



**INSTITUTO DE FÍSICA**  
**Universidade Federal Fluminense**

JAIME LUIS C. DA C. FILHO

TESE DE DOUTORADO

Niterói - RJ

Abril 2018



INSTITUTO DE FÍSICA  

---

Universidade Federal Fluminense

# Correlações na transição de fase de localização de muitos corpos em cadeias de spins

Jaime Luis Cardoso da Cruz Filho

*Orientador:* Prof. Dr. Marcelo Silva Sarandy

*Co-orientadora:* Prof. Dra. Andreia Mendonça Saguia

Niterói - RJ

Abril 2018

# Correlações na transição de fase de localização de muitos corpos em cadeias de spins

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Silva Sarandy  
Co-orientadora: Prof. Dra. Andreia Mendonça Saguia

Niterói - RJ

Abril 2018

Ficha catalográfica automática - SDC/BIF

C268c Cardoso da Cruz Filho, Jaime Luis  
Correlações na transição de fase de localização de  
muitos corpos em cadeias de spins / Jaime Luis Cardoso da Cruz  
Filho ; Marcelo Silva Sarandy, orientador ; Andreia Mendonça  
Saguaia, coorientadora. Niterói, 2018.  
100 f. : il.

Tese (doutorado)-Universidade Federal Fluminense, Niterói,  
2018.

DOI: <http://dx.doi.org/10.22409/PPGF.2018.d.76947629268>

1. Transição de fase . 2. Correlação quântica . 3.  
Simulação numérica . 4. Produção intelectual. I. Título  
II. Silva Sarandy, Marcelo, orientador. III. Mendonça Saguaia,  
Andreia, coorientadora. IV. Universidade Federal Fluminense.  
Instituto de Física.

CDD -

## Resumo

### Correlações na transição de fase de localização de muitos corpos em cadeias de spins

Jaime Luis Cardoso da Cruz Filho

*Orientador:* Prof. Dr. Marcelo Silva Sarandy

*Co-orientadora:* Prof. Dra. Andreia Mendonça Saguia

A transição entre as fases térmica e localizada de muitos corpos, transição térmico-MBL, tem sido bastante estudada, nos últimos anos, através de várias abordagens e em vários sistemas. A fase localizada possui a característica de não ser descrita pela mecânica estatística de equilíbrio, isto é, quando um sistema encontra-se na fase localizada ele não termaliza. Nesse trabalho usamos alguns conceitos de informação quântica para analisar a transição térmico-MBL em sistemas de spin-1/2. Propomos o uso de funções de correlação de um e dois pontos para encontrar o ponto crítico de tal transição na cadeia de Heisenberg de spin-1/2. Mostramos que tal abordagem fornece resultados muito satisfatórios. Analisamos a influência das fases na dinâmica de tais correlações, e, por último, utilizamos a entropia de emaranhamento para analisar a transição térmico-MBL na cadeia de Ising organizada segundo grafos chimera. Esses últimos resultados são então formulados em termos de uma proposta experimental para o *annealer* quântico da D-Wave.

**Palavras-chave:** Transições de fase. Termalização. Localização de muitos corpos. Correlações em informação quântica. Cadeias de spin-1/2.

Niterói - RJ

Abril 2018

*Abstract*Correlations in many-body localization  
phase transition in spin chains

Jaime Luis Cardoso da Cruz Filho

*Orientador:* Prof. Dr. Marcelo Silva Sarandy*Co-orientadora:* Prof. Dra. Andreia Mendonça Saguia

The phase transition between thermal phase and many-body localized phase - MBL transition, has become too studied in last years, through many approaches and in several models. Many-body localized phase is not described by statistical mechanics of equilibrium, i.e., if a system is in localized phase, it does not reach thermal equilibrium. In this thesis we have used some concepts of quantum information to analyse the many-body localization transition in 1/2-spin systems. We applied one and two-points correlation functions to find the critical point of such transition in 1/2-spin Heisenberg model. With this, we got really good results. We analysed the influence of thermal and many-body localized phases in dynamics of these correlations. We also studied the many-body localization transition in Ising model organized in a chimera graph, using entropy of entanglement to specify the critical point. Results concerned to chimera graphs were formulated in an experimental proposal to the quantum annealer of D-Wave.

**Key-words:** Phase transition. Thermalization. Many-body localization. Correlations in quantum information. 1/2-Spin chains.

Niterói - RJ

Abril 2018

*“Dedico este trabalho a uma mulher corajosa,  
batalhadora, dedicada, e, acima de tudo, vitoriosa.  
Obrigado Raimunda Cardoso por tornar tudo isso possível.”*

*Três paixões, simples mas irresistivelmente fortes, governam  
minha vida: o desejo imenso de amar, a procura do conhecimento e  
a insuportável compaixão pelo sofrimento da humanidade.*

*Bertrand Russel*

---

## Agradecimentos

Certamente muitas pessoas contribuíram para que eu chegasse até esse momento, não tenho como agradecer a todas, então, agradecerei às pessoas que estiveram mais próximas de mim nesses 4 anos de doutorado.

Inicialmente agradeço a minha Mãe, Valdenice, por sempre estar comigo, me ajudando, me apoiando e acreditando em mim. Somos tão diferentes e ao mesmo tempo tão parecidos. Obrigado por ser essa pessoa maravilhosa.

Quero também agradecer toda a ajuda que meu Pai, Jaime, me deu durante grande parte de minha vida. Com certeza ele é um dos grandes responsáveis por eu ter chegado até aqui. Obrigado.

A pessoa mais presente na minha vida nesses 4 anos de doutorado foi a minha namorada, Amanda. Você é muito mais do que uma namorada para mim. Cúmplice, confidente, parceira, amiga, ... Incontáveis são os adjetivos, incomensurável é o meu sentimento por você. Tantos momentos vividos nesses 4 anos, e você sempre do meu lado. Te amo muito. Espero retribuir tudo que você faz por mim. Obrigado por todos os momentos maravilhosos que vivemos.

Morar em uma nova cidade, sem conhecer praticamente nada e nem ninguém, não é uma tarefa fácil. Nos primeiros meses eu tive dificuldades em conhecer pessoas as quais pudesse chamar de amigos, ou mesmo colegas. Mas com o passar do tempo, conheci pessoas que se tornaram meus verdadeiros amigos, a saber, Alan, Fernando e Magno. Muito obrigado pelas conversas, pelos risos, pelas brincadeiras, pelo apoio, enfim, pela amizade verdadeira de vocês.

Agradeço a galera do futebol: Fernando, Magno, Dalber, Jorge, Marcelão, Carlos, Enrike, Daniel, Soriano, Diego, Bonfim, Richard, Vicente, Boina e outros, pelos momentos de descontração, pelos momentos hilários durante o futebol, por me deixarem fazer tantos gols, e pelo terceiro tempo sagrado.

Também agradeço aos colegas da pós-graduação: André, Alan Vieira e Alex pelas conversas e risadas.

Não posso deixar de mencionar os excelentes professores que conheci no Instituto de Física, a saber, Prof. Dr. Antônio Zelaquett, Prof. Dr. Jürgen Fritz e Prof. Dr. Caio Lewenkopf. Obrigado pelos ensinamentos.

Por último, agradeço ao orientador Prof. Dr. Marcelo Sarandy e a co-orientadora Prof. Dra. Andreia Saguia por transformarem completamente a minha vida acadêmica. Obrigado por terem me dado a oportunidade de trabalhar com vocês, mesmo faltando apenas 18 meses para o término do meu doutorado. A competência e o comprometimento ímpares de vocês possibilitaram o sucesso desse trabalho. Espero que nossa parceria continue e, mais uma vez, obrigado.

# Lista de Figuras

1.1	Valor esperado da magnetização na direção $x$ de um spin da cadeia, $\langle \sigma_1^x \rangle_i$ , nos auto-estados do hamiltoniano $ E_i\rangle$ , quando o sistema é integrável $\xi = 0,0$ , e quando o sistema é não-integrável $\xi = 0,5$ . Resultados encontrados para $N = 12$ spins do modelo dado pela Eq. (1.7), com $J = 1,0$ e $\Delta = 0,5$ . . . . .	22
3.1	Gráfico principal: Média da entropia de emaranhamento $S_E$ sobre 10% dos auto-estados do meio de espectro e sobre $2 \times 10^3$ realizações de desordem como uma função da intensidade da desordem $h$ . No inset temos a variância associada às realizações de desordem de tal grandeza $\delta^2 S_E$ também como função de $h$ . . . . .	43
3.2	Gráfico principal: Média do emaranhamento global $G_E$ como uma função da intensidade da desordem $h$ . O inset evidencia o comportamento não-monotônico de $G_E$ para valores pequenos de $h$ . . . . .	44
3.3	Gráfico principal: <i>finite-size scaling</i> dos dados mostrados na Fig. 3.2, com $a = 0,5$ e $h_c = 3,8 \pm 0,2$ . No inset temos a lei de decaimento tipo potência de $G_E$ na fase localizada. . . . .	45
3.4	Gráfico principal: média da discórdia geométrica $Q_G$ como função da intensidades da desordem $h$ na escala logarítmica. Inset (a): primeiras derivadas $Q'_G$ da discórdia geométrica em relação a $h$ . Inset (b): o limite termodinâmico do máximo de $Q'_G$ , o que nos fornece $h_c = 3,34 \pm 0,03$ . . . . .	46

- 3.5 Média das correlações geométricas clássica  $C_G$  (a) e total  $T_G$  (b) como funções de  $h$  na escala logarítmica, assim como suas derivadas,  $C'_G$  (c) e  $T'_G$  (d), em relação a  $h$ . Os insets em (c) e (d) mostram o limite termodinâmico do valor máximo de  $C'_G$  e  $T'_G$ , respectivamente, fornecendo  $h_c = 3,43 \pm 0,06$  para  $C_G$  e  $h_c = 3,45 \pm 0,06$  para  $T_G$ . . . . . 47
- 4.1 Dinâmica da entropia de emaranhamento entre as duas metades da cadeia do modelo dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase térmica,  $h = 1,0$ , para  $N = 4$  e  $6$  spins na cadeia. . . . . 56
- 4.2 Dinâmica da entropia de emaranhamento entre as duas metades da cadeia do modelo dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase MBL,  $h = 6,0$ , para  $N = 4$  e  $6$  spins na cadeia. . . . . 57
- 4.3 Dinâmica do emaranhamento global num sistema cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase térmica,  $h = 1,0$ , para  $N = 4, 6$  e  $8$  spins na cadeia. . . . . 58
- 4.4 Dinâmica do emaranhamento global num sistema cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase MBL,  $h = 6,0$ , para  $N = 4, 6$  e  $8$  spins na cadeia. Inset: Influência da anisotropia  $\Delta$  na dinâmica do emaranhamento global, tais resultados foram obtidos para  $N = 8$  spins. . . . . 59
- 4.5 Dinâmica da discórdia geométrica entre dois spins vizinhos da cadeia, cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase térmica,  $h = 1,0$ , para  $N = 4, 6$  e  $8$  spins na cadeia. . . . . 61
- 4.6 Dinâmica da discórdia geométrica entre dois spins vizinhos da cadeia, cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase MBL,  $h = 6,0$ , para  $N = 4, 6$  e  $8$  spins na cadeia. Inset: Influência da anisotropia  $\Delta$  na dinâmica da discórdia quântica geométrica, tais resultados foram obtidos para  $N = 8$  spins. . . . . 62

5.1	Representação do processador do <i>annealer</i> quântico da D-Wave com 512 q-bits. Círculos representam os q-bits, e curvas as interações entre os mesmos. Círculos vermelhos denotam “q-bits” não operantes. Adaptado da Ref. [159]. . . . .	64
5.2	Esquema diferenciando os dois processos de otimização, o <i>simulated annealing</i> e o <i>annealing</i> quântico. O primeiro baseia-se em flutuações térmicas, enquanto que o segundo baseia-se em flutuações quânticas. Adaptado da Ref. [153]. . . . .	66
5.3	Esquema representativo do q-bit supercondutor de fluxo. Adaptado da Ref. [144].	69
5.4	Grafos chimera para $N = 4, 6$ e $8$ q-bits em uma célula do processador do <i>annealer</i> quântico da D-Wave. Os círculos representam os sítios da rede e as setas representam as interações entre os sítios. . . . .	70
5.5	(a) Comportamento qualitativo das funções $A(s)$ e $B(s)$ , as quais especificam o protocolo de <i>annealing</i> . (b) Evolução do tempo normalizado como função de $t$ . Ao atingirmos $s(t = t^*) = s^*$ o hamiltoniano é pausado, e volta a ser dependente do tempo apenas em $\tilde{t} \lesssim T$ . Após $\tilde{t}$ a dinâmica é “acelerada” até atingirmos $s(t = T) = 1$ , aí sim a medida é realizada. . . . .	72
5.6	Gráfico principal: valor médio da entropia de emaranhamento $S_E$ entre as duas metades da rede chimera, para várias realizações de desordem, como função da interação entre os spins da rede $\delta J$ . Inset: variância da entropia de emaranhamento $\delta^2 S_E$ relativa às várias realizações de desordem. Tais resultados são para o auto-estado do hamiltoniano (5.5) que pertence ao meio do espectro. . . . .	74
5.7	Diagrama de fases $\varepsilon \times \delta J$ entre as fases térmica e MBL. A curva explicitada é denominada <i>mobility edge</i> , e contém todos os pontos críticos da transição, cada um referente a uma densidade de energia diferente. Tais pontos críticos foram obtidos através da variância de entropia de emaranhamento $\delta^2 J$ entre as duas metades da rede chimera com $N = 8$ spins, para um sistema modelado pelo hamiltoniano (5.5). . . . .	75

- 
- 5.8 Valor esperado da magnetização do spin  $i = 1$  da rede chimera em relação a um estado inicialmente produto  $|00 \dots 00\rangle$ , para vários valores de  $\delta J$ , como função do tempo  $t$ . A dinâmica é dada pelo hamiltoniano (5.5), e todos os resultados são para  $N = 8$  spins. . . . . 76
- 5.9 Componente  $|00 \dots 00\rangle$  de todos os auto-estados do hamiltoniano (5.5). Tal componente é muito maior nos auto-estados pertencentes à borda do espectro. . . . . 78

# Sumário

<b>Introdução</b>	<b>13</b>
<b>1 Termalização em sistemas quânticos fechados</b>	<b>17</b>
1.1 Idéias gerais e a formalização do problema . . . . .	18
1.2 Hipótese da termalização dos auto-estados - ETH . . . . .	19
1.3 ETH e integrabilidade . . . . .	21
<b>2 Correlações em sistemas de muitos corpos</b>	<b>24</b>
2.1 Entropia de emaranhamento . . . . .	25
2.2 Emaranhamento global . . . . .	26
2.3 Correlações geométricas para sistemas bipartidos . . . . .	28
2.3.1 Para estados de 2 spins vizinhos em uma cadeia . . . . .	31
<b>3 Transição de localização na cadeia de Heisenberg</b>	<b>33</b>
3.1 Tópicos importantes e definição . . . . .	34
3.1.1 Generalização da localização de Anderson . . . . .	34
3.1.2 Definição da fase MBL . . . . .	36
3.1.3 Caos nas fases térmica e MBL . . . . .	37
3.2 Emaranhamento nas fases térmica e MBL . . . . .	39
3.3 Modelo e abordagem . . . . .	40
3.4 Resultados . . . . .	42
3.4.1 Entropia de emaranhamento . . . . .	42

3.4.2	Emaranhamento global . . . . .	42
3.4.3	Correlações geométricas . . . . .	45
3.5	Discussão . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Dinâmica das correlações nas fases térmica e MBL</b>	<b>50</b>
4.1	Dinâmica na fase localizada . . . . .	51
4.2	Modelo e abordagem . . . . .	52
4.2.1	Mapeamento em férmions sem spin . . . . .	54
4.3	Resultados . . . . .	56
4.3.1	Entropia de emaranhamento . . . . .	56
4.3.2	Emaranhamento global . . . . .	58
4.3.3	Discórdia quântica geométrica . . . . .	60
4.4	Discussão . . . . .	61
<b>5</b>	<b>Transição térmico-MBL e annealing quântico</b>	<b>63</b>
5.1	Annealing quântico e teorema adiabático . . . . .	65
5.2	Annealer quântico da D-Wave . . . . .	67
5.3	Modelo e método . . . . .	69
5.3.1	Obtenção do ponto crítico . . . . .	69
5.3.2	Dinâmica da magnetização . . . . .	71
5.4	Resultados . . . . .	73
5.4.1	Ponto crítico . . . . .	73
5.4.2	Dinâmica da magnetização . . . . .	75
5.5	Discussão . . . . .	77
	<b>Considerações Finais</b>	<b>79</b>
<b>A</b>	<b>Teorema adiabático</b>	<b>81</b>

# Introdução

O termo *localização*, como o analisaremos aqui, foi introduzido em sistemas de matéria condensada por Anderson [1] em 1958. Ele analisou o movimento de partículas quânticas em sistemas com desordem, via potencial aleatório em uma rede, e sem interação entre as partículas. Foi mostrado que, para desordens suficientemente fortes, os auto-estados do hamiltoniano tornavam-se exponencialmente localizados em torno de uma posição fixa, daí a origem do termo estado localizado. Como consequência, em tal situação não existe difusão de partículas e nem de energia, e assim, o sistema é um isolante.

Após o trabalho de Anderson, uma questão permaneceu aberta, a qual se referia ao papel da interação entre os constituintes do sistema no fenômeno da localização. Mais especificamente, a questão era: o fenômeno da localização pode existir em sistemas interagentes? O que ocorre em um sistema quântico fechado quando existem interações e desordem?

Nas Refs. [2–8], tais questões foram abordadas, e várias contribuições importantes foram dadas. Em 2006, Basko [9] mostrou que o fenômeno da localização é estável para sistemas com interações de curto alcance e suficientemente pequenas. Tal localização, uma generalização da localização de Anderson, ficou conhecida como *localização de muitos corpos*, *Many-Body Localization* - MBL.

A localização de muitos corpos é uma fase da matéria [10], pois, como mostrou Basko, é robusta à perturbações suficientemente fracas porém genéricas. Tal fase será referida nesse trabalho como *fase MBL*. Uma das características mais importantes da fase MBL é a ausência de termalização, ou seja, sistemas que estão nessa fase não entram em equilíbrio térmico [11].

Assim, podemos identificar duas fases distintas em sistemas nos quais estão presentes tanto a interação quanto a desordem. Uma delas é a *fase térmica*, encontrada em regimes de baixa

intensidade de desordem; a outra é a fase MBL, encontrada para altas intensidades de desordem. Dessa forma, existe um valor de intensidade de desordem em que o sistema sofre a transição de fase. Essa transição de fase vem sendo bastante explorada nos últimos anos, cobrindo diferentes áreas da física, tais como: caos quântico [12, 13], matéria condensada [14], informação quântica [15], mecânica estatística fora do equilíbrio [16], átomos ultrafrios [17] e outras.

Tanto a termalização quanto a localização são resultados da dinâmica de sistemas fechados [10]. Isso é entendido da seguinte forma: imagine um estado inicial  $|\psi_0\rangle$  que descreve um sistema quântico fechado, tal estado evolui sob uma dinâmica unitária e, após um tempo  $t$  de relaxação, atinge um estado de equilíbrio descrito por  $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_0\rangle$ . Dependendo da fase que o estado inicial pertencia, os valores esperados de observáveis em  $|\psi(t)\rangle$  concordam com um estado térmico, ou com um estado localizado.

Um conclusão direta do fato de não haver termalização na fase MBL é que um estado localizado não é descrito pela mecânica estatística de equilíbrio [11]. Um sistema isolado termaliza quando ele consegue atuar como um banho térmico para seus subsistemas [18]. Para que isso ocorra, diferentes partes do sistema devem trocar energia eficientemente. Assim, o transporte de energia é necessário, o que não existe em um sistema na fase MBL, o que reforça a ideia de que um estado localizado não é térmico.

Desde meados da última década, a pesquisa em localização de muitos corpos vem em crescente desenvolvimento. Parte significativa dessa pesquisa está fundamentada em simulações numéricas [12, 19–56], com o uso de conceitos de informação quântica, tais como entropia de emaranhamento [20, 28, 29, 31, 34, 37, 38, 43, 46, 49, 52], entropia de Rényi [20, 23, 33, 55, 56], correlações totais [41, 48], e concorrência [12, 44, 45]. O que nos mostra que tais conceitos são bastante utilizados para analisar as características da fase MBL, bem como a transição térmico-MBL e seu ponto crítico.

Além dos conceitos ligados à informação quântica, também é muito comum, na análise da transição de fase térmico-MBL, o uso da distribuição estatística dos níveis de energia adjacentes do hamiltoniano de muitos corpos [19, 27], e o uso de medidas de localização, como o *inverse participation ratio* - IPR [12, 23, 56], o qual é definido por  $(\text{IPR})_n = |\langle a|n\rangle|^4$ , e mede a localização de um auto-estado  $|n\rangle$  do hamiltoniano em uma base específica  $\{|a\rangle\}$ .

