho do sistema e com o parâmetro de acoplamento  $J_T$  fornece *insights* sobre a natureza das fases.

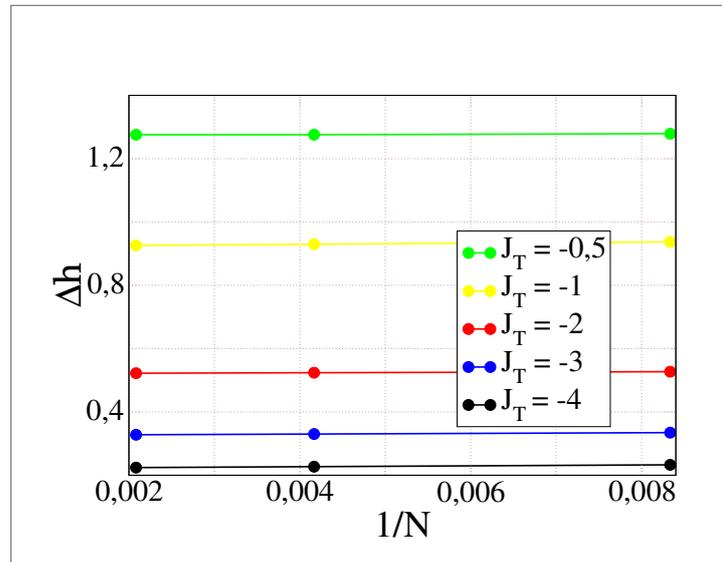
##### 4.7.1 Largura do Platô Central ( $m_T = 1$ )

A Figura 29 mostra a largura do platô central ( $\Delta h$ ) em  $m_T = 1$  em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para acoplamentos  $J_T$  negativos. Conforme observado na Figura 29, as larguras dos platôs para cada valor de  $J_T$  negativo convergem para um valor finito no limite termodinâmico. A extrapolação para  $1/N \rightarrow 0$  foi realizada por meio de um ajuste linear entre os dois maiores valores de  $N$  simulados ( $N = 240$  e  $N = 480$ ), com o valor do coeficiente linear obtido para cada  $J_T$  sendo considerado o valor do limite termodinâmico da largura do platô.

Para entender a relação entre a largura do platô central e o acoplamento intra-trímero, a Figura 38 apresenta a largura do platô no limite termodinâmico em função de  $J_T$  (Figura 39) e  $1/J_T$  (Figura 40) para acoplamentos negativos.

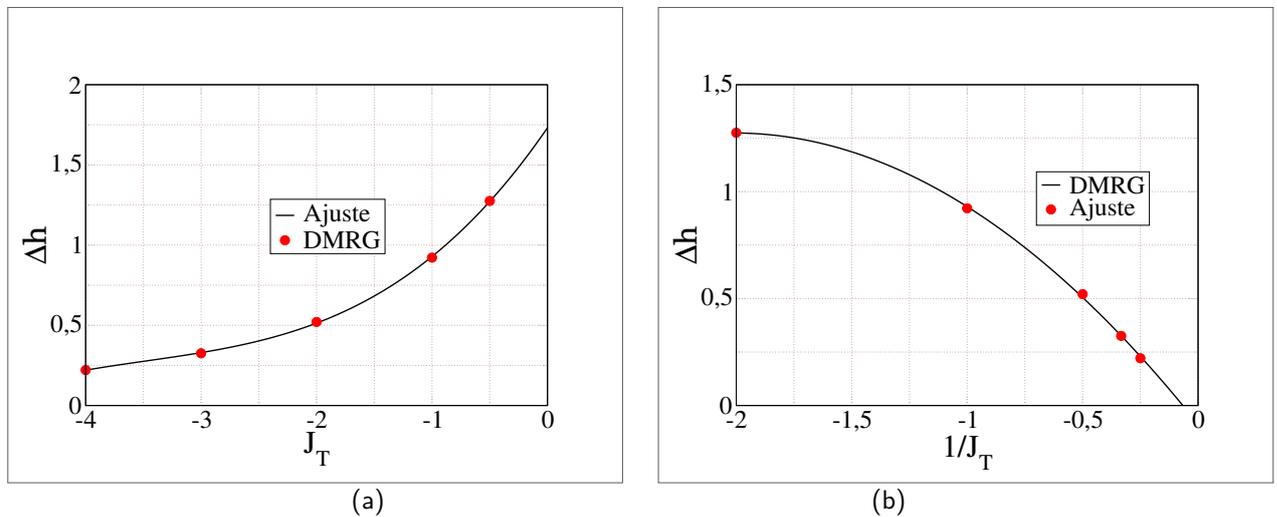
A partir dessas figuras, observa-se que, à medida que  $J_T \rightarrow 0$  (acoplamento fraco), a largura do platô central se aproxima de  $\Delta h \approx 1,75$ . Este valor é consistente com resultados anteriores para cadeias de Heisenberg alternadas de spin-1/2 e spin-1 16c, como discutido no artigo (COUTINHO-FILHO et al., 2008). Esse comportamento também foi observado na cadeia

Figura 29 – Largura dos platôs de magnetização centrais ( $\Delta h$ ) em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de  $J_T$  negativos. As linhas indicam extrapolações para o limite termodinâmico ( $1/N \rightarrow 0$ ).



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 30 – Largura do platô central de magnetização no limite do acoplamento fraco e forte, respectivamente em função de  $J_T$  (a) e  $1/J_T$  (b) para acoplamentos negativos. De vermelho os pontos obtidos via extrapolação no limite termodinâmico. De preto, a curva com ajuste exponencial em (a) e polinomial em (b).



Fonte: Elaborada pelo autor.

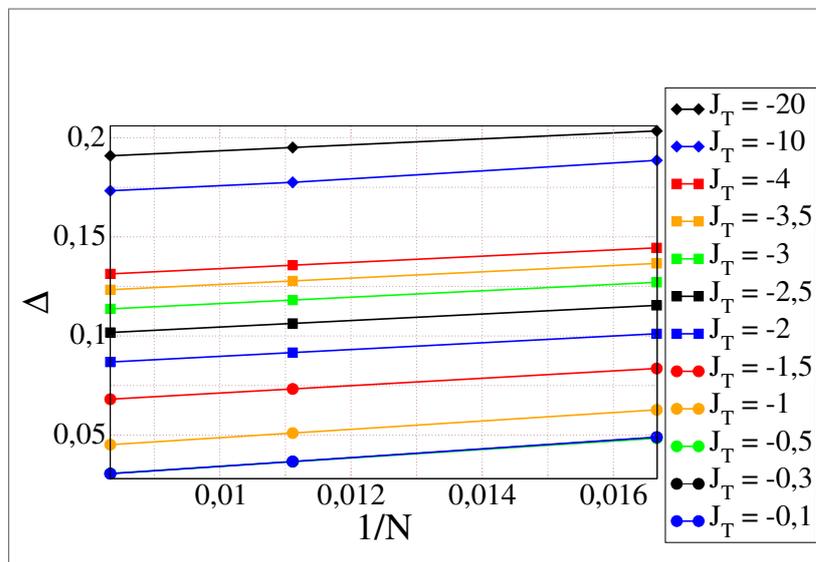
alternada discutida anteriormente (veja Figura 16b). Por outro lado, para acoplamentos  $J_T$  muito negativos (acoplamento forte,  $|J_T| \rightarrow \infty$ ), a largura do platô central tende a zero, conforme indicado pela Figura 40. Isso sugere que, nesse regime, o platô em  $m_T = 1$  pode desaparecer, ou que o gap de spin correspondente se fecha. As curvas exibem um comportamento regular e ajustes exponenciais foram utilizados para inferir os limites.