A verificação experimental da fase MBL é particularmente problemática, pois as características da fase MBL, no geral, são obtidas para sistemas quânticos fechados e isolados, e num experimento o acoplamento com o meio ambiente é inevitável. Esse cenário começou a mudar com experimentos com átomos frios.

A Ref. [17] reportou o primeiro experimento que evidenciou características da fase MBL. Tal experimento foi realizado em um gás fermiônico ultra-frio em uma rede 1-dimensional com um potencial quasi-periódico. Eles mediram o *imbalance*,  $I(t) = \frac{N_i - N_p}{N_i + N_p}$ , a qual é a diferença normalizada entre o número de partículas nos sítios ímpares,  $N_i$  e pares,  $N_p$  [57]. Resumidamente, eles prepararam um estado inicial em que havia uma alternância entre sítio ocupado e vazio. Utilizando uma dinâmica pós-*quench*, ou seja, uma dinâmica após uma mudança brusca no hamiltoniano, puderam medir  $I(t)$ . Foi verificado que, na ausência do potencial quasi-aleatório a quantidade decaía rapidamente para zero, porém na fase MBL, o sistema equilibrou num valor não-nulo do *imbalance*, mostrando que o sistema, mesmo para tempos longos, mantinha memória do estado inicial.

Na Ref. [58], estados MBL foram gerados em uma sistema modelado pelo hamiltoniano de Ising com interações de longo alcance, e desordem aleatória programada, para 10 spins inicialmente fora do equilíbrio. A transição entre as fases térmica e MBL foi observada para bósons numa rede óptica 2-dimensional desordenada [59]. Vários outros experimentos também verificaram traços da fase MBL em sistemas diferentes [60–64].

O propósito dessa tese é aplicar o conceito de correlação, proveniente da informação quântica, para analisar a transição térmico-MBL em alguns modelos 1-dimensionais de spins-1/2. Utilizamos funções de correlações de um e dois pontos para determinar o ponto crítico da transição de fase mencionada. Esses resultados foram publicados na Ref. [51]. Para tal usamos diagonalização exata do hamiltoniano [65] de um sistema com  $N$  sítios, e calculamos, para vários auto-estados do sistema, as funções de correlação. Ressalta-se que as funções de correlação que introduzimos nessa tese são muito mais simples de se calcular do que as correlações utilizadas anteriormente na literatura. Analisamos também a influência das fases térmica e localizada na dinâmica dessas funções de correlação. Com esses resultados, propomos uma nova realização experimental da fase MBL em *annealers* quânticos, os quais são aparatos que realizam processos

de otimização através do tunelamento quântico.

A presente tese está organizada da seguinte forma. No Capítulo 1 discutiremos mais detalhadamente o conceito de termalização de sistemas quânticos fechados, nos voltando mais especificamente para a hipótese da termalização dos auto-estados, *Eigenstate Thermalization Hypothesis* - ETH, mostrando as características de estados térmicos e fazendo um contraponto com os estados localizados. No Capítulo 2, exporemos todo o arcabouço de informação quântica que utilizamos para estudar a localização de muitos corpos. No Capítulo 3, detalharemos a aplicação das correlações para analisar a transição térmico-MBL para o modelo de Heisenberg 1-dimensional sob um campo externo aleatório. O Capítulo 4 tratará da dinâmica das correlações nas fases térmica e localizada ainda no modelo citado anteriormente. No Capítulo 5 iremos analisar a transição térmico-MBL no modelo de Ising de spins-1/2 organizado num grafo chimera, com o intuito de fornecer as bases teóricas para realização de um experimento no *annealer* quântico da D-Wave. Para encerrar, as conclusões e as perspectivas para próximos trabalhos.

# Capítulo 1

## Termalização em sistemas quânticos fechados

Através da experiência diária, sabemos que um copo de água gelada, entra em equilíbrio térmico, caso nada seja feito para impedir isso, com o ambiente. A descrição padrão para esse processo assume um banho térmico, muito maior do que o sistema, no caso, o copo de água. Então, o sistema e o banho térmico trocam energia para atingirem o equilíbrio térmico.

Certamente a explicação acima não se aplica a um sistema isolado. Quando um sistema isolado entra em equilíbrio térmico, significa que cada subsistema pertencente ao próprio sistema entra em equilíbrio térmico com o restante do sistema, ou seja, o resto do sistema serve de banho térmico para cada subsistema [11]. Temos um problema quando tentamos entender como isso ocorre em sistemas quânticos fechados.

Tal problema foi percebido por von Neumann [66] já no início da própria mecânica quântica. Diferentemente da termalização em sistemas clássicos, a hipótese ergódica não pode ser aplicada a sistemas quânticos, pois a dinâmica caótica, elemento necessário para ocorrência da ergodicidade, não está presente na dinâmica dos sistemas quânticos fechados, dada pela equação de Schrödinger [67]. Nesse capítulo iremos formalizar esse problema, e detalhar uma proposta de solução do mesmo, denominada hipótese da termalização dos auto-estados, *Eigenstate Thermalization Hypothesis* - ETH [68–70].

## 1.1 Idéias gerais e a formalização do problema

Agora iremos definir o conceito de termalização. Adotaremos aqui a abordagem proposta por von Neumann [66], a qual é amplamente utilizada na literatura. Tal abordagem baseia o conceito de termalização a um observável específico do sistema, e não ao estado do sistema em si. Isso é justificado da seguinte forma, vamos supor que inicialmente o sistema quântico é descrito por um estado puro  $\rho_{puro}$ . O estado térmico é um estado misto,  $\rho_{ter}$ . A dinâmica de um sistema quântico fechado é unitária  $U(t)$ , assim, não temos como explicar a termalização pois, sob essa dinâmica,  $\rho_{puro}(t) = U(t)\rho_{puro}U^\dagger(t) \neq \rho_{ter}$ , mesmo no limite de tempos longos. Uma saída para esse problema é a abordagem dada por von Neumann.

**Definição 1 *Termalização de um observável:*** afirmaremos que um observável  $A$  termaliza, se as seguintes condições são satisfeitas: (i) o valor esperado do observável  $\langle A \rangle$ , após um dado tempo de relaxação, iguala-se ao seu valor esperado previsto pelos ensemble microcanônico  $\langle A \rangle_{mc}$ , e (ii) as flutuações em relação a esse valor esperado são pequenas na grande maioria dos instantes após o tempo de relaxação.

Agora vamos verificar, de maneira geral, quando um observável termaliza, ou seja, que condições devem ser satisfeitas para que a termalização, como dada acima, ocorra. Seja  $|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^N c_n \exp(-iE_n t)|n\rangle$  (assumiremos  $\hbar = 1$  em toda essa tese) um estado puro num instante  $t$  que pertence ao espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  de um dado sistema quântico fechado, cujo hamiltoniano é  $H$ , e  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ . Assim, o valor esperado do observável  $A$  no estado  $|\psi(t)\rangle$  é dado por

$$\langle A \rangle_t = \sum_{n,m=1}^N c_m^* c_n e^{i(E_m - E_n)t} A_{mn} , \quad (1.1)$$

em que  $A_{mn} = \langle m|A|n\rangle$ .

Inicialmente temos que verificar se tal valor esperado coincide com o valor esperado de  $A$  no ensemble microcanônico  $\langle A \rangle_{mc}$ . Para isso, vamos calcular a média para tempos longos do valor esperado dado por (1.1). Para uma função  $f(t)$  qualquer, a média de tempos longos é definida por

$$\overline{f(t)} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt f(t) . \quad (1.2)$$

Assim, utilizando essa definição para o nosso caso, ficamos com

$$\begin{aligned}\bar{A} &\equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \langle A \rangle_t \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \sum_{n,m} c_m^* c_n e^{i(E_m - E_n)t} A_{mn} \\ &= \sum_n |c_n|^2 A_{nn} + \sum_{m \neq n} c_m^* c_n A_{mn} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \frac{e^{i(E_m - E_n)\tau} - 1}{i(E_m - E_n)},\end{aligned}$$

desconsiderando degenerescências, o último termo é nulo, e ficamos apenas com

$$\bar{A} \equiv \langle A \rangle_{dia} = \sum_n |c_n|^2 A_{nn}. \quad (1.3)$$

O resultado acima é conhecido como a média do observável  $A$  no *ensemble diagonal*.

Claramente o resultado acima não coincide com o resultado previsto pela mecânica estatística usual, ou seja,  $\langle A \rangle_{dia} \neq \langle A \rangle_{mc}$ . Nota-se que o valor esperado de  $A$  como dado em (1.3) depende das condições iniciais do estado  $|\psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$ . Tal fato vai de encontro à ideia de equilíbrio térmico, pois em tal situação, o valor esperado de  $A$  será o mesmo, independentemente do estado inicial do sistema.

Outro problema relacionado a essa abordagem está na demonstração de (1.3), pois, em sistemas de muitos corpos, os auto-valores são exponencialmente próximos uns dos outros, e assim, o tempo necessário para que o termo em que  $n \neq m$  seja nulo pode ser muito maior do que a idade do universo [67]. Fato que não ocorre experimentalmente, uma vez que se observa a termalização de tais sistemas.

## 1.2 Hipótese da termalização dos auto-estados - ETH

Deutsch [68] e Srednicki [69] propuseram uma solução para tais problemas, tal solução é conhecida como *Eigenstate Thermalization Hypothesis* - ETH. A seguir temos as hipóteses do ETH para que um observável termalize no sentido definido anteriormente.

**Teorema 1** *Hipótese da termalização dos auto-estados:* ao escrevermos um observável  $A$  na base de auto-estados da energia do sistema  $\{|n\rangle\}$ , se as seguintes condições são satisfeitas:

(i) os elementos da diagonal  $A_{nn}$  são dados por  $A_{nn} = \mathcal{A}(E_n)$ , em que  $\mathcal{A}(E_n)$  é uma função suave dos auto-valores  $E_n$ , e (ii) os elementos fora da diagonal  $A_{nm}$  são exponencialmente pequenos em  $N$ , então o observável  $A$  termalizará após um certo tempo finito de relaxação.

Assim, o ETH nos afirma que o valor esperado de um observável em um auto-estado da energia é igual ao valor térmico desse observável. Ressalta-se que tais hipóteses se aplicam no limite termodinâmico. A seguir vamos explicitar porque o ETH explica a termalização de sistemas quânticos.

Utilizando a primeira condição em (1.3), ficamos com

$$\bar{A} = \langle A \rangle_{dia} = \sum_n |c_n|^2 A_{nn} = \sum_n |c_n|^2 \alpha = \alpha \sum_n |c_n|^2 = \alpha, \quad (1.4)$$

em que usamos o fato dos estados serem normalizados. Agora vamos calcular o valor esperado desse mesmo observável no ensemble microcanônico

$$\langle A \rangle_{mc} = tr(\rho_{mc} A) = \frac{1}{D} \sum_n \langle n|A|n \rangle = \frac{1}{D} \sum_{n=1}^D A_{nn} = \alpha, \quad (1.5)$$

em que  $D$  é a dimensão do espaço de Hilbert. Assim, utilizando a primeira hipótese, conseguimos mostrar que  $\langle A \rangle_{dia} = \langle A \rangle_{mc}$ , obedecendo ao primeiro critério da definição de termalização.

Porém, apenas isso não basta, temos que mostrar que as flutuações em torno desse valor esperado são pequenas para a maioria dos instantes. Assim, calcularemos a média de tempos longos das flutuações de  $A$

$$\overline{(\delta A)^2} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt (\langle A \rangle_t - \bar{A})^2 = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt [\langle A \rangle_t^2 - \bar{A}^2],$$

usando (1.1) podemos escrever

$$\begin{aligned} \overline{(\delta A)^2} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \left( \sum_{n,m} c_n c_m^* e^{-i(E_n - E_m)t} A_{mn} \right) \left( \sum_{p,q} c_p c_q^* e^{-i(E_p - E_q)t} A_{qp} \right) - \bar{A}^2 \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \sum_{n,m,p,q} c_n c_m^* c_p c_q^* e^{-i(E_n - E_m + E_p - E_q)t} A_{mn} A_{qp} - \bar{A}^2, \end{aligned}$$

abrindo esses somatórios nos seguintes termos: (i)  $n = m = p = q$ , (ii)  $n = m$  e  $p = q$  ( $n \neq p$ ), (iii)  $m = q$  e  $n = p$  ( $n \neq m$ ), e (iv)  $n \neq m \neq p \neq q$ , obtemos

$$\begin{aligned} \overline{(\delta A)^2} &= \sum_n |c_n|^4 A_{nn}^2 + \sum_{n,p \neq n} |c_n|^2 |c_p|^2 A_{nn} A_{pp} + \sum_{n,p \neq n} |c_n|^2 |c_p|^2 A_{np} A_{pn} - \bar{A}^2 \\ &\quad + \sum_{n \neq m \neq p \neq q} c_n c_m^* c_p c_q^* A_{mn} A_{qp} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt e^{-i(E_n - E_m + E_p - E_q)t}, \end{aligned}$$

como, mais uma vez desconsiderando as degenerescências, o último termo vai a zero no processo de limite, ficamos com

$$\overline{(\delta A)^2} = \sum_n |c_n|^4 A_{nn}^2 + \sum_{n,p \neq n} |c_n|^2 |c_p|^2 A_{nn} A_{pp} + \sum_{n,p \neq n} |c_m|^2 |c_p|^2 |A_{np}|^2 - \left( \sum_n |c_n|^2 A_{nn} \right)^2 ,$$

e podemos ver que os dois primeiros termos cancelam o último, assim

$$\overline{(\delta A)^2} = \sum_{n,p \neq n} |c_n|^2 |c_p|^2 |A_{np}|^2 \leq \max |A_{np}|^2 \sum_{n,p} |c_n|^2 |c_p|^2 = \max |A_{np}|^2 . \quad (1.6)$$

Assumindo que a segunda hipótese do ETH é verdadeira, perceberemos que as flutuações em torno do valor esperado são muito pequenas (decaem exponencialmente com o tamanho  $N$  do sistema), e assim, para quase todos os instantes, o valor esperado de  $A$  será muito próximo do valor esperado dado pelo ensemble microcanônico.

O ETH conduz a um fato muito interessante, a saber, a grande diferença que existe entre a termalização de sistemas clássicos e de sistemas quânticos [70]. Em sistemas clássicos a dinâmica caótica possibilita a ocorrência da ergodicidade, ou seja, a aplicação da hipótese ergódica. Assim, nessa situação, a dinâmica possui um papel crucial na termalização. Para sistemas quânticos, segundo o ETH, a termalização é um processo bastante diferente. Nesse caso, cada auto-estado do hamiltoniano é capaz de produzir valores esperados concordantes com o estado térmico, sendo que inicialmente a coerência entre os auto-estados diferentes esconde tal estado. O que a dinâmica faz é, através do *dephasing*, atenuação da contribuição dos elementos de matriz fora da diagonal, apenas revelar tal estado. Ou seja, nesse cenário, a dinâmica possui um papel secundário para a termalização.

Apesar de não haver, até o presente momento, nenhum argumento mais geral para justificar o ETH, existem vários trabalhos numéricos que comprovam sua aplicabilidade em sistemas não-integráveis [71–81].

## 1.3 ETH e integrabilidade

Vamos agora mostrar a aplicação do ETH em uma cadeia de spins-1/2. Vamos analisar o modelo de Heisenberg anisotrópico, com interação de segundos vizinhos e com  $N$  spins, cujo

hamiltoniano é dado por

$$H = J \sum_{j=1}^N \left( \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z + \xi \sigma_j^z \sigma_{j+2}^z \right), \quad (1.7)$$

em que  $\sigma_j^{x,y,z}$  são os operadores de Pauli no sítio  $j$  e  $\Delta$  é a anisotropia. Esse modelo é integrável apenas para o caso em que  $\xi = 0$ . Em tal limite, o hamiltoniano pode ser diagonalizado através do *ansatz* de Bethe [82, 83].

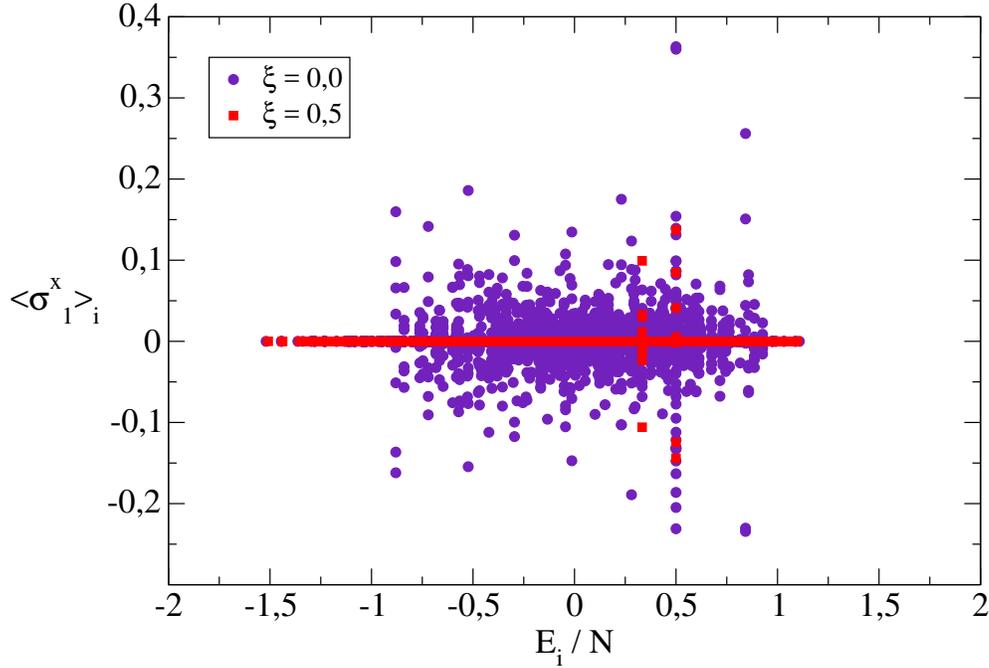


Figura 1.1: Valor esperado da magnetização na direção  $x$  de um spin da cadeia,  $\langle \sigma_1^x \rangle_i$ , nos auto-estados do hamiltoniano  $|E_i\rangle$ , quando o sistema é integrável  $\xi = 0,0$ , e quando o sistema é não-integrável  $\xi = 0,5$ . Resultados encontrados para  $N = 12$  spins do modelo dado pela Eq. (1.7), com  $J = 1,0$  e  $\Delta = 0,5$ .

Para testar o ETH temos que calcular o valor esperado de um observável em relação aos auto-estados do hamiltoniano, no presente caso, escolhemos o operador magnetização na direção  $x$  de um único spin,  $\langle \sigma_1^x \rangle_i$ . A Fig. 1.1 nos mostra os resultados para o spin no sítio 1, porém, como usamos condições de contorno periódicas, tal resultado independe do sítio escolhido.

Podemos perceber claramente através da Fig 1.1 que os valores esperados calculados nos auto-estados do sistema integrável estão dispersos em torno de 0, enquanto que no caso não-integrável em que  $\xi = 0,5$ , os valores estão concentrados em torno de 0. Temos que o valor térmico para esse operador é

$$\langle \sigma_1^x \rangle = \text{tr}(\rho_{mc} \sigma_1^x) = \text{tr} \left[ \frac{\mathbb{I}}{d} (\sigma_1^x \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}_N) \right] = 0 .$$

com isso, concluímos que o ETH é válido apenas no caso não-integrável, onde se espera que o sistema, de fato, termalize [70, 80], pois no caso integrável, a termalização não pode ocorrer devido a igualdade entre o número de integrais de movimento e o número de graus de liberdade do sistema.

## Capítulo 2

# Correlações em sistemas de muitos corpos

No início dos anos 2000, a informação quântica mostrou que poderia ajudar no desenvolvimento de outras áreas da física, como a matéria condensada [84, 85]. Métodos e conceitos daquela área mostraram-se úteis na análise de estados de sistemas de muitos corpos. As correlações provenientes da informação quântica ganharam notável aplicação em tais sistemas. De maneira geral, diz-se que um estado quântico possui algum tipo de correlação se conseguimos obter informação sobre o estado de uma parte do sistema através da observação de outra parte do mesmo sistema.

Dentre os tipos de correlação, o conceito de entropia de emaranhamento ganhou bastante destaque em modelos quânticos críticos [86–88]. Outras medidas de correlação provenientes da informação quântica, tais como concorrência [86, 89] e discórdia quântica [90, 91], também foram utilizadas com sucesso na detecção das transições de fase quânticas.

Algumas das correlações mencionadas acima, como mencionado na Introdução, também foram utilizadas com sucesso na descrição da transição térmico-MBL. Nossa abordagem, para determinar o ponto crítico em tal transição, baseia-se no conceito de emaranhamento global  $G_E$  e nas correlações geométricas, a saber, discórdia quântica geométrica  $Q_G$ , correlação clássica geométrica  $C_G$  e correlação total geométrica  $T_G$ .

Nesse capítulo, iniciaremos abordando a entropia de emaranhamento, a qual será útil nos próximos capítulos. Depois definiremos as medidas de correlações mencionadas acima, bem como discutiremos suas interpretações físicas.

## 2.1 Entropia de emaranhamento

O emaranhamento é uma correlação presente apenas em sistemas quânticos [92], e é identificado como o recurso responsável pela vantagem de diversos protocolos para tarefas quânticas em comparação com seus análogos clássicos [93]. Além de aplicações diretas em informação quântica, o emaranhamento também é utilizado para o entendimento de propriedades de sistemas de matéria condensada [85, 86, 94].

Um estado puro de um sistema bipartido  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  é emaranhado se ele não pode ser escrito como um produto tensorial de estados que pertencem aos subsistemas individuais  $|\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ . Isso implica que mesmo que o estado  $|\psi\rangle$  seja conhecido (estado puro), os estados dos subsistemas são desconhecidos.

Bennett [95] mostrou que para um estado puro de um sistema bipartido, o emaranhamento é consistentemente medido pela entropia de von Neumann. Assim temos que a quantidade de emaranhamento presente no estado puro  $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  é dada pela entropia de von Neumann dos subsistemas

$$S(\rho_1) = S(\rho_2) = -\text{tr} [\rho_1 \log \rho_1] = -\sum_j \lambda_j \log_2 \lambda_j, \quad (2.1)$$

em que  $\rho_{1(2)} = \text{tr}_{2(1)} \rho$  é o operador densidade reduzido, e  $\rho_1 |\lambda_j\rangle = \lambda_j |\lambda_j\rangle$ .

Através da Eq. (2.1), vemos que o emaranhamento é a falta de informação relacionada aos estados reduzidos dos subsistemas, quanto mais emaranhado for o estado global  $|\psi\rangle$ , menos informação sobre os estados dos subsistemas.

Para estados mistos a definição de separabilidade é diferente. Um estado  $\rho \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  é dito separável, ou não-emaranhado, se existem operadores densidade reduzidos  $\rho_1^j \in \mathcal{H}_1$  e  $\rho_2^j \in \mathcal{H}_2$ , e  $p_j > 0$ , com  $\sum_j p_j = 1$ , tal que

$$\rho = \sum_j p_j \rho_1^j \otimes \rho_2^j. \quad (2.2)$$

Assim, a definição acima nos fornece o estado separável mais geral possível. Tais estados são gerados por operações locais e comunicação clássica. Então qualquer estado misto que não puder ser escrito na forma (2.2) será um estado emaranhado.

Como veremos nos próximos capítulos, a entropia de emaranhamento possui comportamento bastante diferente nas fases térmica e MBL, o que a torna uma medida muito aplicada no estudo da transição térmico-MBL para vários tipos de sistema.

## 2.2 Emaranhamento global

Aqui usaremos outra medida de emaranhamento, introduzida por Meyer e Wallach [96], denominada emaranhamento global, a qual é uma correlação para estados puros de  $N$  q-bits definida por

$$G_E(|\psi\rangle) = \frac{4}{N} \sum_{k=1}^N D(|\tilde{u}^k\rangle, |\tilde{v}^k\rangle) , \quad (2.3)$$

em que  $|\tilde{u}^k\rangle$  e  $|\tilde{v}^k\rangle$  são vetores complexos, não-normalizados, de dimensão  $2N - 2$ , obtidos por projeções locais do estado  $|\psi\rangle$  no  $k$ -ésimo bit

$$|\psi\rangle = |0\rangle_k \otimes |\tilde{u}^k\rangle + |1\rangle_k \otimes |\tilde{v}^k\rangle . \quad (2.4)$$

A função  $D(|\tilde{u}^k\rangle, |\tilde{v}^k\rangle)$  mede a “distância” entre os vetores  $|\tilde{u}^k\rangle$  e  $|\tilde{v}^k\rangle$ , e pode ser obtida através da generalização do produto vetorial

$$D(|\tilde{u}^k\rangle, |\tilde{v}^k\rangle) = \sum_{i < j} |\tilde{u}_i^k \tilde{v}_j^k - \tilde{v}_j^k \tilde{u}_i^k|^2 . \quad (2.5)$$

Como feito em Ref. [97], também podemos escrever  $|\psi\rangle$  numa decomposição de Schmidt em uma bipartição do q-bit  $k$  e o resto dos q-bits

$$|\psi\rangle = |\bar{0}\rangle_k \otimes |\tilde{x}^k\rangle + |\bar{1}\rangle_k \otimes |\tilde{y}^k\rangle , \quad (2.6)$$

em que  $\langle \tilde{x}^k | \tilde{y}^k \rangle = 0$ , e  $\{|\bar{0}\rangle_k, |\bar{1}\rangle_k\}$  são relacionados com  $\{|0\rangle_k, |1\rangle_k\}$  através de um operador unitário local  $U_k$ . Pela invariância do produto vetorial generalizado sob unitárias locais, temos que  $D(|\tilde{u}^k\rangle, |\tilde{v}^k\rangle) = D(|\tilde{x}^k\rangle, |\tilde{y}^k\rangle)$ . Brennen [97] mostrou que a Eq. (2.5) pode ser escrita por.

$$D(|\tilde{u}^k\rangle, |\tilde{v}^k\rangle) = D(|\tilde{x}^k\rangle, |\tilde{y}^k\rangle) = \langle \tilde{x}^k | \tilde{x}^k \rangle \langle \tilde{y}^k | \tilde{y}^k \rangle .$$

O operador densidade do q-bit  $k$  é dado por  $\rho_k = tr_R(|\psi\rangle\langle\psi|)$ , em que o traço é tomado sobre o resto da cadeia. Usando a Eq. (2.6) podemos escrever que

$$\rho_k = |\bar{0}\rangle_{kk}\langle\bar{0}| \langle\tilde{x}^k|\tilde{x}^k\rangle + |\bar{1}\rangle_{kk}\langle\bar{1}| \langle\tilde{y}^k|\tilde{y}^k\rangle .$$

Com isso, temos que  $tr\rho_k^2 = \langle\tilde{x}^k|\tilde{x}^k\rangle^2 + \langle\tilde{y}^k|\tilde{y}^k\rangle^2$ . Porém, usando Eq. (2.6) em  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ , ficamos com

$$\langle\tilde{x}^k|\tilde{x}^k\rangle + \langle\tilde{y}^k|\tilde{y}^k\rangle = 1 ,$$

e assim podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle\tilde{x}^k|\tilde{x}^k\rangle\langle\tilde{y}^k|\tilde{y}^k\rangle &= \frac{1}{2} \left( 1 - \langle\tilde{x}^k|\tilde{x}^k\rangle^2 + \langle\tilde{y}^k|\tilde{y}^k\rangle^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} (1 - tr\rho_k^2) , \end{aligned}$$

assim  $D(|\tilde{u}^k\rangle, |\tilde{v}^k\rangle) = \frac{1}{2} (1 - tr\rho_k^2)$ . Substituindo esse resultado na Eq. (2.3) obtemos que

$$G_E(|\psi\rangle) = 2 \left( 1 - \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N tr[\rho_k^2] \right) , \quad (2.7)$$

Então, podemos ver que o emaranhamento global é uma média da medida de emaranhamento de pares entre um sítio e o resto do sistema. O emaranhamento global está linearmente relacionado com a pureza média de cada q-bit, e as seguintes propriedades são satisfeitas: (i)  $0 \leq G_E(|\psi\rangle) \leq 1$ .  $G_E(|\psi\rangle) = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle$  é um estado produto e  $G_E(|\psi\rangle) = 1$  para, como por exemplo, estados com emaranhamento multipartite GHZ [96], (ii)  $G_E(|\psi\rangle)$  é invariante sob unitárias locais  $U_j$ .

Como esperado, o emaranhamento global não consegue distinguir entre todas as classes distintas de emaranhamento [97]. Assim, os seguintes estados

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle_{1,2} + |11\rangle_{1,2}) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle_{3,4} + |11\rangle_{3,4}) \quad \text{e} \\ |\psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0000\rangle_{1,2,3,4} + |1111\rangle_{1,2,3,4}) , \end{aligned}$$

possuem  $G_E = 1$ . Porém, tais estados com mesmo valor de  $G_E$  podem ser distinguidos através dos números de Schmidt [93] relativos a várias bipartições.

Se o sistema apresenta invariância translacional, o emaranhamento global toma uma forma ainda mais simples, a saber

$$G_E(|\psi\rangle) = 2 (1 - tr[\rho_1^2]) . \quad (2.8)$$

No próximo capítulo usaremos essa medida de emaranhamento no estudo da transição térmico-MBL, aplicando-a na determinação do ponto crítico de tal transição.

## 2.3 Correlações geométricas para sistemas bipartidos

Em relação às correlações quânticas, algumas questões são naturais, tais como: o emaranhamento é o único tipo de correlação quântica? Estados separáveis são estados classicamente correlacionados? Para responder tais questionamentos, Ollivier e Zurek [99] propuseram o conceito da classicalidade, o qual será definido mais abaixo. Nessa seção, introduziremos as versões geométricas das correlações propostas por Ollivier e Zurek<sup>1</sup>. Usaremos tais correlações para analisar a transição térmico-MBL em cadeias de spin-1/2.

Seja um espaço de Hilbert bipartido  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ , no qual os estados quânticos são descritos por operadores densidade  $\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ , em que  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  é um conjunto fechado e positivo semi-definido de operadores, com traço unitário, que atuam em  $\mathcal{H}$ .

Para esse espaço de Hilbert definido acima, vamos denotar um conjunto de medidas de von Neumann locais por  $\{\Pi_1^j \otimes \mathbb{I}_2\}$ , em que  $\Pi_1^j$  é o conjunto de projetores ortogonais sobre o primeiro subsistema da bipartição. Após uma medida não-seletiva  $M$ , o operador densidade  $\rho$  torna-se

$$M(\rho) = \sum_j \left[ \Pi_1^j \otimes \mathbb{I}_2 \right] \rho \left[ \Pi_1^j \otimes \mathbb{I}_2 \right] , \quad (2.9)$$

assim, nossa definição de classicalidade é dada por:

**Definição 2 *Classicalidade:*** *Se existe uma medida  $M$  tal que  $M(\rho) = \rho$ , então  $\rho$  é um estado clássico-quântico, ou seja, clássico com respeito à  $\mathcal{H}_1$ .*

Note que classicalidade é um conceito definido com relação a um subsistema específico. Em [98] são dadas extensões dessa definição para medidas sobre todos os subsistemas e para estados multipartite.

Nesse ponto é importante deixarmos claro o que é uma medida não-seletiva. Na prática, tal medida ocorre quando o processo de medida é realizado sobre o sistema, porém, o resultado não

---

<sup>1</sup>Originalmente tais correlações são definidas em termos de quantidades baseadas na entropia de von Neumann, assim as versões originais são ditas entrópicas.

é observado. Assim, o estado  $\rho$ , inicialmente quântico, transforma-se no estado medido  $M(\rho)$ , um estado clássico, representado por uma mistura estatística.

A definição acima possui uma consequência interessante. Originalmente, a separabilidade de um estado foi tratada como um sinônimo de classicalidade. Porém, segundo a Def. 2, a separabilidade de um estado não está relacionada com sua classicalidade, visto que estados mistos separáveis podem apresentar correlações quânticas, e estados não-clássicos não necessariamente são emaranhados.

Como já mencionado, as correlações de pares que usaremos nesse trabalho são: discórdia quântica, correlação clássica e correlação total. Não usaremos aqui as definições originais de tais correlações, propostas em [99], mas sim versões geométricas das mesmas, tal abordagem foi introduzida em [100–102]. Em tal abordagem, as correlações mencionadas, para um sistema bipartite em um estado  $\rho$  são respectivamente dadas por

$$Q_G(\rho) = K[\rho, M(\rho)] \quad (2.10)$$

$$C_G(\rho) = K[\overline{M}(\rho), \overline{M}(\pi_\rho)] \quad (2.11)$$

$$T_G(\rho) = K[\rho, \pi_\rho] , \quad (2.12)$$

em que  $K[\rho, \tau]$  denota uma função positiva e real que é nula para  $\rho = \tau$ ,  $M(\rho)$  é um estado clássico obtido a partir da medida não-seletiva que minimiza  $Q_G$ ,  $\overline{M}(\rho)$  é um estado clássico obtido através da medida não-seletiva que maximiza  $C_G$ , e  $\pi_\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$  é o estado totalmente decorrelacionado. Nota-se que as medidas  $M$  e  $\overline{M}$  representam conjuntos independentes de medidas, isso é feito para evitar ambiguidades nas definições [102].

Vamos considerar correlações em que  $K$  é definida em termos da norma do traço (*Schatten 1-norm*), dada, para um operador  $A$ , por  $\|A\|_1 = \text{tr}|A| = \text{tr}\sqrt{A^\dagger A}$ , e de medidas projetivas atuando sobre  $\mathcal{H}_1$ .

Assim, a discórdia quântica geométrica, a qual mede a quantidade de correlação quântica entre partes de um estado, é definida por

$$Q_G(\rho) = \min_{\{M\}} \text{tr}|\rho - M(\rho)| . \quad (2.13)$$

A minimização é tomada sobre todas as medidas locais  $M$  como definida na Eq. (2.9). Assim,  $Q_G(\rho)$  é a distância entre  $\rho$  e o estado clássico-quântico mais próximo obtido pela medida  $M$ .

A quantidade de correlação clássica entre as duas partes do sistema descrito por  $\rho$  é obtida através de

$$C_G(\rho) = \max_{\{\bar{M}\}} \text{tr} |\bar{M}(\rho) - \bar{M}(\pi_\rho)|, \quad (2.14)$$

em que a maximização é feita sob todas as medidas locais  $\bar{M}$  que atuam sobre  $\mathcal{H}_1$ . A correlação clássica  $C_G(\rho)$  nos fornece a máxima informação sobre o estado que pode ser extraída localmente através de medidas em  $\rho$ . Tal medida é nula se, e somente se,  $\rho = \pi_\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$ , ou seja, se  $\rho$  é um estado completamente descorrelacionado.

Por fim, a correlação total é dada pela distância entre  $\rho$  e  $\pi_\rho$ ,

$$T_G(\rho) = \text{tr} |\rho - \pi_\rho|. \quad (2.15)$$

Tal correlação consegue detectar qualquer tipo de correlação presente em  $\rho$ , uma vez que mede a distância entre  $\rho$  e o estado totalmente descorrelacionado  $\pi_\rho$ .

Para tornar mais claro os significados de tais definições, vamos analisar três casos simples. Considere um sistema quântico formado por 2 spins, cujo operador densidade é escrito na base de auto-estados do operador  $\sigma_i^z$ , denotada por  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ . Tal base é denominada base computacional.

No primeiro caso, vamos supor que o estado do sistema de 2 spins é dado por  $\rho = |00\rangle\langle 00|$ . Nesse caso, para qualquer medida realizada no primeiro spin, o segundo estará no estado  $|0\rangle$ , então não existe nenhum tipo de correlação entre os spins, no sentido de que não ganhamos informação sobre um spin ao realizarmos uma medida sobre o segundo spin. O estado composto é simplesmente o produto tensorial de suas partes.

Agora vamos considerar que o operador densidade é dado por  $\rho = 1/2 (|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|)$ . Se fizermos uma medida seletiva no primeiro, ajustando o aparato de medida na base computacional, poderemos prever o valor do segundo spin com total certeza. Assim, nesse caso, temos um estado completamente correlacionado classicamente.

Por último, o caso em que  $\rho = 1/2 (|00\rangle\langle 00| + |-1\rangle\langle -1|)$ , em que  $|-1\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle - |1\rangle)$ . Nesse caso não há uma medida local sobre o primeiro spin que revele o valor do segundo spin com 100% de certeza na média. Se, após a medida, o primeiro spin está no estado  $|0\rangle$ , o segundo será uma mistura estatística de  $|0\rangle$  e  $|1\rangle$ . De uma outra forma, não existe medida não-seletiva

na forma (2.9) que não provoca uma perturbação no estado. Assim, além de correlação clássica, esse estado também possui discórdia quântica.

### 2.3.1 Para estados de 2 spins vizinhos em uma cadeia

Vamos agora nos restringir ao caso em que  $\rho$  é o operador densidade de 2 spins vizinhos que pertencem a uma cadeia quântica 1-dimensional de  $N$  spins. Assim,  $\rho$  é um operador densidade reduzido, obtido tomando-se o traço parcial de todos os spins da cadeia com exceção dos 2 spins que queremos analisar. O sistema que iremos analisar possui um hamiltoniano que obedece à  $[H, \mathcal{P}] = 0$ , em que  $\mathcal{P} = \otimes_{j=1}^N S_j^z$  é o operador paridade, e para tais casos, o operador densidade reduzido escrito na base computacional possui a seguinte forma

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{41}^* \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{32}^* & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{41} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

em que os seguintes vínculos são obedecidos:  $\sum_{i=1}^4 \rho_{ii} = 1$  (condição de normalização),  $\rho_{11}\rho_{44} \geq |\rho_{41}|^2$ , e  $\rho_{22}\rho_{33} \geq |\rho_{32}|^2$  (positivo semi-definido).

Os elementos não-nulos  $\rho_{ij}$  aparecem somente na diagonal e na anti-diagonal da matriz reduzida, por isso tal estado é chamado “estado-X”. Decompondo tal estado na base dos operadores de Pauli, ficamos com

$$\rho = \frac{1}{4} \left( \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} + \sum_{j=1}^3 c_j \sigma_j \otimes \sigma_j + c_4 \mathbb{I} \otimes \sigma_3 + c_5 \sigma_3 \otimes \mathbb{I} \right), \quad (2.17)$$

e os parâmetros auxiliares são dados em termos dos elementos do operador densidade reduzido (2.16)

$$c_1 = 2(\rho_{32} + \rho_{41}),$$

$$c_2 = 2(\rho_{32} - \rho_{41}),$$

$$c_3 = 1 - 2(\rho_{22} + \rho_{33}),$$

$$c_4 = 2(\rho_{11} + \rho_{33}) - 1,$$

$$c_5 = 2(\rho_{11} + \rho_{22}) - 1.$$

Para esse tipo de estado de 2 spins, existem expressões analíticas fechadas para se calcular as correlações geométricas [103,104]. A discórdia quântica geométrica é dada por [103]

$$Q_G(\rho) = \sqrt{\frac{ac - bd}{a - b + c - d}}, \quad (2.18)$$

em que  $a = \max(c_3^2, d + c_5^2)$ ,  $b = \min(c, c_3^2)$ ,  $c = \max(c_1^2, c_2^2)$  e  $d = \min(c_1^2, c_2^2)$ .

As correlações clássica e total são respectivamente escritas por [104]

$$C_G(\rho) = c_{\max}, \quad (2.19)$$

$$T_G(\rho) = \frac{1}{2} [c_{\max} + \max(c_{\max}, c_{int} + c_{\min})], \quad (2.20)$$

em que

$$c_{\max} = \max(|c_1|, |c_2|, |c_3 - c_4 c_5|),$$

$$c_{\min} = \min(|c_1|, |c_2|, |c_3 - c_4 c_5|),$$

$$c_{int} = \text{int}(|c_1|, |c_2|, |c_3 - c_4 c_5|),$$

em que esse último corresponde ao valor intermediário dos parâmetros.

Nos próximos capítulos usaremos tais expressões para analisar a transição térmico-MBL para sistemas de spin, e mostraremos que tais correlações são sensíveis às diferentes fases.

# Capítulo 3

## Transição de localização na cadeia de Heisenberg

Nesse capítulo, e nos próximos, vamos aplicar as correlações definidas no Cap. 2 para determinar o ponto crítico da transição térmico-MBL em modelos específicos. Agora trataremos do modelo de Heisenberg 1-dimensional imerso num campo aleatório. Veremos que as quantidades discutidas no Cap. 2 são bastante diferentes na fase térmica e na fase localizada, o que possibilita determinar o ponto em que ocorre a transição.

O modelo que iremos tratar agora é tido como o modelo padrão para se discutir a transição térmico-MBL em modelos de spins [20, 22, 24, 29, 37, 41], assim, existem vários trabalhos na literatura que exploram várias características da transição térmico-MBL nesse modelo. Porém, nesse capítulo vamos propor duas formas inéditas de se determinar o ponto crítico da transição, os quais não acessam grandes porções do sistema. Como veremos, tais abordagens mostrar-se-ão bastante promissoras [51].

Iniciaremos o capítulo definindo a transição de fase térmico-MBL a partir de sua conexão com o ETH, depois detalharemos como a entropia de emaranhamento se comporta nas fases térmica e MBL. Após isso, mostremos os resultados que obtivemos com a nossa abordagem, e por fim, discutiremos os mesmos.

## 3.1 Tópicos importantes e definição

Nessa seção vamos discutir alguns pontos importantes sobre a fase MBL. Mesmo que tais tópicos não sejam o foco de tal trabalho, a explanação dos mesmos é importante para completeza dessa tese. Iniciaremos abordando a localização de muitos corpos como uma generalização da localização de Anderson. Em seguida vamos definir a fase MBL como a analisaremos aqui. Depois veremos como o conceito de caos está relacionado com as fases térmica e localizada.