#### 4.7.2 Largura do Platô em $m_T = 0$

O gap de energia ( $\Delta$ ) na fase tipo Haldane ( $J_T < 0$ ) é um fenômeno quântico fundamental que surge da competição de interações e da natureza mista de spins do modelo. Sua existência significa que o sistema possui um estado fundamental não degenerado e um espectro de excitações com uma energia mínima finita. Essa abertura de energia impede que o sistema seja facilmente excitado, resultando em propriedades de isolante quântico para o bulk. A origem deste gap está na quebra da simetria de rotação do spin por ligações de valência (VBS), que formam singletos localizados e suprimem as correlações de longo alcance, levando ao decaimento exponencial das funções de correlação.

O gap de energia ( $\Delta$ ) da cadeia T-trímeros no setor de magnetização total  $S^z = 0$  foi definido como a diferença entre a energia do primeiro estado excitado e a do estado  $S^z = 1$  – o qual possui a mesma energia do estado fundamental –, isto é,  $\Delta = E_2 - E_1$ . A Figura 31 apresenta a dependência do gap em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para uma ampla gama de valores de  $J_T$  negativos.

Figura 31 – Gap ( $\Delta$ ) da cadeia T-trímeros em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de  $J_T$  negativos. Os pontos representam os dados obtidos por DMRG e as linhas contínuas indicam extrapolações para o limite termodinâmico ( $1/N \rightarrow 0$ ).



Fonte: Elaborada pelo autor.

É importante notar que na Figura 18 os valores de acoplamento  $J_T$  positivos (como 1,0 e 0,5) estão representados à esquerda do valor zero, antes dos acoplamentos negativos. Esta representação visa ilustrar a transição de forma contínua, mas é fundamental atentar para a ordem dos valores no eixo, onde  $J_T = 0,5$  é um valor positivo.

Conforme observado na Figura 18, para cada valor de  $J_T$ , a energia por sítio exibe uma clara dependência com o tamanho finito do sistema. A extrapolação para o limite termodinâmico ( $1/N \rightarrow 0$ ) foi realizada através do ajuste linear entre os dois maiores tamanhos de cadeia simulados ( $N = 240$  e  $N = 480$ ). Observa-se que o gap se mantém finito no limite termodinâmico para todos os  $J_T$  negativos. A inclinação das retas na Figura 31 é relativamente pequena.

A Tabela 7 resume os valores extrapolados do gap explícito no limite termodinâmico, juntamente com as larguras dos platôs de magnetização discutidas na seção anterior.

Tabela 7 – Larguras dos platôs ( $\Delta h$ ) e valores do gap ( $\Delta$ ) para acoplamentos  $J_T$  negativos na cadeia T-trímeros. Os valores igualados a zero referem-se a extrapolações que indicam gaps muito pequenos, dentro do erro numérico.

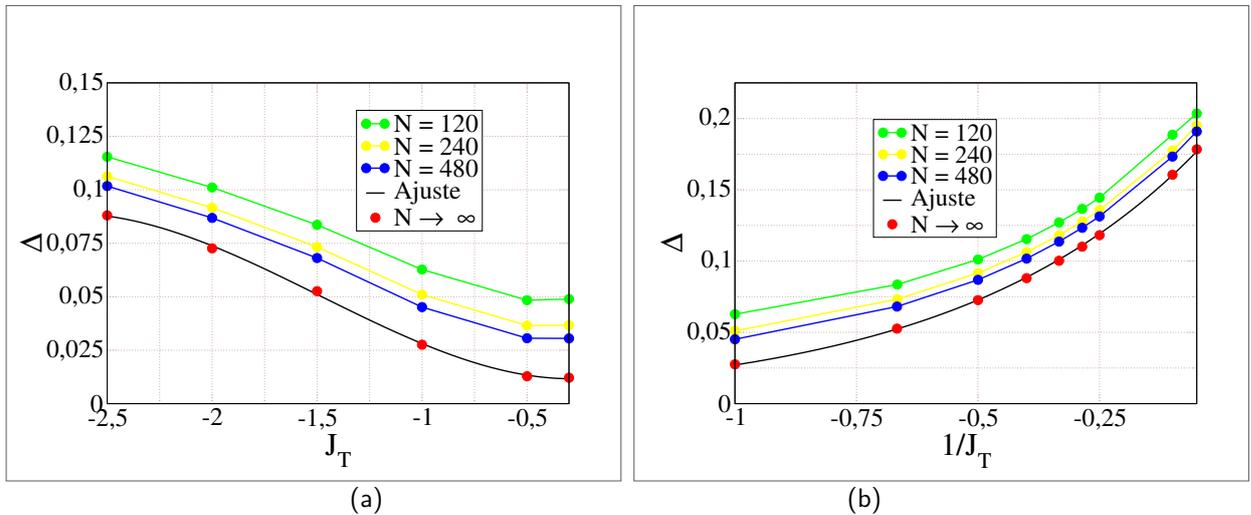
| $J_T$                 | $\Delta h$ (Platô Central) | $\Delta$ (Gap)       |
|-----------------------|----------------------------|----------------------|
| -0,5                  | 1,650 14                   | 0                    |
| -1                    | 1,0                        | 0,05                 |
| -2                    | 0,5                        | 0,1                  |
| -3                    | 0,25                       | 0,15                 |
| -4                    | 0,1                        | 0,19                 |
| $\rightarrow -\infty$ | $\rightarrow 0$            | $\approx 0,195\ 194$ |

**Fonte:** Elaborada pelo autor (2025).

Para o acoplamento fraco ( $J_T \rightarrow 0$ ), o valor do gap explícito no limite termodinâmico aproxima-se muito de zero, sendo menor que 0,025. Isso sugere que, à medida que a interação inter-trímero se enfraquece, o sistema se aproxima do estado degenerado com acoplamento positivo. Por outro lado, para o limite de acoplamento forte ( $J_T \rightarrow -\infty$ ), o valor do gap converge para  $\Delta \approx 0,195\ 194$ . Esta dependência é ilustrada na Figura 35, que mostra o gap em função de  $J_T$  (Figura 35a) e  $1/J_T$  (Figura 35b), respectivamente.

As curvas na Figura 35 parecem ser bem comportadas próximo aos limites. Ajustes exponenciais foram empregados para determinar os valores do gap nos limites de acoplamento forte, utilizando os valores mais próximos desses limites. O valor extrapolado  $\Delta \approx 0,195$  no regime de acoplamento inter-trímero forte é aproximadamente metade do gap de Haldane típico de uma cadeia de spin-1 uniforme ( $\Delta_H \approx 0,41J$ ) (RENARD; REGNAULT; VERDAGUER, 2001). Isso reforça a interpretação de que, mesmo nesse regime, a cadeia T-trímeros não se comporta como uma cadeia de spin-1 simples.

Figura 32 – Gap de energia ( $\Delta$ ) no limite do acoplamento fraco e forte, respectivamente em função de  $J_T$  (a) e  $1/J_T$  (b) para acoplamentos negativos. O ajuste feito foi do tipo polinomial nos dois gráficos.