### 3.1.1 Generalização da localização de Anderson

A partir do trabalho de Anderson [1], o fenômeno da localização em sistemas de matéria condensada ganhou importância, e um significado bastante específico. Anderson, analisou sistemas de elétrons não-interagentes submetidos a potenciais estáticos, porém aleatórios em cada sítio. Esse é um análogo quântico de um *random walk* em um meio aleatório. Anderson analisou um hamiltoniano da seguinte forma

$$H = -g \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_i c_j^\dagger) + \sum_i u_i c_i^\dagger c_i, \quad (3.1)$$

em que  $g$  é a constante de *hopping*,  $\langle i, j \rangle$  é o par de sítios vizinhos,  $c_i^\dagger$  e  $c_i$  são, respectivamente, operadores fermiônicos de criação e aniquilação no sítio  $i$ , e  $u_i$  é o potencial aleatório no sítio  $i$ , o qual é um número aleatório e independente sorteado de uma distribuição uniforme no intervalo  $[-W/2, W/2]$ , com  $W$  denotando a intensidade da desordem.

Ele mostrou que sistemas representados pela Eq. (3.1) podem apresentar condutividade nula para intensidades de desordem suficientemente altas, isso é, o sistema torna-se um isolante. Mais precisamente, dependendo da energia e da intensidade da desordem  $W$ , todos os estados quânticos são estendidos, ou exponencialmente localizados  $|\psi(\mathbf{r})|^2 \propto \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\xi)$ , em que  $\xi$  é o comprimento de localização [105]. Como foi previsto pela *scaling theory of localization* [106], todos os estados são localizados em sistemas 1- e 2-dimensionais para qualquer intensidade de desordem.

Tal localização deve-se à interferência quântica induzida pelos espalhamentos elásticos provocados pelas aleatoriedades, e assim, a desordem pode localizar uma partícula quântica, apesar

do tunelamento quântico, e mesmo em situações em que a partícula não é localizada classicamente [107].

Devido à essa natureza, sistemas descritos pela Eq. (3.1) possuem uma transição metal-isolante, em que as funções de onda estendidas descrevem situações em que existe uma condutividade não-nula, enquanto que os auto-estados localizados descrevem situações em que a condutividade é nula. A fase localizada para tais sistemas é chamada *fase de Anderson*, bem como a transição de fase associada é chamada de *transição de Anderson*.

Experimentos verificaram a existência da localização de Anderson em ondas de luz [108–112], em microondas [113, 114], no condensado de Bose-Einstein [115, 116], e em ondas de matéria [117].

A fase localizada em sistemas de muitos corpos interagentes, a qual denominaremos *fase MBL*, pode ser considerada uma generalização da fase de Anderson. Mesmo sendo abordada já no artigo em que o Anderson discutiu a localização em sistemas não-interagentes, a fase MBL foi deixada de lado por algumas décadas, e foi Basko [9] que, de fato, forneceu argumentos teóricos convincentes em relação à estabilidade da fase MBL, mesmo em auto-estados de muitos corpos mais excitados [17]. Nas Refs. [2–8, 48, 118–120] também são dadas contribuições teóricas relevantes no mesmo sentido dado por Basko, as quais são corroboradas por vários trabalhos numéricos [19, 21, 22, 28, 30, 33, 36].

Assim, Basko apresentou argumentos detalhados de que sistemas com elétrons interagentes submetidos a potenciais aleatórios estáticos podem apresentar uma transição de fase metal-isolante, de forma análoga ao caso não interagente.

Enquanto a localização de Anderson é bem entendida, a ação combinada da desordem e das interações entre os constituintes do sistema produz novos efeitos, o que faz desse um campo de pesquisa atual.

A localização de Anderson é uma localização no espaço real, porém a localização de muitos corpos, como argumentada por Basko, é uma localização de Anderson no espaço de Fock [4, 8, 9, 19, 121]. O termo MBL também é associado à localização no espaço de Hilbert [20, 24, 26, 27, 29], no espaço das configurações [21, 26], e no espaço de quasi-partículas [25].

A fase MBL foi observada experimentalmente em um gás de férmions interagentes em uma

cadeia ótica quasi-aleatória 1-dimensional [17], na cadeia de Ising com interações de longo alcance e desordens aleatórias programáveis [58], para bósons em uma rede ótica 2-dimensional desordenada [59], e em outros experimentos [60–64].

### 3.1.2 Definição da fase MBL

Como vimos, o termo localização de muitos corpos possui vários significados. A seguir, vamos dar a definição que iremos usar em toda essa tese.

**Definição 3** *Localização de muitos corpos - MBL: é a fase na qual os auto-estados de sistemas quânticos interagentes e fechados estão localizados no espaço de Hilbert, devido a presença de desordem estática.*

Para entendermos melhor esse fenômeno, vamos definir algumas quantidades. Vamos escrever um auto-estado particular de  $H$  na base computacional  $\{|a\rangle\}$ , assim ficamos com  $|n\rangle = \sum_a c_a^{(n)} |a\rangle$ . Podemos definir o conjunto  $\mathcal{C} = \{c_1^{(n)}, c_2^{(n)}, \dots, c_L^{(n)}\}$  de todas as amplitudes de probabilidade de  $|n\rangle$  na base computacional. O número de elementos não-nulos que pertencem ao conjunto  $\mathcal{C}$  será denotado por  $\xi_{\mathcal{C}}$ . Com os rótulos que usamos para os elementos de  $\mathcal{C}$ , temos que o número total de elementos desse conjunto é  $L$ .

Com as definições dadas acima, podemos afirmar que se o auto-estado  $|n\rangle$  está na fase térmica, então, de maneira geral,  $\xi_{\mathcal{C}} \approx L$ , ou seja, o auto-estado é estendido em toda base computacional, apresentando uma probabilidade não-nula de estar em qualquer uma das configurações possíveis. Já na fase MBL temos que  $\xi_{\mathcal{C}} \ll L$ , e assim o auto-estado é localizado em poucos vetores da base computacional, e portanto, de todas as configurações possíveis, apenas poucas, de fato, possuem probabilidade não-nula de ocorrer. Essa é a natureza da localização definida acima.

Como argumentado nas Refs. [11, 18, 19, 24], os estados que pertencem a essa fase MBL não termalizam. Na fase MBL, o sistema como um todo não serve de banho térmico para qualquer um de seus subsistemas. Podemos entender isso separando o sistema fechado em dois subsistemas  $\mathcal{S}_1$  e  $\mathcal{S}_2$ , independentemente do tamanhos de tais subsistemas, na fase localizada,  $\mathcal{S}_1$  não se comporta como banho térmico para  $\mathcal{S}_2$ , e vice-versa. Com tudo isso, fica claro que a

fase MBL, bem como a transição térmico-MBL, não pode ser descrita pela mecânica estatística quântica de equilíbrio.

Vamos agora comparar a transição térmico-MBL com a transição de fase quântica padrão. Similarmente ao que ocorre numa transição de fase quântica padrão [122], a transição térmico-MBL é uma mudança nas propriedades dos auto-estados do hamiltoniano. Mas diferentemente daquela, a transição térmico-MBL ocorre mesmo a temperaturas não-nulas (mesmo infinita), e pode ser entendida com uma transição dinâmica, invisível para a mecânica estatística de equilíbrio [19, 20, 24, 26].

Nesse ponto, valem a pena dois esclarecimentos sobre os significados de transição à temperatura infinita e transição dinâmica. O primeiro termo refere-se ao fato de, por simplicidade [24], vários autores calcularem médias de grandezas sobre todos os auto-estados com igual probabilidade, algo similar ao que temos no ensemble canônico a temperaturas muito elevadas, porém aqui o sistema é fechado, não existe banho térmico. Em relação à transição dinâmica, tal termo refere-se ao fato da transição ser em todos auto-estados dos hamiltoniano, e assim, influenciar diretamente a dinâmica de um estado qualquer pertencente a esse espaço de Hilbert [34].

Por fim, temos que ressaltar que existem trabalhos que discutem a localização de muitos corpos num sentido mais geral de que definimos e analisaremos. Em várias trabalhos analisa-se a fase MBL para sistemas abertos [42, 123–127]. Existem também trabalhos que reportam a localização de muitos corpos em modelos sem desordem [33, 39, 128].

### 3.1.3 Caos nas fases térmica e MBL

Os conceitos de termalização, localização, integrabilidade e caos estão fortemente correlacionados [12, 13, 23]. Assim, vamos discutir os dois últimos conceitos, relacionando-os entre si e com a transição térmico-MBL.

Classicamente, diz-se que um sistema apresenta dinâmica caótica se sua dinâmica no espaço de fase é fortemente (exponencialmente) sensível a pequenas perturbações ou as suas condições iniciais. De maneira geral, a dinâmica caótica ocorre em sistemas cujo número de integrais do movimento  $n_{im}$  é menor do que o número de graus de liberdade  $n_{gl}$  do mesmo [129]. Existem sistemas que não apresentam esse tipo de dinâmica, esses são chamados de sistemas in-

tegráveis [130]. Nesse caso  $n_{im} = n_{gl} = n$ , e a trajetória no espaço de fase é restrita a um torus  $n$ -dimensional, e assim não existe dinâmica caótica.

As versões quânticas de tais conceitos não são imediatas. O principal motivo para isso é que a equação de Schrödinger é linear, e portanto não fornece soluções dinâmicas caóticas como ocorre na mecânica clássica. Além disso, na mecânica quântica, não existe o conceito de trajetória, já que, pelo princípio de incerteza de Heisenberg, não podemos determinar, simultaneamente, a posição e o momento do sistema quântico com precisão absoluta. Tais características inviabilizam a generalização quântica imediata do caos e da integrabilidade.

Existem várias maneiras de se definir integrabilidade para sistemas quânticos [131, 132]. Nesse trabalho, o termo integrabilidade será usado para sistemas que são resolvidos ou usando-se transformação de Jordan-Wigner, ou através do *ansatz* de Bethe.

Já a versão quântica do caos é dada através de propriedades dos auto-valores e auto-vetores do sistema quântico, e indicam se o sistema, no limite clássico, é caótico. Assim, a versão quântica de caos está baseada em propriedades que sistemas clássicos caóticos apresentam.

Assumindo isso, as versões quânticas da integrabilidade e de caos são claramente distinguidas através da estatística dos níveis de energia quânticos [133, 134]. Nessa análise, a distribuição dos espaçamentos dos níveis de energia é particularmente interessante. Sistemas integráveis tipicamente exibem uma distribuição tipo Poisson [12, 13, 23].

$$P(s) = e^{-s^2} , \quad (3.2)$$

em que  $s$  é o espaçamento entre os níveis vizinhos. Enquanto que sistemas caóticos que exibem invariância por reversão temporal, possuem distribuição de espaçamento de níveis de energia dada pela distribuição de Wigner-Dyson

$$P(s) = \frac{\pi s}{2} e^{-\frac{\pi s^2}{4}} . \quad (3.3)$$

Devemos ressaltar que existe uma forte conexão entre o caos e o ETH, na realidade o caos quântico é a justificativa física do ETH, pois no caos os auto-estados do hamiltoniano possuem amplitudes aleatórias. Assim, os valores esperados de um observável serão os mesmos para qualquer auto-estado considerado [67].

Vamos agora relacionar tais conceitos com as fases térmica e MBL. Como dado em Def. 3, a transição de fase térmico-MBL ocorre pela variação da intensidade da desordem em um dado sistema. Assumindo que na ausência de desordem um dado sistema é integrável, tal sistema possuirá uma distribuição de níveis de energia do tipo Poisson, Eq. (3.2). Quando “ligamos” a desordem e aumentamos sua intensidade, o sistema sofre uma transição integrável-caótico, e sua distribuição de níveis de energia passa a ser tipo Wigner-Dyson, dado pela Eq. (3.3). Aumentando-se ainda mais a intensidade da desordem, ocorre a transição térmico-MBL, e o sistema torna-se integrável novamente. Tal fato será mais explorado na Sec. 3.4.2.

## 3.2 Emaranhamento nas fases térmica e MBL

Uma das abordagens mais utilizadas para se analisar as fases térmica e MBL é baseada no comportamento da entropia de emaranhamento bipartite, dado pela Eq. (2.1), de estados puros que pertencem a essas fases [28, 29, 31, 33, 34, 46, 135, 136].

Isso deve-se ao fato dessa medida de emaranhamento possuir comportamentos bastante diferentes nessas duas fases. Na fase térmica, o emaranhamento obedece a uma lei de volume, sendo extensivo,  $S_E \propto N^d$ , em que  $N$  é o número de constituintes do subsistema e  $d$  é a dimensão do mesmo. Isso nos informa que, nessa fase, existe emaranhamento entre várias partes do sistema. Assim, a entropia de emaranhamento entre um subsistema finito e o resto do sistema é, para  $N \rightarrow \infty$ , a entropia de equilíbrio térmico do subsistema. Enquanto que na fase MBL tal medida obedece a uma lei de área  $S_E \propto N^{d-1}$ , não sendo extensivo [11]. Nessa fase o emaranhamento está localizado a partes pequenas e vizinhas do sistema.

A dinâmica da entropia de emaranhamento também é influenciada pelas fases térmica e localizada. Para um estado inicialmente não-emaranhado, temos que na fase térmica o emaranhamento bipartite aumenta como uma lei de potência, e na fase MBL, tal quantidade aumenta logaritmicamente para cadeias de spin-1/2. Discutiremos mais sobre a influência da fase MBL na dinâmica de correlações no Cap. 4.

### 3.3 Modelo e abordagem

Analisamos a cadeia isotrópica de Heisenberg de spin-1/2, fechada, com  $N$  sítios em um campo magnético externo, aleatório e estático na direção  $z$ . O hamiltoniano de tal cadeia é escrito como

$$H = \sum_{j=1}^N \left[ J \left( S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + S_j^z S_{j+1}^z \right) + h_j S_j^z \right], \quad (3.4)$$

em que  $\hbar = 1$  e  $S_j^{x,y,z} = \sigma_j^{x,y,z}/2$ , com  $\sigma_j^{x,y,z}$  denotando as matrizes de Pauli no sítio  $j$ . Os termos  $h_j$  são números aleatórios sorteados de uma distribuição uniforme no intervalo  $[-h, h]$  e  $J$  é a interação de troca. Fixaremos  $J = 1$  daqui pra frente.

Esse modelo conserva a magnetização total na direção  $z$ ,  $\mathcal{S}^z = \sum_j \mathcal{S}_j^z$ , ou seja,  $[H, \mathcal{S}^z] = 0$ . Assim, podemos separar o hamiltoniano em setores de magnetização, e analisá-los separadamente. Escolhemos analisar o maior sub-espço de todos,  $\mathcal{S}_{tot}^z = 0$ , no qual a localização é mais difícil de ocorrer.

O hamiltoniano (3.4) possui dois limites integráveis, um ocorre quando  $h = 0$ , e o outro quando  $h > h_c$ , em que  $h_c$  é o ponto crítico da transição térmico-MBL. Estima-se que tal ponto é  $h_c \approx 3,8$  [11, 37, 41]. No intervalo  $0 < h < h_c$ , o sistema apresenta repulsão de níveis e uma distribuição de espaçamento de níveis que varia de uma distribuição de Wigner-Dison, típica de sistemas caóticos, para uma distribuição de Poisson, a qual é usual em modelos integráveis [12].

A seguir, explicitamos o passo-a-passo que usamos para determinar o ponto crítico da transição nesse modelo:

- (i) Fixamos um valor de  $h$  e realizamos várias configurações de desordem;
- (ii) Para cada configuração de desordem, diagonalizamos exatamente o sub-espço  $\mathcal{S}_{tot}^z = 0$  do hamiltoniano, e obtemos todos os auto-estados  $\{|n\rangle\}$ , com isso, construímos o seguinte estado puro de todo sistema  $\rho_n = |n\rangle\langle n|$ ;
- (iii) Para calcularmos o emaranhamento global tomamos o traço de todos os spins da cadeia, com exceção de um,  $\rho_{1,n}^R$ . Para as correlações geométricas deixamos dois spins vizinhos após tomarmos o traço parcial  $\rho_{2,n}^R$ , matematicamente

$$\rho_{2,n}^R = \text{tr}_{N-2}(\rho_n) \quad \rho_{1,n}^R = \text{tr}_{N-1}(\rho_n); \quad (3.5)$$

- (iv) Usamos as equações (2.8) e (2.13) - (2.15), respectivamente, para calcular o emaranhamento global e as correlações geométricas para um dado auto-estado de uma realização específica de desordem;
- (v) Depois, fazemos a média dessas quantidades em 10% dos auto-estados pertencentes ao meio do espectro;
- (vi) Para garantir que nossos resultados não dependem de uma realização específica de desordem, fizemos médias para várias configurações de desordem, dependendo do tamanho da cadeia, para  $N = 10, 12$  e  $14$  tomamos médias em  $10^4$ , e para  $N = 16$  usamos  $10^3$  configurações.
- (vii) Variando-se  $h$ , obtemos os valores médios das correlações como função de  $h$ .

No procedimento acima usamos o termo configuração de desordem para nos referir a um conjunto particular dos números aleatórios. Nesse caso, uma configuração de desordem é o conjunto dos valores dos campos magnéticos externos em cada sítio. Nossa abordagem baseia-se em várias configurações de desordem, isso para garantir que o fenômeno da localização é algo geral, ou seja, não depende de uma configuração específica de desordem.

Além da média em várias configurações de desordem, na abordagem acima mencionamos uma média sobre auto-estados, 10% dos auto-estados que pertencem ao meio do espectro do sub-espço  $\mathcal{S}_{tot}^z = 0$ . Tal média é realizada para garantir que a localização ocorre em vários auto-estados. Porém não é necessário realizar uma média sobre uma grande parte dos auto-estados, pois, como mostrado na Ref. [37], os auto-estados pertencentes ao meio do espectro possuem os maiores pontos críticos. Assim, nosso resultado fornece o ponto crítico em que todos os auto-estados estão na fase localizada.

## 3.4 Resultados

### 3.4.1 Entropia de emaranhamento

Na Fig. 3.1 podemos ver o gráfico do comportamento médio da entropia de emaranhamento entre as duas metades da cadeia para vários tamanhos da cadeia. Como esse resultado já era conhecido, tal gráfico é apenas uma exemplificação do comportamento da entropia nas fases térmica e MBL, como discutido em Sec. 3.2. Assim, tal resultado foi obtido de maneira um pouco mais simples do que os outros resultados. Não usamos simetria do hamiltoniano, e fizemos apenas médias sobre  $2 \times 10^3$  realizações de desordem, fora tais pequenas simplificações, a abordagem foi a mesma descrita na seção anterior.

Na fase térmica,  $h < 3,8$ , a entropia de emaranhamento é proporcional ao número de spins do subsistema, obedecendo à lei de volume  $S_E \propto (N/2)^1$ , e na fase MBL,  $h > 3,8$ , a entropia de emaranhamento é constante, independentemente do tamanho da cadeia, como dado pela lei de área  $S_E \propto (N/2)^0 = cte$ .

No inset da Fig. 3.1 mostramos a média da variância da entropia de emaranhamento. Segundo Ref. [34], no limite termodinâmico, essa quantidade vai a zero para regiões na fase térmica e na fase MBL, porém diverge no ponto crítico. Tal divergência pode ser entendida da seguinte forma. Próximo do ponto crítico  $h_c$ , cada realização de desordem pode deixar o estado na fase térmica ou na fase MBL, e assim, a entropia de emaranhamento assumirá valores bastante diferentes, dependendo da configuração de desordem, o que causa um valor alto para variância de tal grandeza. Assim, o ponto crítico da transição é dado pelo ponto  $h$  em que a variância, no limite termodinâmico, diverge [34].

Nossos resultados, mostrados no inset da Fig. 3.1, são para cadeias finitas, assim a divergência mostra-se apenas como um valor máximo nas curvas nos pontos próximos ao ponto crítico.

### 3.4.2 Emaranhamento global

Vamos agora usar o emaranhamento global, dado por (2.8), para determinar o ponto crítico da transição térmico-MBL no sistema (3.4), usando a abordagem descrita na Sec. 3.3. Uma vez que estamos usando condições de contorno periódicas e várias realizações de desordem, todos os

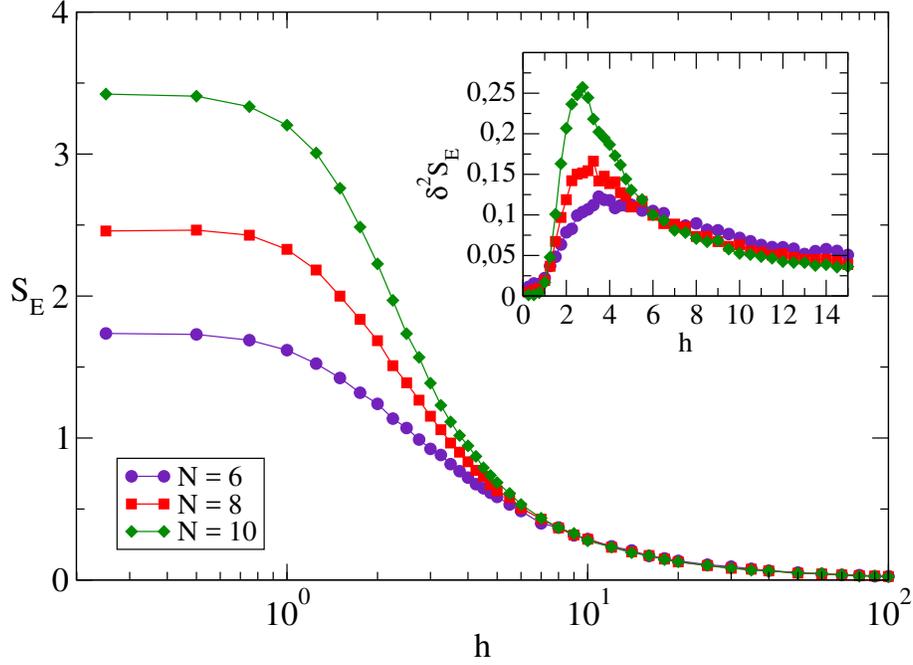


Figura 3.1: Gráfico principal: Média da entropia de emaranhamento  $S_E$  sobre 10% dos auto-estados do meio de espectro e sobre  $2 \times 10^3$  realizações de desordem como uma função da intensidade da desordem  $h$ . No inset temos a variância associada às realizações de desordem de tal grandeza  $\delta^2 S_E$  também como função de  $h$ .

sítios são equivalentes. Nossos resultados estão presentes na Fig.3.2.