Fonte: Elaborada pelo autor.

#### 4.8 ANÁLISE DO GAP EM CADEIAS MODIFICADAS

A discrepância observada entre o gap da cadeia de T-trímeros e o valor canônico do gap de Haldane de uma cadeia de spin-1 pura motivou a exploração de topologias de cadeia modificadas. O objetivo foi investigar a origem estrutural dessa discrepância e verificar se, com alterações específicas, o sistema poderia ser sintonizado para se aproximar do gap de Haldane. Duas topologias foram exploradas: a cadeia *T-simetrizada* (tipo diamante) e a cadeia *T-deslocada* com spin pendurado na cadeia principal no spin-1.

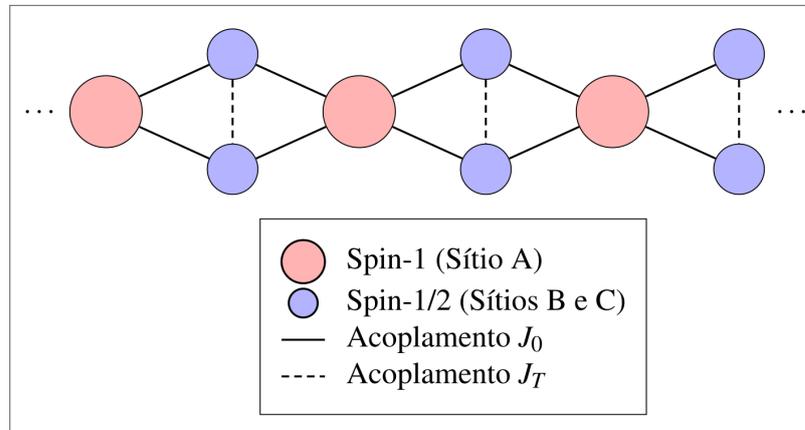
##### 4.8.1 Cadeia de Trímeros Simetrizada (T-simetrizadas)

Esta modificação introduziu ligações adicionais para simetrizar a estrutura original do T-trímero, resultando em uma topologia intermediária, análoga à de uma cadeia diamante (KIKUCHI et al., 2005; LISNYI, ; RULE et al., 2008). A Figura 33 ilustra essa nova geometria.

A Figura 34 apresenta o comportamento do gap de energia em função de  $1/N$  para a cadeia similar a diamante, para vários valores de  $J_T$ . O ajuste foi realizado da mesma forma descrita anteriormente, ajustando uma reta entre os dois maiores tamanhos de cadeia ( $N = 90$  e  $N = 120$ ).

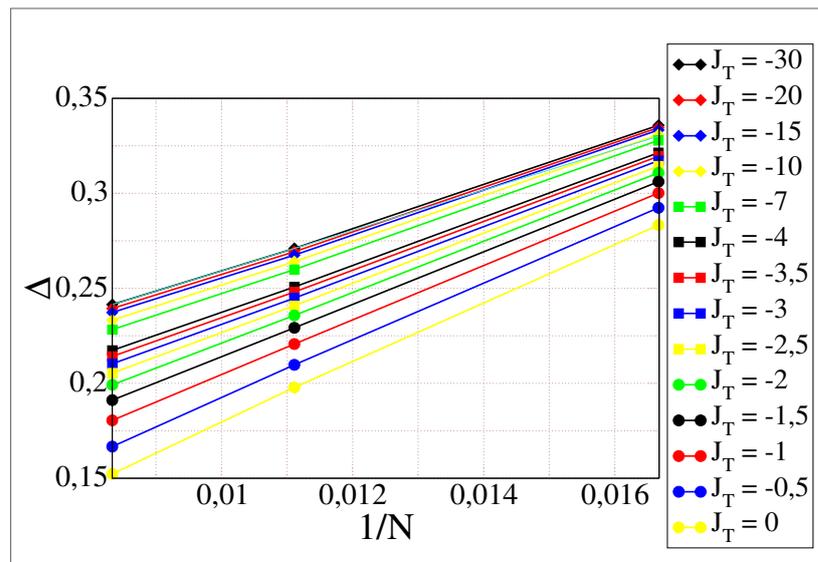
Para o acoplamento fraco ( $J_T \rightarrow 0$ ), a curva de  $\Delta$  vs.  $J_T$  (Figura ??) possui concavidade voltada para baixo e decai rapidamente para valores próximos de 0. Para acoplamento forte, a

Figura 33 – Estrutura simétrica da cadeia T-simetrizada. Cada spin-1 (A) conecta-se a dois spins-1/2 (B acima e C abaixo) formando um “T”. Os spins B conectam-se entre células via  $J_0$ , enquanto cada par B-C conecta-se via  $J_T$ . Os spins B e C também conectam-se ao spin A adjacente com  $J_0$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

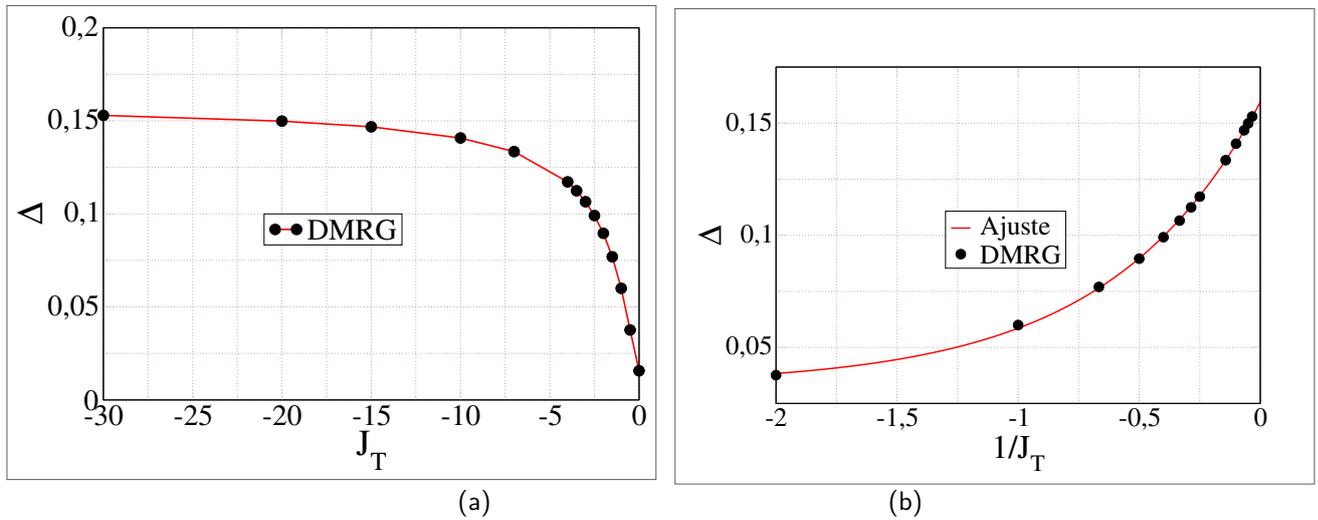
Figura 34 – Gap de energia ( $\Delta$ ) para a cadeia T-simetrizada em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de  $J_T$ . O gráfico foi construído para três valores de  $N = 60, 90$  e  $120$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

curva em 34 (gap vs.  $1/J_T$ ) parece ser algo próximo de uma exponencial. De forma surpreendente, o valor do gap extrapolado ( $\Delta \approx 0,159$ ) para a cadeia T-simetrizada mostrou-se ainda mais distante do esperado para o gap de Haldane, sendo inclusive inferior ao valor obtido para a cadeia de T-trímeros original.

Figura 35 – Gap de energia ( $\Delta$ ) no limite do acoplamento fraco e forte, respectivamente em função de  $J_T$  (a) e  $1/J_T$  (b) para acoplamentos negativos. O ajuste feito foi do tipo polinomial nos dois gráficos.

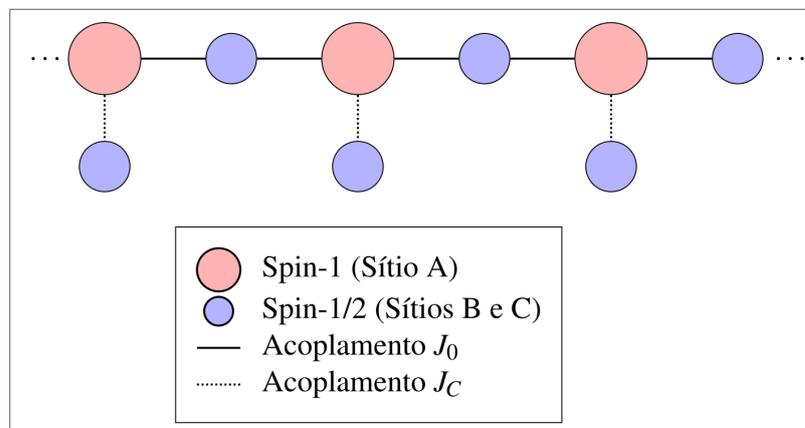


Fonte: Elaborada pelo autor.

#### 4.8.2 Cadeia T-deslocada (Spin Pendurado no Spin-1)

Nesta modificação, a posição do spin-1/2 pendurado foi alterada para se acoplar ao spin-1 da cadeia principal, em vez do spin-1/2 terminal. Essa mudança foi motivada pela hipótese de que a simetria do spin total por subrede poderia influenciar o gap. A Figura 36 ilustra essa nova topologia.

Figura 36 – Representação modificada da cadeia T-Trímeros. Agora cada spin-1/2 pendurado (sítio C) está acoplado diretamente ao spin-1 (sítio A) mediante  $J_C$  (linha pontilhada), enquanto os spins-1/2 do ramo principal (sítio B) continuam conectados via  $J_0$  (linha sólida). Representação da cadeia T-deslocada, com acoplamento do spin pendurado ao spin-1 da cadeia principal.

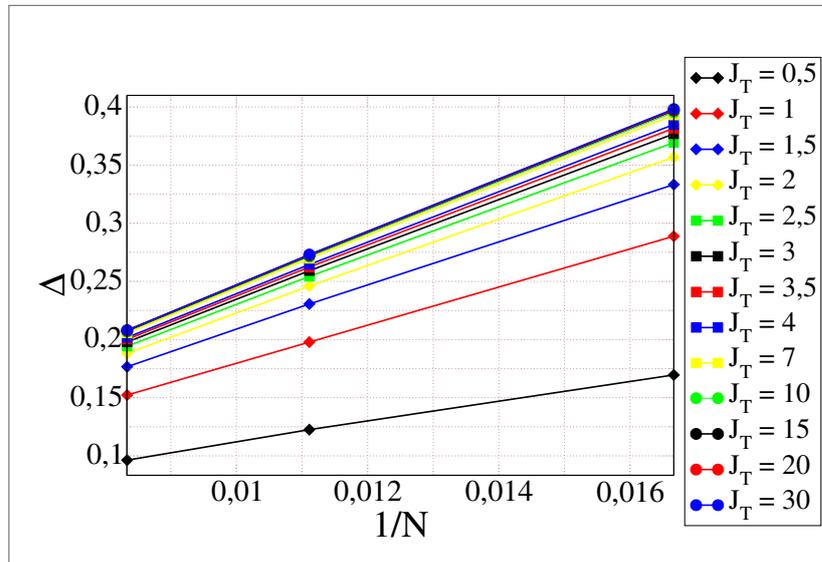


Fonte: Elaborada pelo autor.

A Figura 37 apresenta o comportamento do gap de energia em função de  $1/N$ .

Para o acoplamento fraco ( $J_T \rightarrow 0$ ), a curva de  $\Delta$  vs.  $J_T$  (Figura 34) possui concavidade

Figura 37 – Gap de energia ( $\Delta$ ) para a cadeia T-deslocada (spin-1/2 pendurado no spin-1) em função do inverso do número de sítios ( $1/N$ ) para diferentes valores de  $J_T$ . O gráfico foi construído para três valores de  $N = 60, 90$  e  $120$ .



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 38 – Largura do platô central de magnetização no limite do acoplamento fraco e forte, respectivamente em função de  $J_T$  (a) e  $1/J_T$  (b) para acoplamentos negativos. De vermelho os pontos obtidos via extrapolação no limite termodinâmico. De preto, a curva com ajuste exponencial em (a) e polinomial em (b).

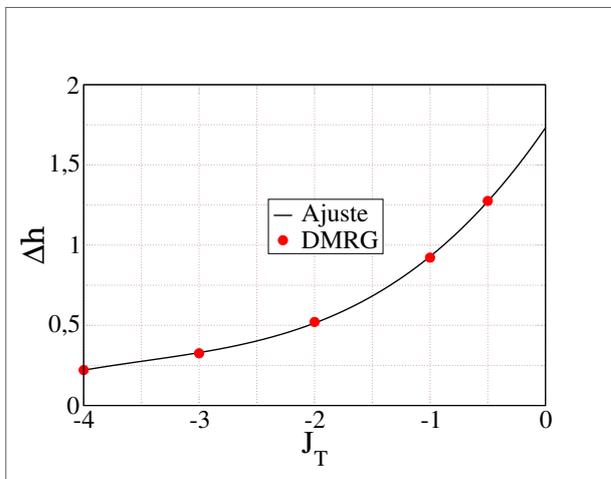


Figura 39

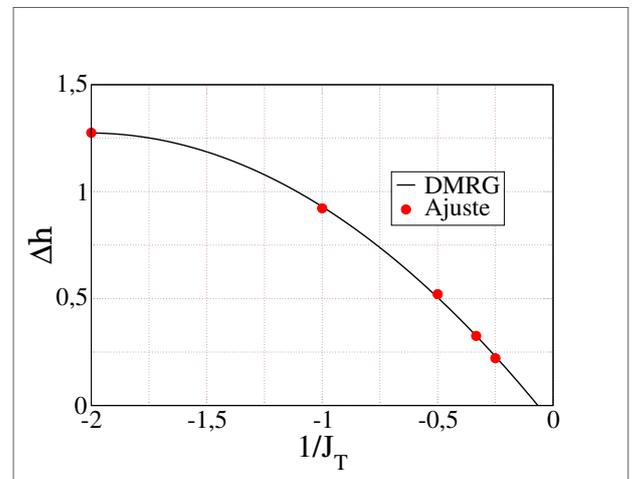


Figura 40

Fonte: Elaborada pelo autor.

invertida em relação ao caso diamante, embora também decaia rapidamente para valores próximos de 0. Curiosamente, o valor do gap nesta cadeia modificada ( $\Delta \approx 0,013$ ) é ainda menor do que nos casos anteriores, indicando um afastamento do comportamento típico de uma cadeia de Haldane.