Percebe-se que conforme  $h$  aumenta, e o sistema aproxima-se da fase MBL, o valor médio do emaranhamento global diminui. Isso ocorre porque o emaranhamento torna-se localizado em subsistemas menores, como em pares de spins, como mostrado em [44].

No inset da Fig. 3.2, evidenciamos o comportamento não-monotônico de  $G_E$  para valores pequenos de  $h$ . O valor máximo,  $G_E = 1$ , ocorre no limite  $h = 0$ , como primeiramente mostrado em [96]. Para valores pequenos de  $h$ , a partir de zero,  $G_E$  forma um “poço”, antes de atingir o regime caótico novamente. Tal comportamento é análogo ao que ocorre para quantidades medidas na transição integrável-caos [56], esse “poço” é deslocado para valores menores de  $h$  conforme o tamanho do sistema aumenta. Isso sugere que, além de identificar o ponto crítico na transição térmico-MBL,  $G_E$  também pode detectar a transição integrável-caos.

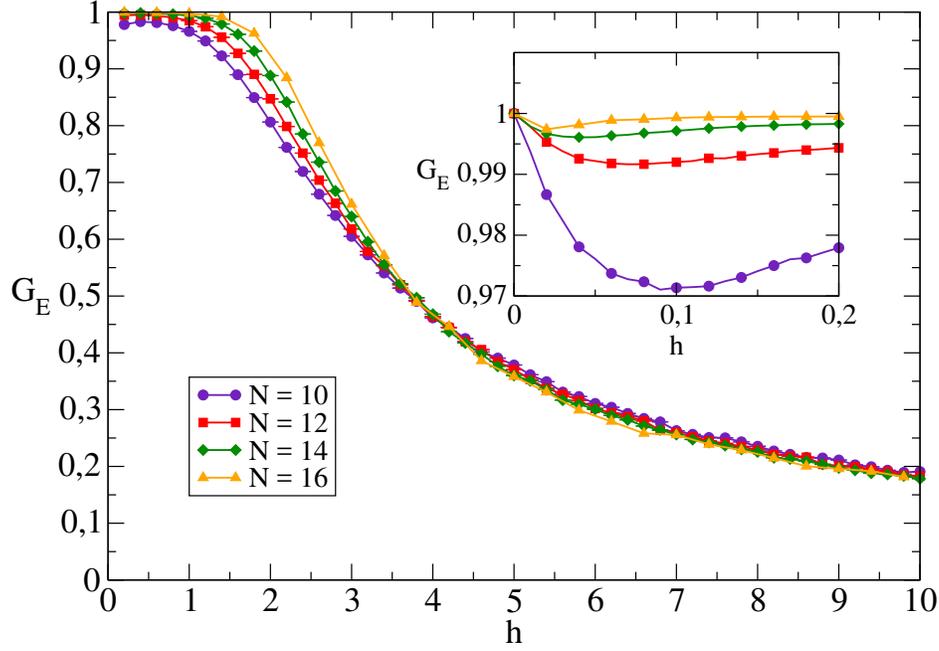


Figura 3.2: Gráfico principal: Média do emaranhamento global  $G_E$  como uma função da intensidade da desordem  $h$ . O inset evidencia o comportamento não-monotônico de  $G_E$  para valores pequenos de  $h$ .

O cruzamento das curvas no gráfico principal da Fig. 3.2 indica o valor aproximado do ponto crítico, o qual é obtido precisamente via *finite-size scaling*, como pode ser visto no gráfico principal da Fig. 3.3. Isso é feito através da escolha de escala

$$G_E = \Phi [N^a(h - h_c)], \quad (3.6)$$

em que  $\Phi$  é uma função não conhecida e, na prática, pode ser determinada pelo método da minimização  $\chi^2$ . Encontramos que  $a = 0,5$  e  $h_c = 3,8 \pm 0,2$ . Esse valor de ponto crítico está em perfeito acordo com o que é encontrado na literatura [11, 37, 41]. É muito interessante que uma quantidade tão simples, a qual corresponde a entropia de um único spin, pode determinar tão bem o ponto crítico.

No inset da Fig. 3.3 mostramos o comportamento da média de  $G_E$  na fase localizada na escala logarítmica. Observe que existe um decaimento como lei de potência,  $G_E \propto h^{-\alpha}$ , em que o expoente é dado aproximadamente por  $\alpha \approx 1$ . Tal comportamento está muito próximo do que

o que ocorre com a informação mútua multipartite, como discutido em Ref. [41].

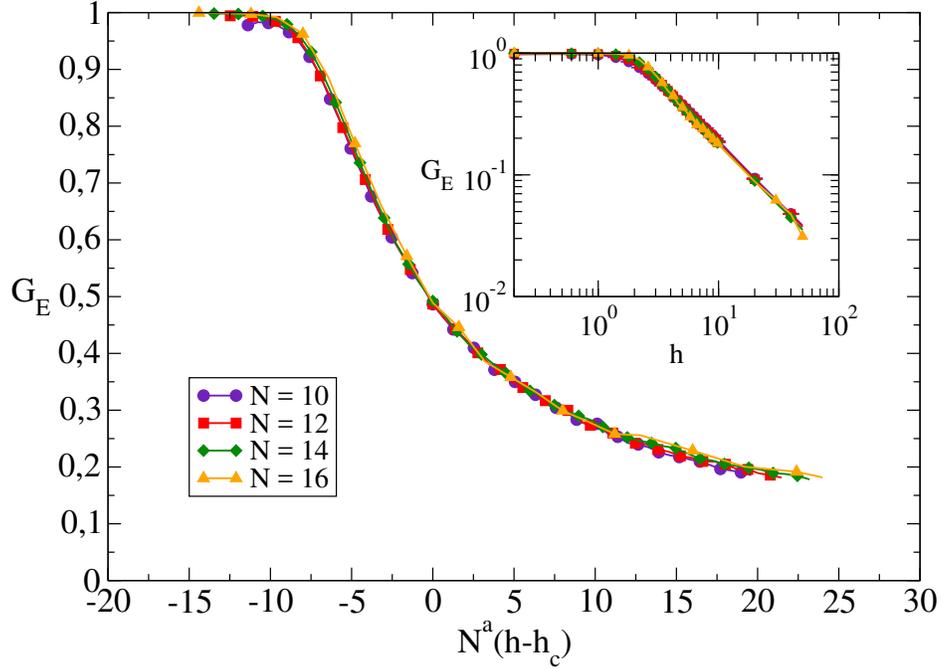


Figura 3.3: Gráfico principal: *finite-size scaling* dos dados mostrados na Fig. 3.2, com  $a = 0,5$  e  $h_c = 3,8 \pm 0,2$ . No inset temos a lei de decaimento tipo potência de  $G_E$  na fase localizada.

### 3.4.3 Correlações geométricas

A média da discórdia quântica geométrica  $Q_G$  entre dois spins vizinhos é mostrada no gráfico principal da Fig. 3.4 como uma função de  $h$  para diferentes tamanhos de cadeias. As correlações clássica e total geométricas,  $C_G$  e  $T_G$ , são mostradas nas Figs. 3.5 (a) e 3.5 (b). As curvas para essas três correlações geométricas exibem um padrão similar. Elas são não-monotônicas e generalizam o comportamento do emaranhamento de pares, como medido pela concorrência [12,44]. Identificamos as seguintes três regiões que descreveremos a seguir.

Na fase ergódica,  $0 < h < 1$ , as correlações estão espalhadas no sistema de uma forma multipartite [13]. Como consequência, existe uma baixa concentração de correlação entre pares individuais de spins vizinhos e explica os baixos valores de  $Q_G$ ,  $C_G$ , e  $T_G$ .

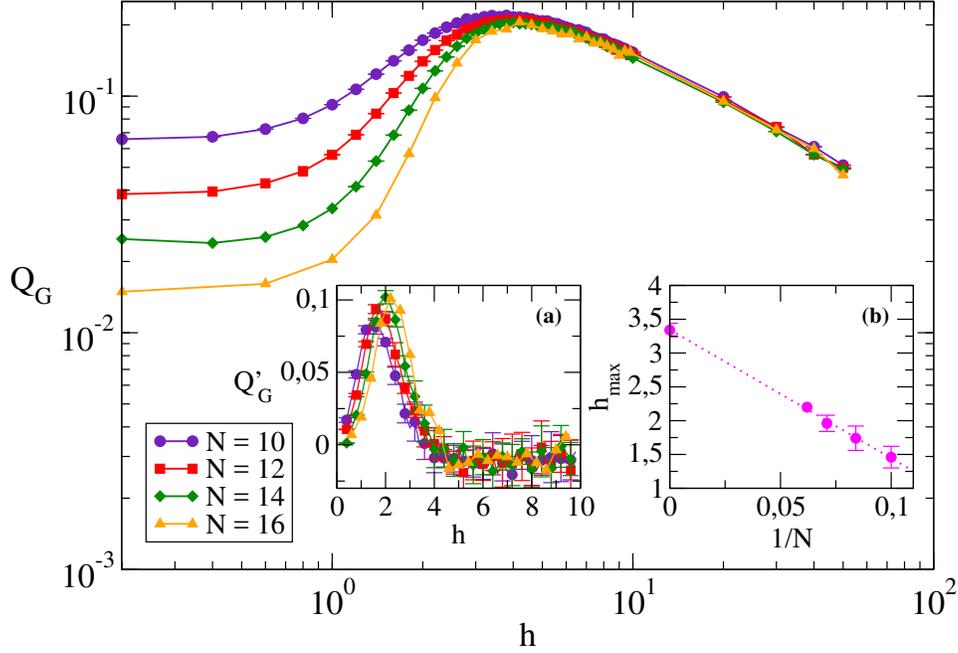


Figura 3.4: Gráfico principal: média da discórdia geométrica  $Q_G$  como função da intensidades da desordem  $h$  na escala logarítmica. Inset (a): primeiras derivadas  $Q'_G$  da discórdia geométrica em relação a  $h$ . Inset (b): o limite termodinâmico do máximo de  $Q'_G$ , o que nos fornece  $h_c = 3,34 \pm 0,03$ .

Conforme a intensidade da desordem aumenta além da região caótica,  $h > 1$ , percebemos que  $Q_G$ ,  $C_G$ , e  $T_G$  aumentam até um valor  $h$  que depende do comprimento da cadeia. Na vizinhança da transição térmico-MBL, correlações são mais confinadas entre pares individuais de spins vizinhos, fato que gera maiores valores para as correlações geométricas analisadas.

Depois da transição térmico-MBL, maiores aumentos da intensidade da desordem, diminuem assintoticamente as medidas de correlação devido à redução do papel efetivo da interação de troca  $J$ . Como ocorre no emaranhamento global, as correlações  $Q_G$ ,  $C_G$  e  $T_G$  exibem uma lei de decaimento de potência  $\propto h^{-\beta}$  na fase localizada, com uma constante universal aproximadamente dada por  $\beta = 0,7$ . Para um sistema finito, correlações de pares tendem a se anular no limite de intensidade de desordem infinita.

O comportamento qualitativo das correlações geométricas discutidas acima já sugerem a

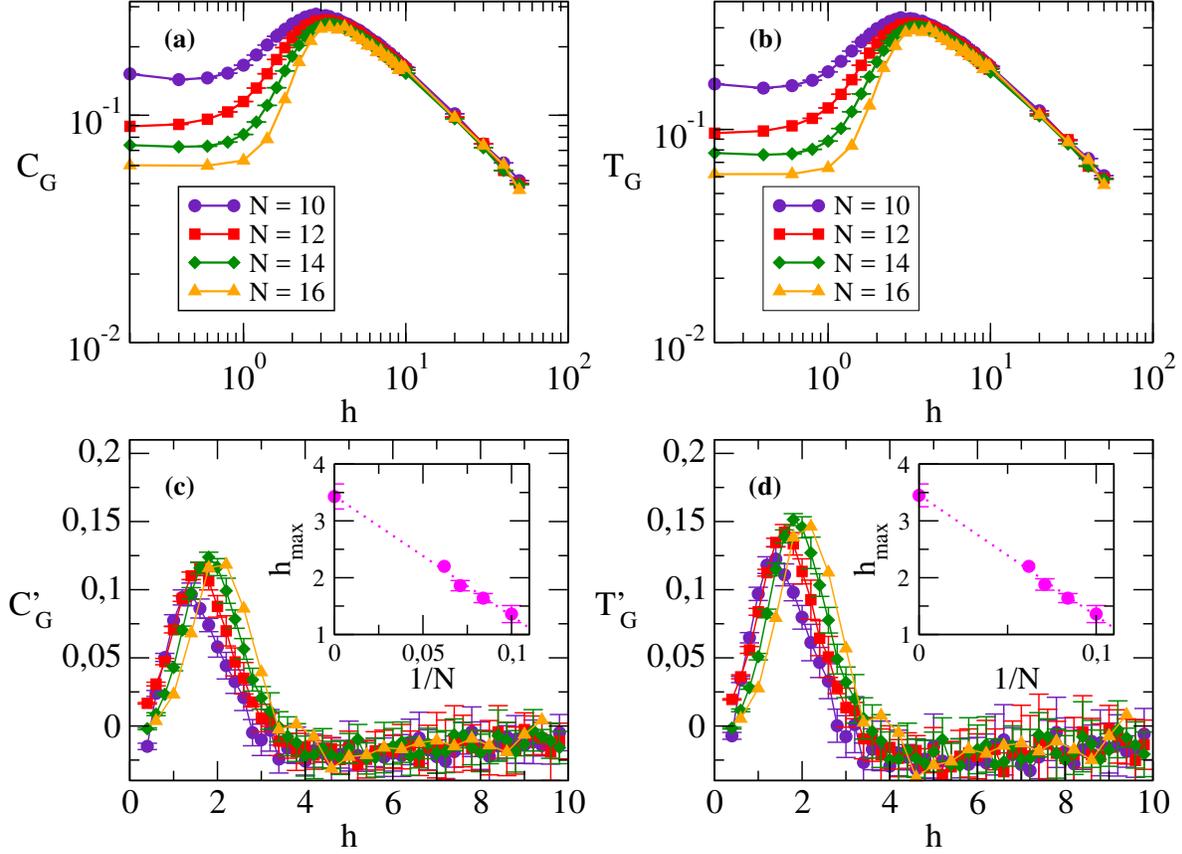


Figura 3.5: Média das correlações geométricas clássica  $C_G$  (a) e total  $T_G$  (b) como funções de  $h$  na escala logarítmica, assim como suas derivadas,  $C'_G$  (c) e  $T'_G$  (d), em relação a  $h$ . Os insets em (c) e (d) mostram o limite termodinâmico do valor máximo de  $C'_G$  e  $T'_G$ , respectivamente, fornecendo  $h_c = 3,43 \pm 0,06$  para  $C_G$  e  $h_c = 3,45 \pm 0,06$  para  $T_G$ .

existência de uma fase localizada. A determinação do ponto crítico pode ser feita analisando-se a primeira derivada dessas correlações em relação à intensidade da desordem  $h$ . Essa abordagem é inspirada no procedimento usado em análises de transições de fase quânticas ordinárias, seja via emaranhamento de pares [86,89] ou via dicórdia quântica de pares [90,91].

Como ilustrado no inset (a) da Fig. 3.4 e nas Figs. 3.5 (c) e 3.5 (d), as três medidas de correlação geométrica exibem um máximo em suas derivadas, o qual ocorre no valor de  $h$  denotado por  $h_{\max}$ . O máximo dos valores das derivadas das medidas de correlação obedece um decaimento linear com  $1/N$ , e assim, o ponto crítico pode ser obtido pela extrapolação  $h_{\max}$

para  $N \rightarrow \infty$ .

A análise de escala de  $h_{\max}$ , mostrada no inset (b) da Fig. 3.4 e nos insets das Figs. 3.5 (c) e 3.5 (d), nos permite concluir que  $h_c \in [3, 4]$ , o qual está dentro do intervalo de valores críticos encontrado na literatura.

A Tab. 3.1 fornece os valores dos pontos críticos obtidos a partir de cada uma das medidas de correlação geométricas e também a partir do emaranhamento global  $G_E$ . Note que os valores são compatíveis entre si, o que indica que a ideia de deslocalização das correlações na fase térmica, em contraste com a ideia de concentração de correlações na vizinhança do ponto crítico da transição térmico-MBL são válidas para correlações quântica, clássica e total entre pares de spins.

Medida de correlação	$h_c$
$G_E$	$3,8 \pm 0,2$
$Q_G$	$3,34 \pm 0,03$
$C_G$	$3,43 \pm 0,06$
$T_G$	$3,45 \pm 0,06$

Tabela 3.1: Ponto crítico obtido via emaranhamento global em comparação com correlações geométricas quântica, clássica e total. As barras de erro levam em consideração apenas flutuações com respeito ao número de realizações de desordem.

## 3.5 Discussão

Agora vamos discutir o que obtemos para o emaranhamento global e para as correlações geométricas. Nós usamos essas medidas de correlação para descrever a transição térmico-MBL e determinar seu ponto crítico. Tais medidas são medidas de correlações de pares que envolvem funções de correlação de um ou dois pontos. Os resultados convergem levando-se em consideração apenas uma pequena fração dos auto-estados do hamiltoniano. Nossas principais colaborações são descritas a seguir.

- (i) A análise via *finite-size scaling* do emaranhamento global nos forneceu o ponto crítico  $h_c = 3,8 \pm 0,2$ , o que coincide com os resultados encontrados na literatura. Essa quantidade, como calculada aqui, é a entropia linear de um único spin da cadeia. É impressionante que uma função de correlação de um único spin pode determinar tão efetivamente o ponto crítico da transição;
- (ii) As correlações geométricas entre apenas dois spins vizinhos fornecem um ponto crítico no intervalo  $h_c \in [3, 4]$ , o que está dentro de valores aceitáveis. O procedimento usado, nesse caso, assemelha-se ao adotado na análise de transições de fase quânticas ordinárias, em que o ponto crítico é revelado pela derivada das medidas de correlação. As derivadas das correlações quântica, clássica e total seguem uma lei de escala linear universal, isto é, as derivadas são funções lineares de  $1/N$ . O ponto crítico é obtido via extrapolação para o limite termodinâmico.

Quando comparada com medidas de emaranhamento de pares, como concorrência, a discórdia quântica oferece algumas vantagens. Suas propriedades robustas com relação à temperatura [137] e à distância entre os spins tornam a discórdia quântica uma poderosa testemunha da criticalidade [138].

# Capítulo 4

## Dinâmica das correlações nas fases térmica e MBL

Nesse capítulo, iremos analisar como as fases térmica e MBL influenciam na dinâmica da entropia de emaranhamento, Eq. (2.1), do emaranhamento global, Eq. (2.8), e da discórdia quântica geométrica, Eq. (2.13). Já existem bastantes trabalhos na literatura sobre a dinâmica da entropia de emaranhamento nas fases mencionadas, analogamente ao que mostraremos aqui [20,29,31,46]. Porém, a análise envolvendo as outras duas correlações ainda não foi abordada, até o presente momento, na literatura, e assim existe a possibilidade de encontrarmos comportamentos diferentes aos observados para o emaranhamento, principalmente em relação à dinâmica da discórdia quântica geométrica, devido sua robustez, como mencionado anteriormente, em relação à temperatura [137] e à distância [138].

Veremos que, de maneira geral, as diferentes fases afetam a dinâmica de tais correlações, como ocorre com outras correlações [45,53], e outras quantidades também [35,36,40,48,54].

Iniciaremos discutindo aspectos gerais da dinâmica de correlações nas fases térmica e localizada. Depois explicitaremos o modelo e o método escolhidos, e, a título de esclarecimento, discutiremos rapidamente a transformação de Jordan-Wigner no modelo analisado. Em seguida detalharemos a dinâmica utilizada e, encerraremos com os resultados obtidos e a discussão.