A análise dessas cadeias modificadas demonstra a complexidade de sintonizar sistemas

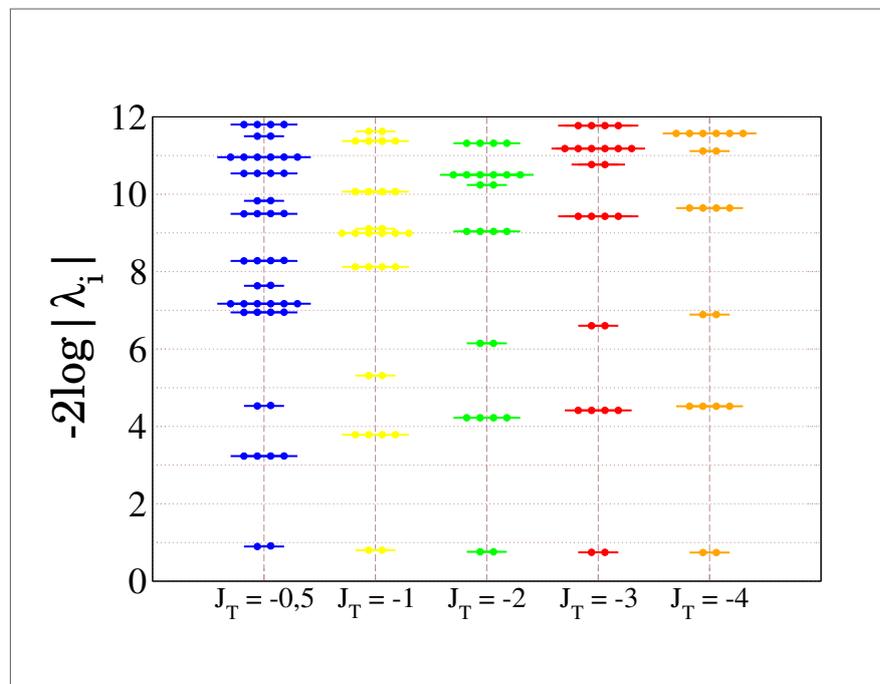
de spin mistos para reproduzir características específicas como o gap de Haldane. Embora a motivação fosse explorar a influência da simetria e das ligações, essas alterações estruturais evidenciam como a topologia da cadeia impacta significativamente a abertura do gap. Ainda que mantenham uma fase com gap, a magnitude observada se distancia da esperada para uma cadeia de Haldane pura, sugerindo que novas estratégias são necessárias para aproximar tais sistemas do regime topológico desejado. O Acredita-se que a principal dificuldade é de estabelecer quais ligações ocorrem entre os spins-1/2 reais e o spin-1, que pode ser visto como dois spins-1/2 virtuais, tal qual o VBS do modelo AKLT (AFFLECK et al., 1987). Com a possibilidade de maior número de ligações, acredita-se que maior flutuação quântica foi provocada, refletindo em gaps cada vez menores.

#### 4.9 ANÁLISE DO EMARANHAMENTO

O espectro de emaranhamento é uma medida fundamental do emaranhamento quântico em sistemas de muitos corpos, oferecendo *insights* complementares às análises de energia e magnetização. Para caracterizar a natureza topológica da fase antiferromagnética ( $J_T < 0$ ), investigamos o espectro da matriz densidade reduzida. Este espectro, obtido através da decomposição de Schmidt de um corte bipartido no centro da cadeia, revela a estrutura de entrelaçamento quântico entre as duas metades do sistema.

Um aspecto notável emerge desta análise: a degenerescência par presente em todos os níveis do espectro, característica de fases de Haldane, obedecendo à mesma multiplicidade e sequência do conjunto de autovalores. Embora haja decréscimo no valor do primeiro par mostrado no gráfico com o aumento da magnitude do acoplamento, o contrário ocorre para os próximos conjuntos, que possuem espectro com valor cada vez maior, com a diminuição de  $J_T$ .

Figura 41 – Espectro de Schmidt ( $-2\ln \lambda_i$ ) em função de  $J_T$ . **Degenerescência par** em todos os níveis. Valores obtidos para  $N = 720$  sítios.



Fonte: Elaborada pelo autor.

## 5 CONCLUSÕES

Nesta dissertação, as propriedades quânticas de uma cadeia de T-trímeros – um modelo unidimensional composto por spins de diferentes magnitudes organizados em unidades básicas formadas por um spin-1 e dois spins-1/2 – foram investigadas. Utilizando o método DMRG, apoiado na representação eficiente por MPS, caracterizou-se detalhadamente o comportamento do sistema em função da variação do acoplamento  $J_T$ , mantendo o parâmetro  $J_0 = 1$  fixo.

As simulações numéricas revelaram a existência de duas fases quânticas distintas. Para valores positivos de  $J_T$ , o sistema apresentou uma fase ferrimagnética, com momento magnético líquido por trímero e magnetização espontânea. Em contrapartida, para  $J_T < 0$ , a cadeia entra em uma fase com gap, caracterizada por estados de borda localizados nas extremidades da cadeia, decaimento exponencial da magnetização local no interior e degenerescência entre setores de spin distintos, sinais claros de uma ordem topológica subjacente, do tipo Haldane.

A análise das curvas de magnetização e, em particular, dos platôs em  $m_T = 0$  e  $m_T = 1$ , forneceu indicações claras das lacunas de excitação presentes no sistema. O platô central em  $m_T = 1$ , observado para  $J_T < 0$ , apresentou largura compatível com resultados conhecidos para cadeias de Heisenberg alternadas, enquanto o platô em  $m_T = 0$  manteve-se finito mesmo no regime de acoplamento forte, indicando a robustez do gap nessa fase. O cálculo direto do gap de energia confirmou essa natureza com gap da fase como a cadeia de spin-1 pura, embora o valor obtido — da ordem de 0,195 — seja consideravelmente menor (aproximadamente a metade) que o valor canônico da cadeia de Haldane, que é aproximadamente  $0,41J$ .

Essa diferença foi analisada à luz da estrutura do modelo. É relevante notar que, para um sistema com a complexidade e a natureza mista de spins do modelo T-trímeros, talvez não fosse a priori esperado que o valor canônico do gap de Haldane fosse atingido. O valor de  $\Delta \approx 0,195$  que encontramos, embora menor, demonstra a existência e a robustez do gap em uma nova classe de sistemas. A cadeia T-trímeros, embora compartilhe certas similaridades com modelos de spin-1 puros, apresenta uma competição entre os graus de liberdade reais dos spins-1/2 terminais e a tendência de formação de singletos no interior dos trímeros. Tal competição frustra a realização de um estado do tipo VBS, impedindo a formação de certas descrições topológicas. O resultado é um gap renormalizado para baixo, sensível à geometria e à composição da célula unitária.

---

Discussão que também justifica os resultados obtidos para os modelos com topologias alternativas – como a cadeia T-simetrizada, com ligações  $J_0$  simetrizadas, e como a cadeia T-deslocada, uma versão com o spin-1/2 pendurado no spin-1. Visando aproximar o sistema do comportamento típico da cadeia de Haldane. Entretanto, essas modificações, ao invés de restaurarem o valor canônico do gap, resultaram em valores ainda menores, evidenciando que a complexidade do sistema não pode ser reduzida a uma simples analogia estrutural. A topologia do T-trímero, com sua assimetria e competição interna, parece preservar a existência de um gap, mas o empurra para valores significativamente inferiores aos de sistemas idealizados.