## 4.1 Dinâmica na fase localizada

Como mencionado na Introdução dessa tese, tanto a termalização quanto a localização, são resultados possíveis da dinâmica de sistemas quânticos fechados [10]. Como já sabemos, tais resultados são bastante distintos. Na termalização de um estado quântico a informação local de qualquer parte do sistema, independentemente do estado inicial, é rapidamente espalhada para o sistema como um todo. Na localização, a dinâmica consegue manter uma “memória” local do estado inicial, mesmo no limite de tempos longos [17].

Na fase térmica, como dado pelo ETH, o valor esperado de qualquer observável local  $\langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle$  equilibrará, no limite de tempos longos, no seu valor esperado dado pelo ensemble microcanônico. Assim, a memória do estado inicial é perdida, a dinâmica apaga toda informação inicial. Por exemplo, consideremos o estado inicial dado por  $|\psi(t=0)\rangle = |\uparrow\uparrow\dots\uparrow\rangle$ , cuja magnetização em qualquer sítio é  $m_j^z = 0,5$ . Com a evolução, para tempos longos, teremos  $\langle \psi(t \rightarrow \infty) | m_j^z | \psi(t \rightarrow \infty) \rangle = 0$ , o qual é o seu valor esperado termodinâmico [139].

Já na fase MBL, como mencionado, o estado evoluído consegue manter a memória do estado inicial. No exemplo acima teríamos  $\langle \psi(t \rightarrow \infty) | m_j^z | \psi(t \rightarrow \infty) \rangle = \tilde{m} > 0$ . Ou seja, de maneira geral, os observáveis locais equilibram, para tempos longos, mas não em seu valor determinado pelo ensemble microcanônico [139].

Na literatura, de maneira geral, os trabalhos sobre dinâmica nas fases localizadas assumem que o hamiltoniano do sistema quântico fechado é independente do tempo. Assim, métodos de diagonalização exata funcionam muito bem para a simulação da evolução de estados iniciais  $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$  [29, 31, 35, 36, 47]. Porém, uma vez que o espaço de Hilbert cresce exponencialmente com o tamanho do sistema, apenas tamanhos pequenos podem ser considerados, usualmente em torno de  $N = 16$  numa cadeia de spin-1/2 [40].

Na Ref. [20] mostrou-se que o método conhecido como *time-dependent density-matrix renormalization group* - tDMRG, é bastante eficiente na análise da dinâmica da entropia de emaranhamento em sistemas tipo cadeia de Heisenberg, o que permitiu a análise de cadeias de tamanho na ordem de centenas de sítios,  $N = 500$ . Na Ref. [45], o método tDMRG foi usado para se calcular a concorrência, entropia entre dois sítios vizinhos, o que lhe permitiu simular cadeias de tamanho  $N = 72$  sítios num modelo de Bose-Hubbard na presença de um potencial

quasi-periódico. Esse método mostra-se eficiente na descrição de grandezas na fase MBL devido ao fato de, nessa fase, a entropia de emaranhamento bipartite crescer logicamente com o tempo.

Uma abordagem muito utilizada na dinâmica em sistemas quânticos fechados é o *quench* [25, 35, 40, 43, 45, 46, 50, 52], o qual é uma mudança abrupta em um dado instante de um dos parâmetros controlados do hamiltoniano. Tal situação é matematicamente dada por [25]

$$H(t) = H_0[g(t)] + H_{in} , \quad (4.1)$$

em que

$$g(t) = \begin{cases} g_0 & \text{para } t \leq 0 \\ g & \text{para } t > 0. \end{cases}$$

Podemos exemplificar isso considerando que  $H_0[g(t \leq 0)] = 0$ . Tal sistema é preparado, em  $t = 0$ , em um estado puro  $|\psi(0)\rangle$  que é auto-estado de  $H_{in}$ . Para  $t > 0$  o sistema evolui unitariamente de acordo com a dinâmica dada pelo hamiltoniano  $H(t) \neq H_0$ . Essa é a configuração mais simples para se estudar a relaxação de um sistema de muitos corpos [140].

A dinâmica pós-*quench*, a partir de um estado produto, mostra que na fase térmica a informação é transferida rapidamente entre as partes do sistema, o que possibilita a termalização do sistema para longos tempos. Essa rápida transferência de informação quântica é demonstrada pelo rápido crescimento da entropia de emaranhamento bipartite para o estado evoluído  $\rho(t)$ , tal difusão de informação é balística,  $S_E(t) \propto t$  [141]. Na fase MBL a transferência de emaranhamento existe, porém a entropia de emaranhamento de uma metade da cadeia com a outra cresce logicamente com o tempo  $S_E(t) \propto \log(t)$  [11].

## 4.2 Modelo e abordagem

O modelo que usaremos para estudar a influência das fases na dinâmica de correlações será praticamente o mesmo do Cap. 3, porém, agora vamos inserir uma anisotropia  $\Delta$  na direção  $z$ , assim, ficamos com

$$H = \sum_{j=1}^N \left[ J \left( S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y \right) + \Delta S_j^z S_{j+1}^z + h_j S_j^z \right], \quad (4.2)$$

assim, temos a cadeia anisotrópica de Heisenberg de spin-1/2, fechada, com  $N$  sítios e campo magnético externo aleatório e estático na direção  $z$ . Esse modelo também conserva a magnetização total na direção  $z$ ,  $[H, \mathcal{S}^z] = 0$ , e assim, mais uma vez, escolhemos analisar o maior sub-espço de todos,  $\mathcal{S}^z = 0$ .

Como a abordagem não é exatamente a mesma usada anteriormente, vamos explicitar o passo-a-passo usado para se analisar a dinâmica das correlações:

- (i) Para cada instante  $t$  realizamos várias configurações de desordem;
- (ii) Para cada realização de desordem, construímos e diagonalizamos exatamente o sub-espço  $\mathcal{S}_{tot}^z = 0$  do hamiltoniano (4.2);
- (iii) Encontramos o operador densidade evoluído  $\rho(t)$  a partir de um estado puro e produto inicial  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$  da seguinte forma

$$\begin{aligned}
\rho(t) &= U(t)|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|U^\dagger(t) \\
&= e^{-iHt}|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|e^{iHt} \\
&= \sum_{n,m} e^{-iHt}|n\rangle\langle n|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|m\rangle\langle m|e^{iHt} \\
&= \sum_{n,m} e^{-i(E_n-E_m)t}\langle n|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|m\rangle|n\rangle\langle m| \\
&= \sum_{n,m} \sum_{\alpha,\beta} e^{-i(E_n-E_m)t}\langle n|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|m\rangle\langle\alpha|n\rangle\langle m|\beta\rangle|\alpha\rangle\langle\beta|, \quad (4.3)
\end{aligned}$$

em que  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ , e  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  são vetores da base computacional, assim como  $|\psi(0)\rangle$ . A inserção da base computacional é necessária pois com a diagonalização numérica obtemos os coeficientes  $\langle n|\psi(0)\rangle, \langle\psi(0)|m\rangle, \langle\alpha|n\rangle$ , e  $\langle m|\beta\rangle$ .

- (iv) A partir de  $\rho(t)$ , calculamos o emaranhamento global, Eq. (2.8), e a discórdia geométrica quântica, Eq. (2.13), para uma configuração específica de desordem;
- (v) Para garantir que nossos resultados não dependem de uma realização específica de desordem, fizemos médias para várias configurações de desordem, dependendo do tamanho da cadeia, para  $N = 6, 8$  tomamos médias em  $2 \times 10^3$  configurações;
- (vi) Os passos anteriores serão realizados nas fases térmica e MBL.

É importante ressaltar que na demonstração da Eq. (4.3) assumimos que o hamiltoniano do modelo é independente do tempo, como é o caso de (4.2), fato que torna tudo muito mais simples.

Não explicitamos nesse trabalho a dinâmica, na abordagem descrita acima, das correlações geométricas clássica (2.14) e total (2.15), essa escolha foi feita porque o comportamento dessas é muito similar ao da discórdia quântica geométrica.

### 4.2.1 Mapeamento em férmions sem spin

Para deixar claro qual o papel da anisotropia  $\Delta$  no modelo descrito pelo hamiltoniano dado por (4.2), faremos o mapeamento desse modelo num modelo de férmions sem spin. Iniciaremos a transformação do hamiltoniano reescrevendo-o em termos dos seguintes operadores levantamento e abaixamento

$$b_j^+ = S_j^x + iS_j^y \quad , \quad b_j^- = S_j^x - iS_j^y \quad . \quad (4.4)$$

Tais operadores satisfazem algumas relações que lembram operadores fermiônicos

$$\{b_j^+, b_j^-\} = 1 \quad , \quad (b_j^-)^2 = (b_j^+)^2 = 0 \quad , \quad (4.5)$$

porém, também satisfazem relações que lembram operadores bosônicos

$$[b_j^+, b_k^-] = [b_j^+, b_k^+] = [b_j^-, b_k^-] = 0 \quad , \quad (j \neq k) \quad . \quad (4.6)$$

Em termos dos operadores levantamento e abaixamento, Eq. (4.4), os operadores de spin escrevem-se da seguinte forma

$$S_j^x = \frac{b_j^+ + b_j^-}{2} \quad , \quad S_j^y = \frac{b_j^+ - b_j^-}{2i} \quad . \quad (4.7)$$

Para obter como o operador  $S_j^z$  se escreve em termos dos mesmos operadores, basta substituímos essas últimas equações na seguinte relação de comutação  $[S_j^x, S_j^y] = iS_j^z$ . Fazendo isso, ficamos com

$$S_j^z = \frac{1}{2} \left( b_j^+ b_j^- - b_j^- b_j^+ \right) = b_j^+ b_j^- - \frac{1}{2} \quad . \quad (4.8)$$

Substituindo as Eqs. (4.4) e (4.8) no hamiltoniano (4.2), ficamos com

$$H = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{J}{2} \left( b_j^+ b_{j+1}^- + b_j^- b_{j+1}^+ \right) + \Delta \left( b_j^+ b_j^- - \frac{1}{2} \right) \left( b_{j+1}^+ b_{j+1}^- - \frac{1}{2} \right) + h_j \left( b_j^+ b_j^- - \frac{1}{2} \right) \right\}$$

$$H = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{J}{2} \left( b_j^\dagger b_{j+1}^- + b_j^- b_{j+1}^\dagger \right) + \Delta b_j^\dagger b_j^- b_{j+1}^\dagger b_{j+1}^- + h_j b_j^\dagger b_j^- \right], \quad (4.9)$$

em que os termos constantes, relacionados com as condições de contorno e independentes do tamanhos da cadeia, podem ser desprezados para cadeias grandes<sup>1</sup>.

Agora vamos usar a transformada de Jordan-Wigner para expressar esse hamiltoniano em termos de operadores de criação e aniquilação fermiônicos  $c_j^\dagger$  e  $c_j$ , dados por

$$c_j = \exp \left( -i\pi \sum_{k=1}^{j-1} b_k^+ b_k^- \right) b_j^- \quad \text{e} \quad c_j^\dagger = b_j^+ \exp \left( i\pi \sum_{k=1}^{j-1} b_k^+ b_k^- \right). \quad (4.10)$$

Notando que  $c_j^\dagger c_j = b_j^+ b_j^-$ , podemos inverter facilmente as transformações de Jordan-Wigner, assim ficamos com

$$b_j^- = \exp \left( i\pi \sum_{k=1}^{j-1} \Gamma_k \right) c_j \quad \text{e} \quad b_j^+ = c_j^\dagger \exp \left( -i\pi \sum_{k=1}^{j-1} \Gamma_k \right). \quad (4.11)$$

em que  $\Gamma_j = c_j^\dagger c_j$  é o operador número. Assim, o primeiro termo do hamiltoniano (4.9) torna-se

$$\begin{aligned} b_j^\dagger b_{j+1}^- &= c_j^\dagger \exp \left( i\pi \sum_{k=1}^{j-1} \Gamma_k \right) \exp \left( -i\pi \sum_{k=1}^j \Gamma_k \right) c_{j+1} \\ &= c_j^\dagger \exp(i\pi \Gamma_j) c_{j+1}, \end{aligned}$$

podemos mostrar que  $c_j^\dagger \exp(i\pi \Gamma_j) = c_j^\dagger$ , assim podemos escrever

$$b_j^\dagger b_{j+1}^- = c_j^\dagger c_{j+1}.$$

Fazendo cálculos semelhantes, encontramos que o segundo termo do mesmo hamiltoniano é dado por  $b_j^- b_{j+1}^+ = c_{j+1}^\dagger c_j$ , e conseqüentemente a Eq. (4.9) fica, em termos de operadores fermiônicos, escrita da seguinte forma

$$H = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{J}{2} \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) + \Delta \Gamma_j \Gamma_{j+1} + h_j \Gamma_j \right]. \quad (4.12)$$

Agora, com o hamiltoniano escrito dessa forma, fica claro que o parâmetro  $\Delta$  é a interação entre os férmions em sítios vizinhos. Na próxima seção vamos explorar um pouco esse limite. Mais uma vez tomaremos  $J = 1$ .

<sup>1</sup>Tais termos podem ser negligenciados como mostrado em [142, 143].

## 4.3 Resultados

### 4.3.1 Entropia de emaranhamento

Nas Figs. 4.1 e 4.2 apresentamos os resultados para a dinâmica de entropia de emaranhamento entre as metades da cadeia, respectivamente nas fase térmica e MBL, para o modelo dado por (4.2). Como também foi feito no Cap. 3, não usamos simetria do hamiltoniano, e fizemos apenas médias sobre  $2 \times 10^3$  realizações de desordem, uma vez que tais resultados já eram conhecidos.

Nas duas fases a correlação cresce rapidamente a partir do zero, uma vez que o estado inicial é um estado produto, atinge um valor máximo no instante  $\tilde{t}$ , sofre uma diminuição, e atinge um valor aproximadamente constante, o qual denominaremos valor de saturação  $S_E^{sat}$ .

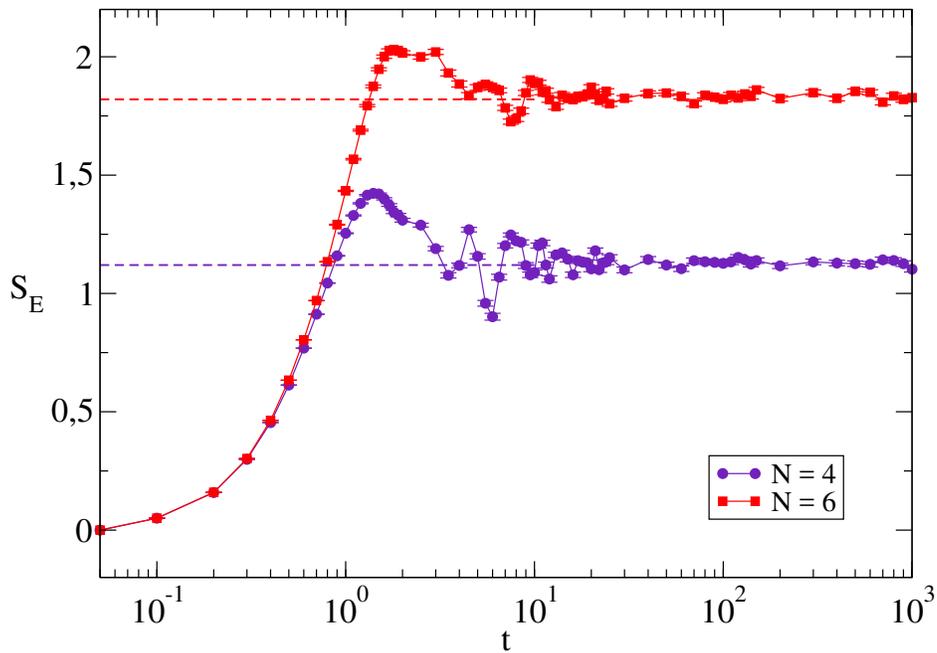


Figura 4.1: Dinâmica da entropia de emaranhamento entre as duas metades da cadeia do modelo dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01 \dots 01\rangle$ , na fase térmica,  $h = 1,0$ , para  $N = 4$  e 6 spins na cadeia.

Tal situação é bem conhecida na literatura. Sabe-se que para sistemas infinitos, na fase

térmica o emaranhamento se propaga balisticamente  $S_E^{ter}(t) \propto t$  [141], e na fase MBL tal propagação é logarítmica  $S_E^{MBL}(t) \propto t$  [29], sendo que esse crescimento ocorre indefinidamente. Porém, como podemos ver nas Figs. 4.1 e 4.2, para sistemas finitos, a dinâmica de tal correlação satura em um dado valor. Nota-se que tal valor é proporcional ao tamanho da cadeia em ambas as fases  $S_E^{sat} \propto N$ . Porém, os valores de saturação são bem diferentes, e  $(S_E^{ter})^{sat} > (S_E^{MBL})^{sat}$ , independentemente do tamanho da cadeia. Para mais detalhes, ver Refs. [29,31].

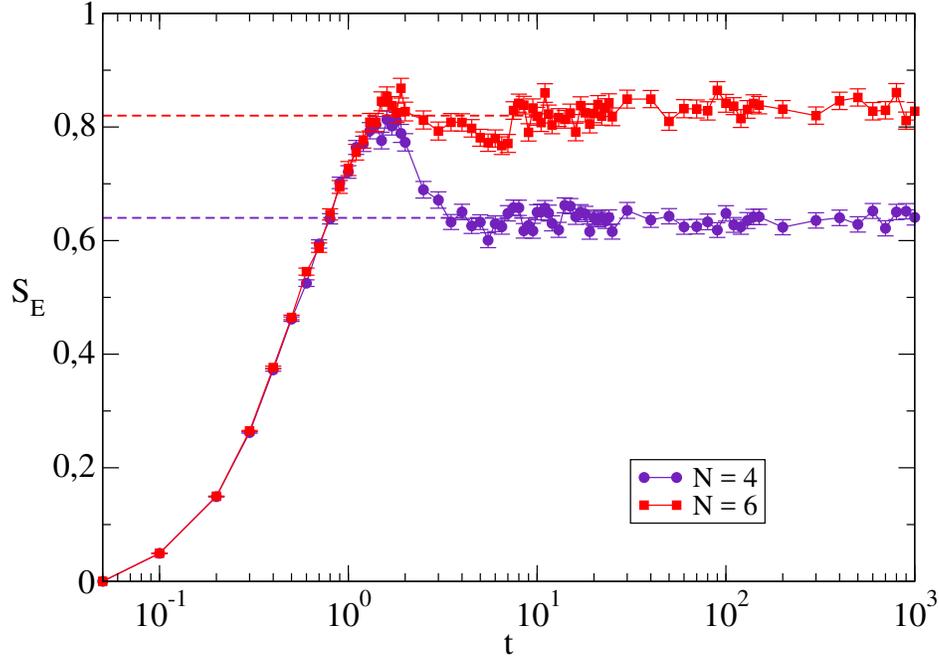


Figura 4.2: Dinâmica da entropia de emaranhamento entre as duas metades da cadeia do modelo dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase MBL,  $h = 6, 0$ , para  $N = 4$  e 6 spins na cadeia.

Comparando os resultados mostrados nas Figs. 4.1 e 4.2, podemos perceber que mesmo em sistemas pequenos, já existe uma diferença entre a dinâmica da entropia nas fases térmica e MBL.

### 4.3.2 Emaranhamento global

Nas Figs. 4.3 e 4.4 temos a dinâmica da entropia de emaranhamento, respectivamente, nas fases térmica e MBL, a partir de um estado produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ .

Da mesma forma que ocorre para a entropia de emaranhamento, inicialmente o valor do emaranhamento global cresce rapidamente até instantes  $t \approx 1$ , independentemente da fase e do tamanho da cadeia.

Na fase térmica, após atingir seu valor máximo,  $G_E^{max} \approx 1,0$ , existe um intervalo em que o valor da correlação oscila bastante. A partir de um certo instante ela satura em um valor aproximadamente constante e proporcional ao tamanho da cadeia. Percebe-se que quanto maior o tamanho da cadeia, o emaranhamento global torna-se mais próximo de seu valor máximo,  $G_E = 1,0$ . Isso mostra que nessa fase o emaranhamento global espalha-se rapidamente, assim como a entropia de emaranhamento, entre as partes do sistema.

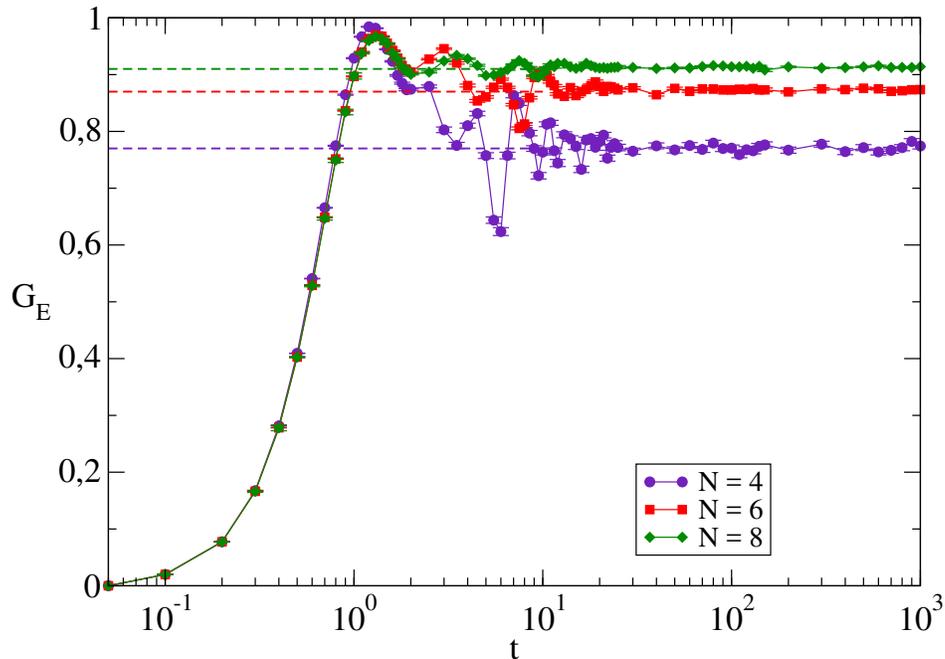


Figura 4.3: Dinâmica do emaranhamento global num sistema cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase térmica,  $h = 1,0$ , para  $N = 4, 6$  e  $8$  spins na cadeia.

Na fase MBL o comportamento qualitativo é bem semelhante ao encontrado na fase térmica, mas com valores de saturação bem inferiores aos valores encontrados na fase térmica. E, pelo menos até tamanhos analisados, parece não haver um crescimento logarítmico para tamanhos cada vez maiores, uma vez que  $(G_E^{MBL})_N^{sat} - (G_E^{MBL})_{N+1}^{sat} \rightarrow 0$  para  $N \rightarrow \infty$ . Claro que isso é apenas uma conjectura, pois analisamos tamanhos bem reduzidos para as cadeias.

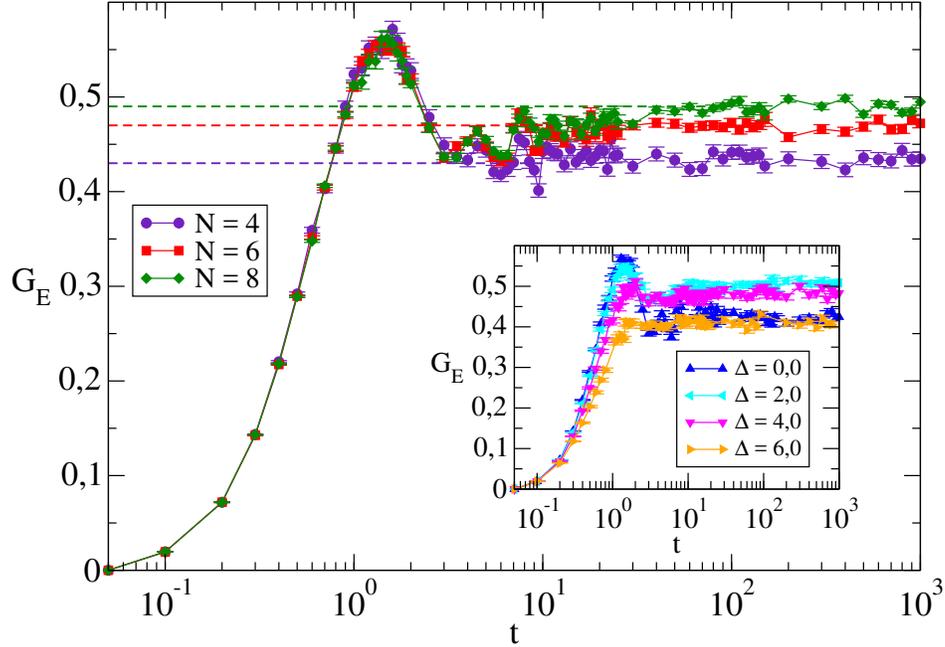


Figura 4.4: Dinâmica do emaranhamento global num sistema cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase MBL,  $h = 6, 0$ , para  $N = 4, 6$  e 8 spins na cadeia. Inset: Influência da anisotropia  $\Delta$  na dinâmica do emaranhamento global, tais resultados foram obtidos para  $N = 8$  spins.

No inset da Fig. 4.4 vemos como a anisotropia  $\Delta$  influencia na dinâmica da correlação. Podemos ver que quanto menor o valor de  $\Delta$ , maior o valor máximo da correlação antes de atingir o valor de saturação. Em relação ao valor de saturação, vemos que para o intervalo  $\Delta > 0$ , quanto maior o  $\Delta$ , maior  $(G_E^{MBL})^{sat}$ . O caso em que  $\Delta = 0$  é o caso limite em que não há anisotropia, e os sítios vizinhos não interagem.

Mais uma vez percebemos, agora usando o emaranhamento global, que a dinâmica é influ-

enciada pelas fases térmica e MBL mesmo em sistemas pequenos.

### 4.3.3 Discórdia quântica geométrica

As Figs. 4.5 e 4.6 mostram a evolução da discórdia geométrica entre spins vizinhos, considerando um estado inicialmente produto, respectivamente nas fases térmica e MBL, para cadeias de tamanhos diferentes.

Nas duas fases ocorre, nos instantes iniciais  $t \gtrsim 0$ , mais uma vez, ocorre um aumento rápido do valor da correlação. Atinge-se um valor máximo, depois um declínio, seguido de uma fase transiente até uma saturação num valor praticamente constante.

Na fase térmica os valores máximos atingidos para  $t \approx 1$  são maiores do que na fase MBL. Os valores de saturação nas duas fases são distintos para cadeias pequenas, porém, conforme o tamanho da cadeia aumenta, tais valores de saturação tornam-se bem similares. Tal fato indica que, talvez, a dinâmica da discórdia quântica geométrica, nesse cenário, não consiga diferenciar as duas fases. Mas ressaltamos que isso ainda precisa ser analisado em cadeias maiores.

Nesse ponto é importante fazermos um paralelo com os resultados apresentados na Ref. [45]. Tal trabalho também analisar a influência das fases térmica e MBL na dinâmica de uma correlação de pares, nesse caso, foi analisada a dinâmica da concorrência. Mesmo que o sistema não seja o mesmo, e nem mesmo seja a mesma correlação, somos induzidos a esperar resultados semelhantes, uma vez que temos a análise de correlações de pares nas fases térmicas e MBL. Naquele trabalho, foi encontrado que, em ambas as fases, a concorrência vai a zero com o tempo  $t$ , assim como a discórdia geométrica. Porém, na fase MBL o valor da concorrência vai a zero numa lei de potência, e na fase térmica ela vai a zero abruptamente. Assim, achamos que nossos resultados estão fisicamente condizentes.

O inset da Fig. 4.6 nos mostra como a anisotropia  $\Delta$  influencia a dinâmica da discórdia geométrica entre os spins vizinhos. Mais uma vez vemos que a anisotropia influencia no valor máximo que a correlação atinge para  $t \approx 1$ . Sendo que o maior valor máximo é atingido para  $\Delta = 0$ , assim, quanto maior o valor de  $\Delta$ , menor o valor máximo atingido. O mesmo comportamento é verificado para o valor de saturação da correlação para  $t \gg 0$ .

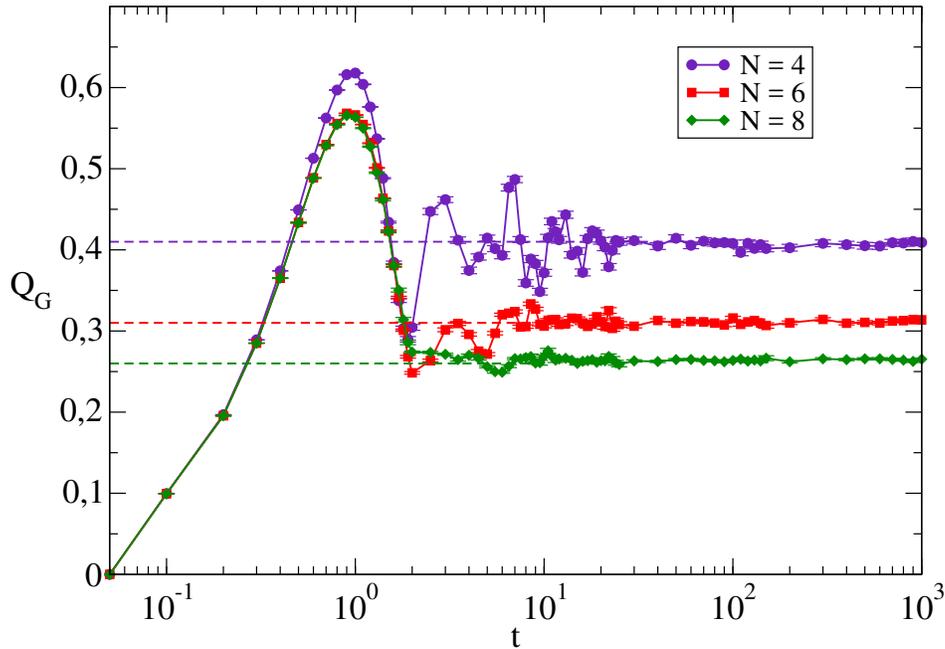


Figura 4.5: Dinâmica da discórdia geométrica entre dois spins vizinhos da cadeia, cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase térmica,  $h = 1, 0$ , para  $N = 4, 6$  e  $8$  spins na cadeia.

## 4.4 Discussão

Vimos que todas as correlações apresentam um rápido crescimento em instantes iniciais  $t \gtrsim 0$ . Tal comportamento geral pode ser entendido de duas formas. Primeiro, a dinâmica, nesse intervalo é fortemente influenciada pela anisotropia  $\Delta$  (ver insets das Figs 4.4 e 4.6), apenas a partir de um certo instante os outros termos de hamiltoniano (4.2) passam a influenciar a dinâmica [45]. Também podemos interpretar esse rápido crescimento inicial como a expansão balística dos pacotes de onda até a ordem do comprimento de correlação [29].

Em relação ao emaranhamento global, percebemos que as diferentes fases afetam sua dinâmica. De maneira geral, os resultados para tal correlação são similares aos resultados conhecidos para a entropia de emaranhamento. Claro que, aparentemente, não encontramos o crescimento logarítmico daquela, mas acreditamos que tal comportamento de ficar evidente para tamanhos maiores da cadeia. Devemos ressaltar também que, enquanto o valor máximo a entropia de

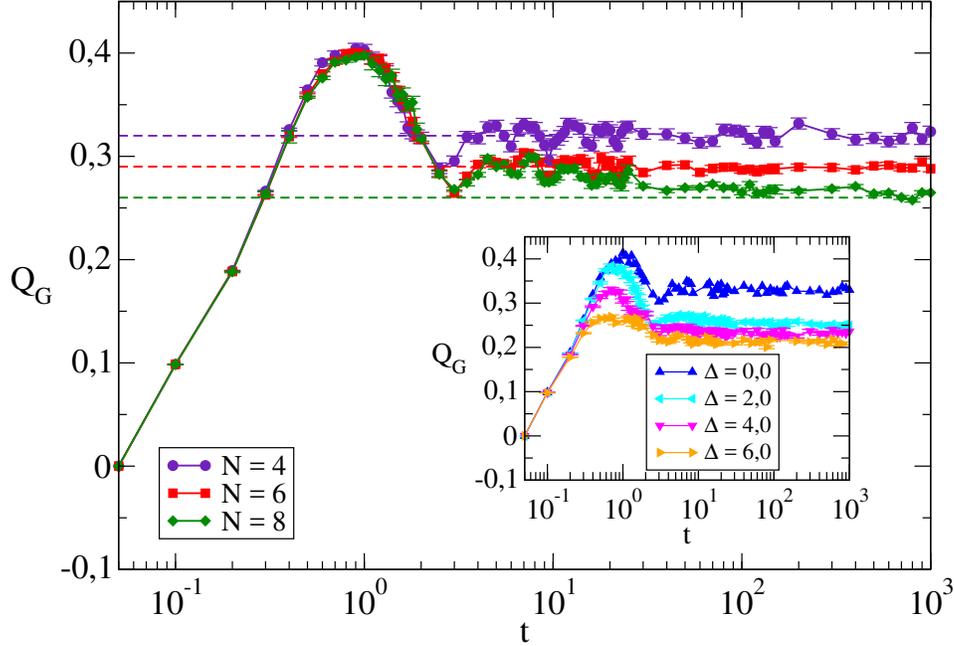


Figura 4.6: Dinâmica da discórdia geométrica entre dois spins vizinhos da cadeia, cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (4.2), considerando um estado inicial produto  $|\psi(0)\rangle = |01\dots 01\rangle$ , na fase MBL,  $h = 6,0$ , para  $N = 4, 6$  e 8 spins na cadeia. Inset: Influência da anisotropia  $\Delta$  na dinâmica da discórdia quântica geométrica, tais resultados foram obtidos para  $N = 8$  spins.

emaranhamento é proporcional ao tamanho da cadeia, o valor máximo do emaranhamento global é  $G_E^{max} = 1,0$ , independentemente do tamanho da cadeia.

Agora a análise dos resultados da discórdia geométrica. Como afirmamos anteriormente, aparentemente, a dinâmica dessa correlação não é influenciada pelas fases térmica e MBL. Porém, podemos justificar isso com base no comprimento de localização. Temos que, diferentemente das outras duas correlações, a discórdia quântica é uma correlação entre partes muito pequenas e vizinhas da cadeia. Assim, talvez, essa distância entre as partes seja menor do que o comprimento de localização  $L_v < \lambda$ , e portanto a dinâmica não consiga enxergar a fase em que sistema se encontra. Mais uma vez, isso é apenas uma conjectura, devendo ser comprovada, ou não, ao analisarmos tamanhos maiores para cadeia.

# Capítulo 5

## Transição térmico-MBL e annealing quântico

Nesse capítulo iremos analisar a transição térmico-MBL em uma rede de spins-1/2 organizada num grafo chimera. A Fig. 5.1 representa esse tipo de configuração. A motivação para analisar tal configuração está na possibilidade de realizarmos um experimento no *annealer* quântico da D-wave, o D-Wave 2000Q, uma vez que em tal aparato, as células do hardware contém 8 q-bits supercondutores de fluxo, organizados segundo grafos chimera [144].

Inicialmente exporemos alguns conceitos relacionados a um *annealer* quântico, faremos uma rápida introdução aos fundamentos do *annealing* quântico e a sua relação com o teorema adiabático. Abordaremos a aplicação do *annealing* quântico em modelos de Ising num campo transversal, uma vez que esse é o modelo usado nos sistemas da D-Wave. Por fim, nos restringiremos às características básicas do hardware do D-Wave 2000Q.

Na seção seguinte, iremos especificar qual modelo específico analisamos, bem como o método para a obtenção dos resultados relacionados à transição de fase térmico-MBL. Nessa parte iremos também justificar como os nossos resultados teóricos podem estar de acordo com os resultados experimentais. Por fim, iremos discutir os resultados obtidos.

Ressalta-se que, até o momento em que essa tese está sendo escrita, não existe nenhum trabalho reportando tal análise em um *annealer* quântico.

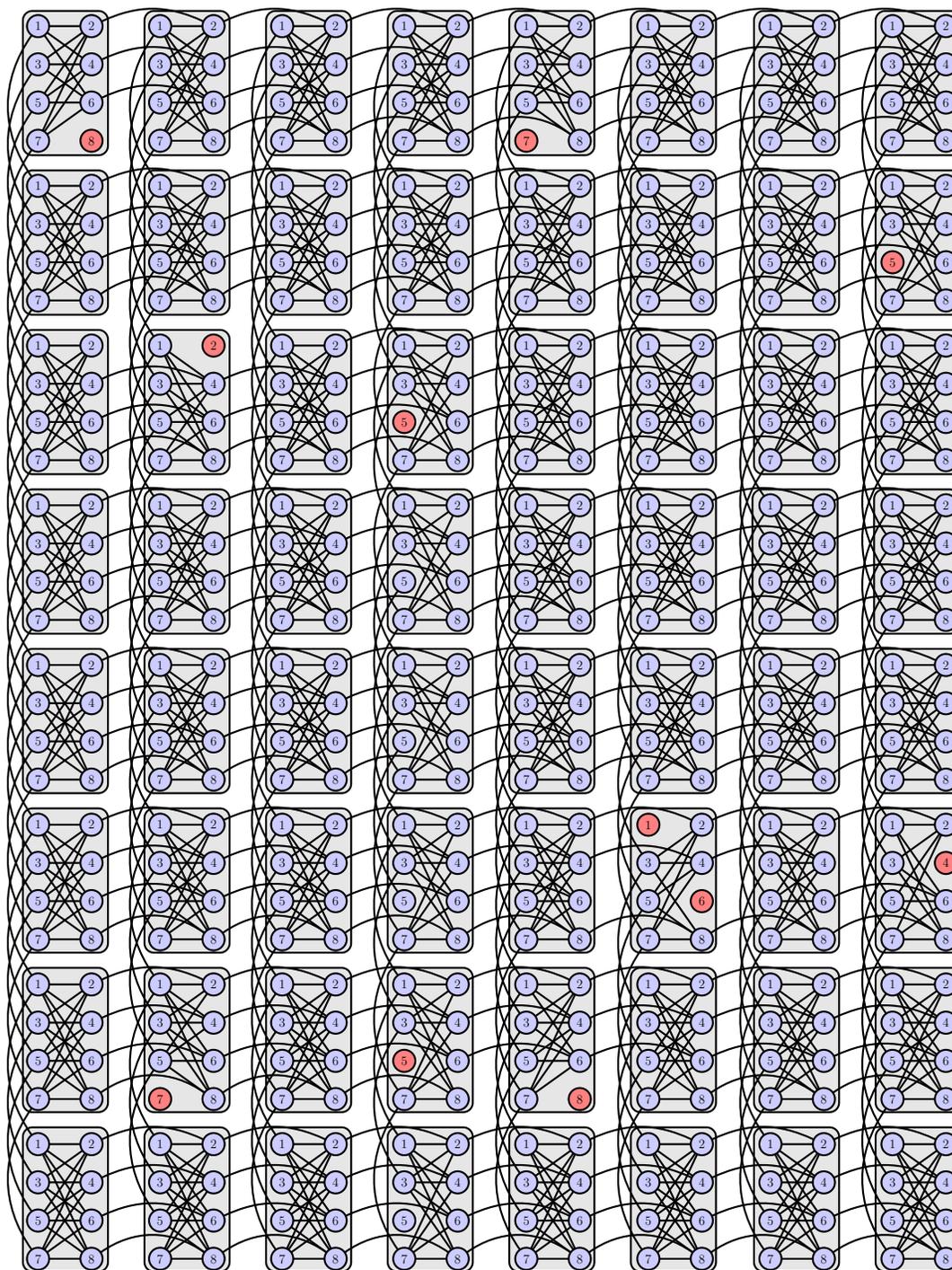


Figura 5.1: Representação do processador do *annealer* quântico da D-Wave com 512 q-bits. Círculos representam os q-bits, e curvas as interações entre os mesmos. Círculos vermelhos denotam “q-bits” não operantes. Adaptado da Ref. [159].

## 5.1 Annealing quântico e teorema adiabático

Vários problemas em Física, em Computação e em outras áreas da Ciência estão relacionados a processos de otimização, ou seja, estão relacionados a encontrar um mínimo global de uma dada função custo [145–147]. Como exemplos temos a obtenção do auto-estado de energia de uma rede de Ising, com frustração, de  $N$  spins. Outro exemplo é a obtenção do comprimento mínimo percorrido por um vendedor que visita  $N$  cidades, passando apenas uma única vez por cada uma - *Traveling salesman problem* [93]. Em nossa análise queremos determinar o mínimo da energia do sistema, assim, de agora em diante, usaremos energia do sistema ao invés de função custo.

Kirkpatrick [148] demonstrou, num método que ficou conhecida como *simulated annealing*, que uma excelente forma de se resolver processos de otimização é simular um processo de resfriamento em modelos de spin de Ising numa simulação de Monte Carlo. Tais sistemas são descritos pelo hamiltoniano

$$H_0 = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i^z s_j^z - \sum_i h_i s_i^z, \quad (5.1)$$

em que o spin  $s_i$  pode assumir os valores  $\pm 1$ ,  $J_{ij}$  acopla os spins dos sítios  $i$  e  $j$ , e  $h_i$  são campos locais.

O *simulated annealing* usa as flutuações térmicas para evitar que o sistema fique aprisionado em um mínimo local da energia. A temperatura do sistema, real ou fictícia, inicialmente é alta, e o estado é aleatório. Então a mesma é diminuída lentamente para que o processo de otimização obtenha sucesso. Isso ocorre porque a altas temperaturas, o estado do sistema é uma mistura estatística de todos os estados possíveis com probabilidades muito próximas, porém, com a diminuição da temperatura, privilegia-se o estado fundamental do sistema. Na Ref. [149] foi mostrado que em problemas genéricos de otimização combinatorial, o mínimo global da função custo é atingido assintoticamente se a temperatura obedecer a  $T(t) \geq \frac{c}{\log t}$ , em que  $c$  é uma constante de depende do sistema.