A análise do espectro de emaranhamento complementou esses achados. Para  $J_T < 0$ , o perfil da entropia ao longo da cadeia seguiu a lei da área, saturando no interior e decaindo nas bordas, em plena consonância com o caráter de gap da fase. O espectro mostrou decaimento exponencial e multiplicidade par.

Em conjunto, os resultados obtidos ao longo deste trabalho posicionam a cadeia T-trímeros como um sistema modelo rico para o estudo de fases magnéticas quânticas, emaranhamento e degenerescência de fase em sistemas de spins mistos. A coexistência de ordenamento magnético, estados de borda topológicos e comportamento com gap evidencia a complexidade desse modelo, que reúne aspectos típicos tanto de sistemas ordenados quanto de fases protegidas por simetria.

Este estudo abre caminho para investigações futuras que explorem a possibilidade de atingir o resultado canônico de fases de Haldane, bem como o estudo das flutuações em cadeias com interação entre spins reais e virtuais.

## REFERÊNCIAS

- AFFLECK, I.; KENNEDY, T.; LIEB, E. H.; TASAKI, H. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 59, p. 799–802, Aug 1987. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.799>>.
- AIZENMAN, M.; DUMINIL-COPIN, H.; WARZEL, S. Dimerization and néel order in different quantum spin chains through a shared loop representation. *Annales Henri Poincaré*, Springer Science and Business Media LLC, v. 21, n. 8, p. 2737–2774, jun. 2020. ISSN 1424-0661. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s00023-020-00924-2>>.
- ALMEIDA, D. S.; BIBIANO-FILHO, A. S.; SILVA, W. M. da; MONTENEGRO-FILHO, R. R. Mixed-spin heisenberg ladders in a magnetic field. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 111, p. 014149, jan 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.111.014149>>.
- BELIK, A. A.; MATSUO, A.; AZUMA, M.; KINDO, K.; TAKANO, M. Long-range magnetic ordering of  $s=1/2$  linear trimers in  $a3cu3(po4)4$  ( $a=ca, sr, \text{ and } pb$ ). *Journal of Solid State Chemistry*, Elsevier, v. 178, p. 709–713, 2005.
- BETHE, H. Zur Theorie der Metalle. *Zeitschrift für Physik*, v. 71, n. 3, p. 205–226, 03 1931. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01341708>>.
- CALABRESE, P.; CARDY, J. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, IOP Publishing, v. 2004, n. 06, p. P06002, jun. 2004. ISSN 1742-5468. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2004/06/P06002>>.
- CARR, L. D. (Ed.). *Understanding Quantum Phase Transitions*. Boca Raton: CRC Press, 2010. ISBN 9781439807743. Disponível em: <<https://www.routledge.com/Understanding-Quantum-Phase-Transitions/Carr/p/book/9781439807743>>.
- CIRINO, M. J.; ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de; TORRICO, J.; LYRA, M. L.; PEREIRA, M. S. S. Residual entropy and magnetocaloric effect in a diluted sawtooth spin model of hole-doped cuo chains. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 107, p. 014141, jan 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.107.014141>>.
- CIRINO, M. J.; ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de; TORRICO, J.; LYRA, M. L.; PEREIRA, M. S. S. Residual entropy and magnetocaloric effect in a diluted sawtooth spin model of hole-doped cuo chains. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 107, p. 014141, Jan 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.107.014141>>.
- COUTINHO-FILHO, M. D.; MONTENEGRO-FILHO, R. R.; RAPOSO, E. P.; VITORIANO, C.; OLIVEIRA, M. H. Magnetism and electronic correlations in quasi-one-dimensional compounds. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, FapUNIFESP (SciELO), v. 19, n. 2, p. 232–244, 2008. ISSN 0103-5053. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1590/S0103-50532008000200006>>.
- CRAMER, M.; EISERT, J.; PLENIO, M. B.; DREIBIG, J. Entanglement-area law for general bosonic harmonic lattice systems. *Physical Review A*, American Physical Society (APS), v. 73, n. 1, jan. 2006. ISSN 1094-1622. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.73.012309>>.

- FISHMAN, M.; WHITE, S. R.; STOUDEMIRE, E. M. The ITensor Software Library for Tensor Network Calculations. *SciPost Phys. Codebases*, SciPost, p. 4, 2022. Disponível em: <<https://scipost.org/10.21468/SciPostPhysCodeb.4>>.
- FONSECA, R.; VERÍSSIMO, L. M.; PEREIRA, M. S. S.; LYRA, M. L. Stationary scattering of one-dimensional magnons by an anisotropic and antisymmetric bond defect. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 111, p. 054401, feb 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.111.054401>>.
- GIAMARCHI, T.; RÜEGG, C.; TCHERNYSHYOV, O. Bose–Einstein condensation in magnetic insulators. *Nature Physics*, v. 4, n. 3, p. 198–204, 3 2008. ISSN 1745-2473.
- GU, Z.-C.; WEN, X.-G. Tensor-entanglement-filtering renormalization approach and symmetry-protected topological order. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 80, n. 15, out. 2009. ISSN 1550-235X. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.80.155131>>.
- HAGIWARA, M.; KATSUMATA, K.; AFFLECK, I.; HALPERIN, B. I.; RENARD, J. P. Observation of  $s=1/2$  degrees of freedom in an  $s=1$  linear-chain heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 65, p. 3181–3184, Dec 1990. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.65.3181>>.
- HAGIWARA, M.; MINAMI, K.; NARUMI, Y.; TATANI, K.; KINDO, K. Magnetic properties of a quantum ferrimagnet:  $\text{NiCu}(\text{pba})_2(\text{d}2\text{o})_3 \cdot 2\text{d}2\text{o}$ . *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 67, n. 7, p. 2209–2211, 1998. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/JPSJ.67.2209>>.
- HAGIWARA, M.; NARUMI, Y.; MINAMI, K.; TATANI, K.; KINDO, K. Magnetization process of the  $s=1/2$  and 1 ferrimagnetic chain and dimer. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 68, n. 7, p. 2214–2217, 1999. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/JPSJ.68.2214>>.
- HALDANE, F. Continuum dynamics of the 1-d heisenberg antiferromagnet: Identification with the  $\mathfrak{o}(3)$  nonlinear sigma model. *Physics Letters A*, v. 93, n. 9, p. 464–468, 1983. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037596018390631X>>.
- HALDANE, F. D. M. Nonlinear field theory of large-spin heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis néel state. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 50, p. 1153–1156, Apr 1983. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.50.1153>>.
- HALDANE, F. D. M. Nobel lecture: Topological quantum matter. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 89, p. 040502, Oct 2017. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.89.040502>>.
- HALLER, A. *Matrix Product States, A Variational Approach to Strongly Correlated Systems*. Bachelor's Thesis, Am Rodelberg 55, 55131 Mainz, 2014. Time frame: January 27 - April 7, 2014.
- HASE, M.; KOHNO, M.; KITAZAWA, H.; TSUJII, N.; SUZUKI, O.; OZAWA, K.; KIDO, G.; IMAI, M.; HU, X.  $1/3$  magnetization plateau observed in the spin- $1/2$  trimer chain compound  $\text{Cu}_3(\text{p}_2\text{o}_6\text{oh})_2$ . *Physical Review B*, APS, v. 73, n. 10, p. 104419, 2020.

HEITLER, W.; LONDON, F. Wechselwirkung neutraler atome und homöopolare bindung nach der quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, v. 44, n. 6, p. 455–472, 1927. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01397394>>.

HORSCH, P.; LINDEN, W. von der. Spin-correlations and low lying excited states of the spin-1/2 heisenberg antiferromagnet on a square lattice. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v. 72, n. 2, p. 181–193, 06 1988. ISSN 1431-584X. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/BF01312134>>.

KENNEDY, T. Exact diagonalisations of open spin-1 chains. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 2, n. 26, p. 5737, jul 1990. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/2/26/010>>.

KIKUCHI, H.; FUJII, Y.; CHIBA, M.; MITSUDO, S.; IDEHARA, T.; TONEGAWA, T.; OKAMOTO, K.; SAKAI, T.; KUWAI, T.; KINDO, K.; MATSUO, A.; HIGEMOTO, W.; NISHIYAMA, K.; HORVATIĆ, M.; BERTHEIR, C. Magnetic properties of the diamond chain compound  $\text{Cu}_3(\text{Co}_3)_2(\text{OH})_2$ . *Progress of Theoretical Physics Supplement*, v. 159, p. 1–10, 05 2005. ISSN 0375-9687. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/PTPS.159.1>>.

KONG, L. B.; LIU, L.; YANG, Z.; LI, S.; ZHANG, T.; WANG, C. Theory of ferrimagnetism and ferrimagnetic metal oxides. In: *Magnetic, Ferroelectric, and Multiferroic Metal Oxides*. Elsevier, 2018. p. 287–311. ISBN 978-0-12-811180-2. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128111802000153>>.

LEGEZA, O.; SÓLYOM, J. Quantum data compression, quantum information generation, and the density-matrix renormalization-group method. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 70, p. 205118, Nov 2004. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.70.205118>>.

LIEB, E.; MATTIS, D. Ordering energy levels of interacting spin systems. *Journal of Mathematical Physics*, v. 3, n. 4, p. 749–751, 07 1962. ISSN 0022-2488. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1724276>>.

LIEB, E.; MATTIS, D. Ordering energy levels of interacting spin systems. *Journal of Mathematical Physics*, v. 3, n. 4, p. 749–751, 07 1962. ISSN 0022-2488. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.1724276>>.

LISNYI, B. M. Spin-1/2 ising-heisenberg distorted diamond chain with antiferromagnetic ising and ferromagnetic heisenberg interactions. *Condensed Matter Physics*, v. 27, n. 2, p. 23703.

MATSUDA, M.; KAKURAI, K.; BELIK, A. A.; AZUMA, M.; TAKANO, M.; FUJITA, M. Magnetic excitations from the linear heisenberg antiferromagnetic spin trimer system  $\text{A}_3\text{Cu}_3(\text{PO}_4)_4$  (A=Ca, Sr, and Pb). *Physical Review B*, APS, v. 71, n. 14, p. 144411, 2005.

MERMIN, N. D.; WAGNER, H. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 17, p. 1133–1136, Nov 1966. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.17.1133>>.

MISHRA, S.; CATARINA, G.; WU, F.; ORTIZ, R.; JACOB, D.; EIMRE, K.; MA, J.; PIGNEDOLI, C. A.; FENG, X.; RUFFIEUX, P.; FERNÁNDEZ-ROSSIER, J.; FASEL, R.

Observation of fractional edge excitations in nanographene spin chains. *Nature*, v. 598, n. 7880, p. 287–292, October 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03842-3>>.

MIYASHITA, S.; YAMAMOTO, S. Effects of edges in  $s=1$  heisenberg antiferromagnetic chains. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 48, p. 913–919, Jul 1993. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.913>>.

MÖGERLE, J.; BRECHTELSBAUER, K.; GEA-CABALLERO, A.; PRIOR, J.; EMPERAUGER, G.; BORNET, G.; CHEN, C.; LAHAYE, T.; BROWAEYS, A.; BÜCHLER, H. Spin-1 haldane phase in a chain of rydberg atoms. *PRX Quantum*, American Physical Society, v. 6, p. 020332, May 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PRXQuantum.6.020332>>.

MONTENEGRO-FILHO, R. R.; COUTINHO-FILHO, M. D. Frustration-induced quantum phase transitions in a quasi-one-dimensional ferrimagnet: Hard-core boson map and the tonks-girardeau limit. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 78, n. 1, p. 014418, jul 2008. ISSN 1098-0121. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.014418>>.

MONTENEGRO-FILHO, R. R.; COUTINHO-FILHO, M. D. Frustration-induced quantum phase transitions in a quasi-one-dimensional ferrimagnet: Hard-core boson map and the tonks-girardeau limit. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 78, p. 014418, jul 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.014418>>.

MONTENEGRO-FILHO, R. R.; MATIAS, F. S.; COUTINHO-FILHO, M. D. Topology of many-body edge and extended quantum states in an open spin chain:  $1/3$  plateau, kosterlitz-thouless transition, and luttinger liquid. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 102, p. 035137, jul 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.035137>>.

MONTENEGRO-FILHO, R. R.; SILVA-JÚNIOR, E. J. P.; COUTINHO-FILHO, M. D. Ground-state phase diagram and thermodynamics of coupled trimer chains. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 105, p. 134423, apr 2022. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.105.134423>>.

NASCIMENTO-JUNIOR, A. M. do; MONTENEGRO-FILHO, R. R. Magnetic phase separation in a frustrated ferrimagnetic chain under a magnetic field. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 99, p. 064404, feb 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.064404>>.

OSHIKAWA, M.; YAMANAKA, M.; AFFLECK, I. Magnetization plateaus in spin chains: “haldane gap” for half-integer spins. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 78, n. 10, p. 1984–1987, mar. 1997. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.1984>>.

ÖSTLUND, S.; ROMMER, S. Thermodynamic limit of density matrix renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 75, p. 3537–3540, Nov 1995. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.3537>>.

POLLMANN, F.; BERG, E.; TURNER, A. M.; OSHIKAWA, M. Symmetry protection of topological phases in one-dimensional quantum spin systems. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 85, p. 075125, Feb 2012. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.075125>>.

POULIN, D.; QARRY, A.; SOMMA, R.; VERSTRAETE, F. Quantum simulation of time-dependent hamiltonians and the convenient illusion of hilbert space. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 106, p. 170501, Apr 2011. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.170501>>.

RENARD, J.-P.; REGNAULT, L.-P.; VERDAGUER, M. Haldane quantum spin chains. In: \_\_\_\_\_. *Magnetism: Molecules to Materials I*. John Wiley Sons, Ltd, 2001. cap. 2, p. 49–93. ISBN 9783527600847. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/3527600841.ch2>>.

ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de; TORRICO, J.; VERÍSSIMO, L. M.; PEREIRA, M. S. S.; LYRA, M. L. Low-temperature pseudo-phase-transition in an extended hubbard diamond chain. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 103, p. 042123, apr 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.103.042123>>.

RULE, K. C.; WOLTER, A. U. B.; SÜLLOW, S.; TENNANT, D. A.; BRÜHL, A.; KÖHLER, S.; WOLF, B.; LANG, M.; SCHREUER, J. Nature of the spin dynamics and  $1/3$  magnetization plateau in azurite. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 100, p. 117202, Mar 2008. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.117202>>.

SACHDEV, S.; KEIMER, B. Quantum criticality. *Physics Today*, v. 64, n. 2, p. 29–35, 2 2011. ISSN 0031-9228.

SANO, K.; TAKANO, K. Spin gap of  $s = 1/2$  heisenberg model on distorted diamond chain. *Journal of the Physical Society of Japan*, v. 69, n. 8, p. 2710–2711, 2000. Disponível em: <<https://doi.org/10.1143/JPSJ.69.2710>>.

SCHOLLWÖCK, U. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, Elsevier BV, v. 326, n. 1, p. 96–192, jan. 2011. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.aop.2010.09.012>>.

SHASTRY, B. S. Bounds for correlation functions of the heisenberg antiferromagnet. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 25, n. 5, p. L249, mar 1992. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/25/5/008>>.

SILVA, W. M. da; MONTENEGRO-FILHO, R. R. Role of density-dependent magnon hopping and magnon-magnon repulsion in ferrimagnetic spin- $(1/2, s)$  chains in a magnetic field. *Physical Review B*, American Physical Society (APS), v. 103, n. 5, p. 054432, feb 2021. ISSN 2469-9950. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.103.054432>>.

SOUZA, F.; ALMEIDA, G. M. A.; LYRA, M. L.; PEREIRA, M. S. S. Interplay between charge and spin thermal entanglement in hubbard dimers. *Physical Review A*, American Physical Society, v. 102, p. 032421, sep 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.102.032421>>.

SOUZA, F.; LYRA, M. L.; STRECKA, J.; PEREIRA, M. S. Magnetization processes and quantum entanglement in a spin- $1/2$  Ising-Heisenberg chain model of a heterotrimetallic Fe-Mn-Cu coordination polymer. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier B.V., v. 471, p. 423–431, jan 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2018.09.121>>.

- SOUZA, F.; VERÍSSIMO, L. M.; STREČKA, J.; LYRA, M. L.; PEREIRA, M. S. S. Exact and density matrix renormalization group studies of two mixed spin-(1/2, 5/2, 1/2) branched-chain models developed for a heterotrimetallic Fe-Mn-Cu coordination polymer. *Physical Review B*, American Physical Society, v. 102, p. 064414, aug 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.064414>>.
- TASAKI, H. *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems*. 1. ed. Cham: Springer, 2020. XVIII, 525 p. (Graduate Texts in Physics). ISBN 978-3-030-41264-7. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/978-3-030-41265-4>>.
- TIAN, G.-S. Coexistence of the ferromagnetic and antiferromagnetic long-range orders in the generalized antiferromagnetic heisenberg model on a bipartite lattice. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 27, n. 7, p. 2305, apr 1994. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/27/7/012>>.
- VERDAGUER, M.; GLEIZES, A.; RENARD, J. P.; SEIDEN, J. Susceptibility and magnetization of  $\text{Cu}(\text{S}_2\text{C}_2\text{O}_2)_2 \cdot 7.5\text{H}_2\text{O}$ . first experimental and theoretical characterization of a quasi-one-dimensional ferrimagnetic chain. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 29, p. 5144–5155, May 1984. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.29.5144>>.
- VERÍSSIMO, L. M.; PEREIRA, M. S. S.; STREČKA, J.; LYRA, M. L. Kosterlitz-thouless and gaussian criticalities in a mixed spin-(1/2, 5/2, 1/2) heisenberg branched chain with exchange anisotropy. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 99, p. 134408, apr 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.134408>>.
- VERÍSSIMO, L. M.; PEREIRA, M. S. S.; STREČKA, J.; LYRA, M. L. Topological quantum phase transition in a mixed-spin heisenberg tetramer chain with alternating spin-1/2 and spin-5/2 dimers. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Elsevier BV, v. 571, p. 170595, apr 2023. ISSN 0304-8853. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2023.170595>>.
- VERÍSSIMO, L. M.; PEREIRA, M. S. S.; STREČKA, J.; LYRA, M. L. Universality of the topological phase transition in mixed-spin tetramer heisenberg chains. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Elsevier BV, v. 626, p. 129024, oct 2023. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.physa.2023.129024>>.
- VIDAL, G.; LATORRE, J. I.; RICO, E.; KITAEV, A. Entanglement in quantum critical phenomena. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 90, p. 227902, Jun 2003. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.227902>>.
- WEN, X.-G. Choreographed entanglement dances: Topological states of quantum matter. *Science*, v. 363, n. 6429, p. eaal3099, 2019. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aal3099>>.
- WHITE, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 69, p. 2863–2866, Nov 1992. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.2863>>.
- WHITE, S. R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 48, p. 10345–10356, Oct 1993. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.10345>>.

- WIERSCHEM, K.; SENGUPTA, P. Quenching the haldane gap in spin-1 heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 112, p. 247203, Jun 2014. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.247203>>.
- WILLIAMS, R. C.; BLACKMORE, W. J. A.; CURLEY, S. P. M.; LEES, M. R.; BIRNBAUM, S. M.; SINGLETON, J.; HUDDART, B. M.; HICKEN, T. J.; LANCASTER, T.; BLUNDELL, S. J.; XIAO, F.; OZAROWSKI, A.; PRATT, F. L.; VONESHEN, D. J.; GUGUCHIA, Z.; BAINES, C.; SCHLUETER, J. A.; VILLA, D. Y.; MANSON, J. L.; GODDARD, P. A. Near-ideal molecule-based haldane spin chain. *Phys. Rev. Res.*, American Physical Society, v. 2, p. 013082, Jan 2020. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.2.013082>>.
- Wilson, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, v. 47, n. 4, p. 773–840, out. 1975.
- WU, D.; ROSSI, R.; VICENTINI, F.; ASTRAKHANTSEV, N.; BECCA, F.; CAO, X.; CARRASQUILLA, J.; FERRARI, F.; GEORGES, A.; HIBAT-ALLAH, M.; IMADA, M.; LÄUCHLI, A. M.; MAZZOLA, G.; MEZZACAPO, A.; MILLIS, A.; MORENO, J. R.; NEUPERT, T.; NOMURA, Y.; NYS, J.; PARCOLLET, O.; POHLE, R.; ROMERO, I.; SCHMID, M.; SILVESTER, J. M.; SORELLA, S.; TOCCHIO, L. F.; WANG, L.; WHITE, S. R.; WIETEK, A.; YANG, Q.; YANG, Y.; ZHANG, S.; CARLEO, G. Variational benchmarks for quantum many-body problems. *Science*, v. 386, n. 6719, p. 296–301, 2024. Disponível em: <<https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.adg9774>>.
- YAMAGUCHI, H.; OKITA, T.; IWASAKI, Y.; KONO, Y.; UEMOTO, N.; HOSOKOSHI, Y.; KIDA, T.; KAWAKAMI, T.; MATSUO, A.; HAGIWARA, M. Experimental realization of lieb-mattis plateau in a quantum spin chain. *Scientific Reports*, v. 10, n. 1, p. 9193, June 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1038/s41598-020-66336-8>>.
- YAMANAKA, M.; OSHIKAWA, M.; AFFLECK, I. Nonperturbative approach to luttinger's theorem in one dimension. *Physical Review Letters*, American Physical Society (APS), v. 79, n. 6, p. 1110–1113, ago. 1997. ISSN 1079-7114. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.1110>>.