A versão quântica do *simulated annealing* foi proposta por Kadowaki [150], em que o processo de otimização baseia-se no tunelamento quântico ao invés do “pulo térmico” do *simulated annealing*. Tal abordagem é conhecida como *annealing* quântico, a Fig. 5.2 ilustra a diferença

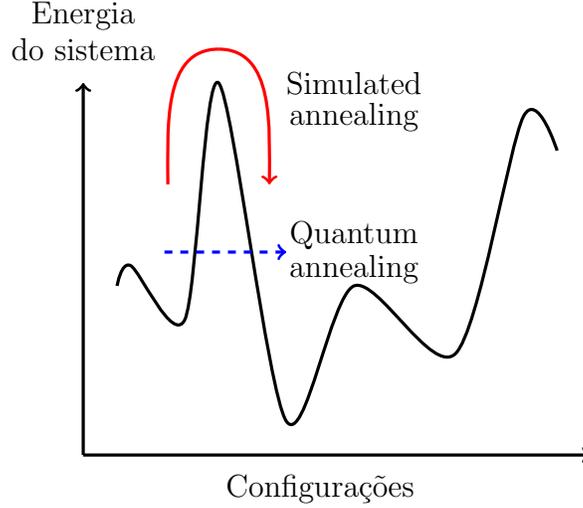


Figura 5.2: Esquema diferenciando os dois processos de otimização, o *simulated annealing* e o *annealing* quântico. O primeiro baseia-se em flutuações térmicas, enquanto que o segundo baseia-se em flutuações quânticas. Adaptado da Ref. [153].

entre os dois protocolos.

Para se implementar o *annealing* quântico em modelos de spin de Ising, um termo deve ser adicionado à Eq. 5.1, mais precisamente um campo transversal [150], assim o hamiltoniano que descreve o sistema é dado por

$$H(t) = -\sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i^z\sigma_j^z - \sum_i h_i\sigma_i^z - \Gamma(t)\sum_i \sigma_i^x \quad (5.2)$$

$$= H_0 - \Gamma(t)\sum_i \sigma_i^x, \quad (5.3)$$

em que  $J_{ij}$  é a interação de troca,  $\sigma_i^{z,x}$  são matrizes de Pauli no sítio  $i$ , e  $\Gamma(t)$  é o campo transversal que controla a taxa de transição entre estados  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ , ou seja, produz a transição entre os estados clássicos (auto-estados de  $H_0$ ), e então possui o mesmo papel da temperatura no *simulated annealing*. Inicialmente o valor de  $\Gamma(t)$  é alto o suficiente,  $\Gamma(0) \gg |J_{ij}|, |h_i|$ , para deixar todos os spins alinhados na direção  $x$  [151, 152]. Dessa forma, através da diminuição suficientemente lenta de  $\Gamma(t)$  até zero, o sistema é conduzido para o estado fundamental de  $H_0$ , e o processo de otimização é bem sucedido.

Kadowaki mostrou que, para um mesmo protocolo de *annealing*, a versão quântica do processo consegue uma convergência para o estado fundamental com maior probabilidade do que a versão clássica-térmica. Em Ref. [153] tais versões de *annealing* foram comparadas experimentalmente em magnetos desordenados, e os resultados de Kadowaki foram comprovados, confirmando o melhor desempenho na otimização para o *annealing* quântico.

A ideia do *annealing* quântico está inerentemente relacionada à adiabaticidade em mecânica quântica, conceito expresso através do *teorema adiabático* [154–156]. Tal teorema nos garante que, em uma evolução é adiabática, se um sistema é preparado no estado fundamental  $|E_0(t = t_0)\rangle$  de um hamiltoniano dependente do tempo  $H(t = t_0)$ , então, para qualquer instante posterior  $t$ , o sistema estará no estado fundamental instantâneo de  $H(t)$ , denotado por  $|E_0(t)\rangle$ . Tal teorema está demonstrado no Ap. A desta tese.

O mesmo teorema nos fornece a condição sobre o tempo de relaxação para que uma evolução seja adiabática. Para um sistema quântico fechado, a evolução será adiabática se o tempo de relaxação, *annealing*, for maior do que  $\tau \propto \Delta_{min}^{-2}$ , em que  $\Delta_{min} = \min_{0 \leq t < \tau} [E_1(t) - E_0(t)]$ , com  $E_{0,1}(t)$  sendo, respectivamente, as auto-energias instantâneas do estado fundamental e do nível imediatamente acima.

O teorema adiabático permite a realização do processo de *annealing* quântico para um sistema isolado do meio externo e a temperatura nula. Quando aplicada ao processamento de informação quântica esse tipo de realização foi denominada computação quântica adiabática [157, 158]. Num processo real de *annealing* quântico, o sistema não está totalmente isolado e a temperatura não é nula, mas se a evolução é suficientemente lenta, o sistema evolui numa mistura estatística dos níveis de energia mais baixa.

## 5.2 Annealer quântico da D-Wave

Vamos discutir agora alguns detalhes dos processadores dos sistemas da D-Wave, pois em nossa proposta as medidas serão realizadas em um desses processadores.

Em 2011, a D-Wave Systems lançou o primeiro *annealer* quântico comercial, o D-Wave One - DW1, que possuía 128 q-bits. Em 2013 foi lançado o D-Wave 2 - DW2, com 512 q-bits, em

2013 foi lançado o D-Wave 2X, com um processador de 1024 q-bits. A versão atual, o D-Wave 2000Q, possui um processador com até 2048 q-bits. Esses equipamentos funcionam através do *annealing* quântico numa rede de Ising de q-bits de fluxo supercondutores [144], interconectados através de um grafo chimera. A Fig. 5.1 ilustra tal grafo para um processador com 512 q-bits. Diferentemente de outros *annealers* quânticos baseados em sistemas de matéria condensada [153], nos sistemas da D-Wave, tanto os spins individuais como seus acoplamentos são programáveis.

O D-Wave 2000Q, é uma “caixa preta” com dimensões de aproximadamente  $3,0 \text{ m} \times 2,1 \text{ m} \times 3,0 \text{ m}$  (comprimento  $\times$  largura  $\times$  altura), cuja maior parte do volume é ocupado pelo sistema de refrigeração, o qual funciona através de criogenia, que permite o processador operar a temperaturas menores do que 15 mK. Todo o sistema está em um alto vácuo, e isolado de qualquer campo magnético externo, vibração e qualquer rádio-frequência.

Simplificadamente, o q-bit de fluxo supercondutor é um anel supercondutor, contendo uma junção de Josephson, submetido a dois fluxos externos de campo magnético  $\phi_1$  e  $\phi_2$ . Tal configuração pode ser modelada como uma duplo poço de potencial em relação à  $\phi_1$ , esquematicamente representado em Fig. 5.2. Os dois estados de menor energia correspondem a correntes que circulam simultaneamente no sentido horário e anti-horário no anel, e representam os estados  $|\downarrow\rangle$  e  $|\uparrow\rangle$ . A altura da barreira  $\delta U$  é controlada por  $\phi_2$ , e a diferença entre as energias dos dois mínimos,  $2h$ , é controlada por  $\phi_1$ . No regime de baixas temperaturas, a dinâmica desse q-bit de fluxo é idêntica a de spins de Ising [144].

O *annealing* quântico realizado no *annealer* da D-Wave é muito similar ao que já discutimos. Inicialmente o sistema, a baixas temperaturas, é preparado no estado fundamental de  $H_{trans}$ , ocorre a evolução lenta, e no final encontra-se o estado fundamental de  $H_{Ising}$ . A evolução do hamiltoniano é dada por

$$H(s) = A(s)H_{trans} + B(s)H_{Ising} , \quad (5.4)$$

em que  $H_{trans} = -\sum_{j=1}^N \sigma_j^x$ ,  $H_{Ising} = -\sum_{i<j} J_{ij}\sigma_i^z\sigma_j^z - \sum_i h_i\sigma_i^z$ , com  $s = t/T$  sendo o tempo de evolução normalizado ( $T$  : tempo total da evolução). As funções  $A(s)$  e  $B(s)$  representam o protocolo de *annealing*. Tais funções estão representadas qualitativamente na Fig 5.5(a), em que elas satisfazem  $A(s=0), B(s=1) > 0$  e  $A(s=1), B(s=0) = 0$ . Se a mudança é lenta e o sistema não interage com o meio externo, o sistema irá evoluir em seu estado fundamental.

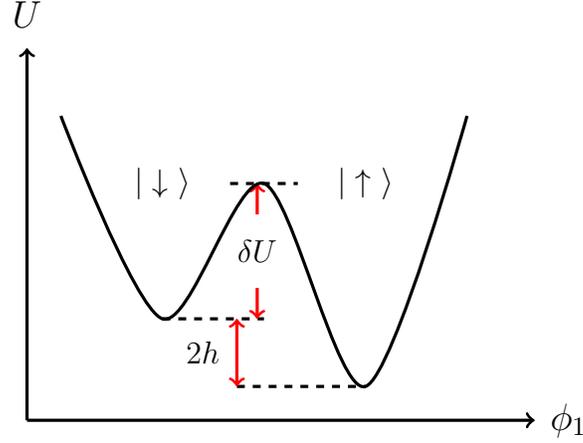


Figura 5.3: Esquema representativo do q-bit supercondutor de fluxo. Adaptado da Ref. [144].

## 5.3 Modelo e método

### 5.3.1 Obtenção do ponto crítico

Iremos estudar a transição de fase térmico-MBL num grafo chimera com  $N$  spins-1/2 como ilustrado em Fig. 5.4, cujo hamiltoniano será dado por

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_{j=1}^N h_j \sigma_j^z - \Delta \sum_{j=1}^N \sigma_j^x \quad (5.5)$$

em que  $\sigma_j^{x,z}$  são as matrizes de Pauli no sítio  $j$ ,  $J_{ij}$  são as interações de troca entre os spins  $i$  e  $j$ , tais valores são sorteados aleatoriamente da distribuição uniforme  $[-\delta J, \delta J]$ ,  $h_j$  é o campo aleatório no sítio  $j$ , sorteado a partir de distribuição uniforme  $[-h, h]$ , e  $\Delta$  é a intensidade do campo transversal.

Nota-se que no hamiltoniano (5.5), considerando a geometria dos grafos chimera, leva em consideração interações mais distantes do que a interação de primeiros vizinhos. Por exemplo, dada a Fig. 5.4, o spin no sítio 1 interage com os spins nos sítios 2, 4, 6 e 8. É importante ressaltar também que tal hamiltoniano é independente do tempo, o que o torna bastante diferente do hamiltoniano simulado no *annealer* quântico da D-Wave, dado pela Eq. (5.4). Mais adiante retornaremos a esse ponto.

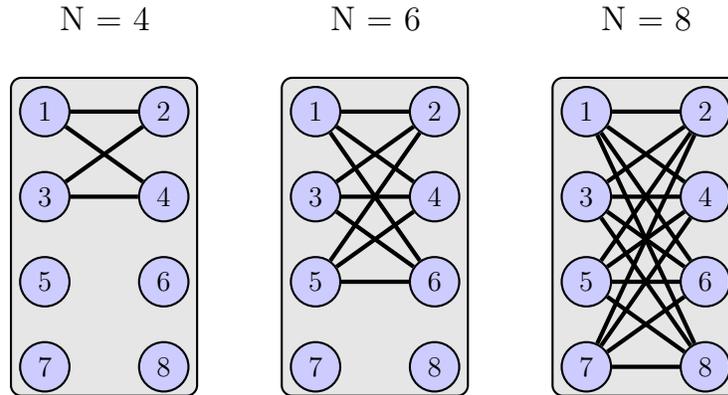


Figura 5.4: Grafos chimera para  $N = 4, 6$  e  $8$  q-bits em uma célula do processador do *annealer* quântico da D-Wave. Os círculos representam os sítios da rede e as setas representam as interações entre os sítios.

Abaixo, mais uma vez, vamos explicitar o passo-a-passo usado para encontrar o ponto crítico para o modelo:

- (i) Fixamos o valor de intensidade de desordem, escolhemos  $\delta J = h = \xi$ ;
- (ii) Para essa intensidade de desordem, sorteamos configurações de desordem para  $J_{ij}$  e  $h_i$ , diagonalizamos exatamente do hamiltoniano dado pela Eq. (5.5), e obtemos todos os seus auto-estados  $\{|n\rangle\}$ ;
- (iii) Para cada auto-estado  $\{|n\rangle\}$ , calculamos, usando a Eq. (2.1), a entropia de emaranhamento entre as duas metades da rede;
- (iv) Ainda com a mesma intensidade de desordem, tomamos uma média em  $2 \times 10^3$  configurações de desordem. Com isso pudemos calcular o valor médio e a variância da entropia de emaranhamento para uma dada intensidade de desordem;
- (v) Variando-se a intensidade da desordem, obtemos as quantidades mencionadas como função da desordem  $\delta J$ .

### 5.3.2 Dinâmica da magnetização

Agora vamos explicitar como calculamos a dinâmica da magnetização numericamente. Para isso, usamos o seguinte protocolo:

- (i) Fixamos o valor de intensidade de desordem, escolhemos  $\delta J = h = \xi^1$ ;
- (ii) Calculamos, para um instante fixo  $t$ , o valor esperado da magnetização de um único spin  $i$  no estado  $|\psi(t)\rangle = U(t)|00\dots 00\rangle$

$$\langle m_i^z(t) \rangle = \sum_{k,l} (c_0^k)^* c_0^l \langle E_k | \mathbb{I}_1 \otimes \dots \otimes m_i^z \otimes \dots \otimes \mathbb{I}_N | E_l \rangle e^{-i(E_k - E_l)t}, \quad (5.6)$$

em que  $H|E_k\rangle = E_k|E_k\rangle$  e, ao escrevemos os auto-estados da energia na base computacional, temos  $|E_k\rangle = \sum_i c_i^k |i\rangle$ , assim  $c_0^k = \langle 0|E_k\rangle = \langle 00\dots 00|E_k\rangle$ ;

- (iii) Para um mesmo instante  $t$  tomamos médias sobre  $2 \times 10^3$  realização de desordens;
- (iv) Fazemos esse procedimento para vários instantes  $t$ , assim encontramos a dinâmica mencionada;
- (v) Analisamos a dinâmica para vários valores de intensidade de desordem  $\delta J$ .

Agora vamos discutir um ponto crucial desse trabalho, como a dinâmica detalhada acima, para o hamiltoniano (5.5) pode ser relacionada com a dinâmica de magnetização dada pelo hamiltoniano dependente do tempo implementado no *annealer* quântico da D-Wave.

A priori, os resultados numéricos que obtemos usando a Eq. (5.6), os quais estão na Fig. 5.8, não deveriam ser obtidos experimentalmente no *annealer* quântico da D-Wave, pois, além do processador do D-Wave 2000Q não ser perfeitamente isolado do ambiente externo e a temperatura não ser exatamente nula, o hamiltoniano que analisamos não é exatamente o hamiltoniano implementado no processador.

No entanto, vamos argumentar que os resultados experimentais devem ser similares aos que obtivemos numericamente. Para esclarecer isso, vamos detalhar um pouco como a medida será

---

<sup>1</sup>Tal escolha foi feita apenas por comodidade, observamos que outras escolhas provocam apenas “shifts” nas grandezas calculadas, mas não produzem comportamentos diferentes.

realizada com ajuda da Fig. 5.5. A evolução inicia-se em  $s = 0$  e termina em  $s = 1$ . No instante  $s = s^*$  temos que  $B(s^*)/A(s^*) = \delta J/\Delta$ , em que esses últimos são, respectivamente a intensidade da desordem e o valor do campo transverso do hamiltoniano independente do tempo dado por Eq. (5.5). Então a intensidade de desordem é controlada fixando-se  $s^*$ .

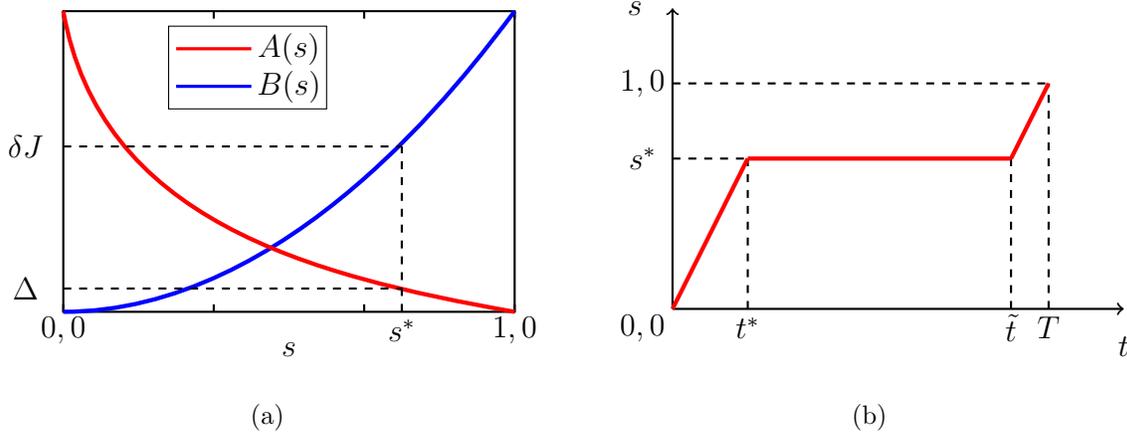


Figura 5.5: (a) Comportamento qualitativo das funções  $A(s)$  e  $B(s)$ , as quais especificam o protocolo de *annealing*. (b) Evolução do tempo normalizado como função de  $t$ . Ao atingirmos  $s(t = t^*) = s^*$  o hamiltoniano é pausado, e volta a ser dependente do tempo apenas em  $\tilde{t} \lesssim T$ . Após  $\tilde{t}$  a dinâmica é “acelerada” até atingirmos  $s(t = T) = 1$ , aí sim a medida é realizada.

Assim ao atingirmos o valor de  $s = s^*$  que nos fornece o  $\delta J$  que desejamos, “congelamos” a dinâmica, como ilustrado em Fig. 5.5(b), isso é feito pausando-se o hamiltoniano no tempo  $t = t^*$ . Deixamos o hamiltoniano pausado o máximo possível, até  $\tilde{t}$ . Após esse instante, a dinâmica é “acelerada” até atingirmos  $t = T (s = 1)$ , e nesse instante a medida da magnetização do spin é realizada. Isso será feito várias vezes para o mesmo valor  $s = s^*$ , e assim poderá ser feita uma média sobre várias configurações de desordem, e por fim obteremos  $\langle m_i^z(t) \rangle_{exp}$ .

É importante ressaltarmos que o ato de pausar do hamiltoniano no intervalo  $[t^*, \tilde{t}]$  é fundamental para que o experimento forneça resultados similares aos nossos, uma vez que nessa etapa da evolução o hamiltoniano será constante, similarmente ao dado pela Eq. (5.5). Outro passo muito importante é a evolução “rápida” entre os instantes  $\tilde{t}$  e  $T$ , para garantirmos que a medida realizada no final do experimento ainda preserve a configuração do hamiltoniano pausado.

A evolução no *annealer* quântico da D-Wave é aproximadamente adiabática, uma vez que o sistema não é perfeitamente isolado do meio e a temperatura não é identicamente nula. Então, o sistema evoluirá em uma mistura estatística de auto-estados instantaneamente de mais baixa energia, ou seja, próximos do estado fundamental. Tal fato nos permite esperar que o comportamento de  $\langle m_i^z(t) \rangle_{exp}$  seja similar ao encontrado para  $\langle m_i^z(t) \rangle$ , Eq. (5.6), e mostrado na Fig. 5.8, pois, como veremos mais adiante (ver Fig. 5.9) o estado fundamental possui grande influência sobre a dinâmica do valor esperado  $\langle m_i^z(t) \rangle$  em relação ao estado inicialmente produto  $|00\dots 00\rangle$ .

## 5.4 Resultados

### 5.4.1 Ponto crítico

Inicialmente nosso objetivo é verificar se o modelo dado pela Eq. (5.5) possui uma transição térmico-MBL como definida em Def. (3). Para tal, calculamos a entropia de emaranhamento como descrito na Sec. 5.3, cujo resultado está na Fig. 5.6. Percebemos que o comportamento dessa correlação, como função da desordem, é bem típico de modelos que apresentam a transição térmico-MBL. Perceba que para valores baixos da intensidade de desordem  $\delta J < \delta J_c$ , a entropia de emaranhamento obedece à lei de volume, enquanto que para valores grandes de intensidade de desordem,  $\delta J > \delta J_c$ , tal correlação obedece lei de área.

Uma vez que já temos evidências de que a transição térmico-MBL existe nesse modelo, vamos agora encontrar o ponto crítico de tal transição. Para encontrá-lo, usamos a variância da entropia de emaranhamento. No inset de Fig. 5.6 temos essa quantidade como função de  $\delta J$ , temos que no ponto crítico, para cadeias infinitas, a variância diverge [29], como discutimos no Cap. 3. Porém, nosso sistema físico é limitado a  $N = 8$  spins, e assim, tal divergência apresenta-se como um ponto de máximo. Através de inset vemos que o ponto crítico para um auto-estado no meio de espectro é  $\delta J_c \approx 5,5$ . Usamos a entropia de emaranhamento porque é a ferramenta padrão para a análise desse tipo de problema, e o foco aqui é o experimento.

O inset da Fig. 5.6 nos fornece o ponto crítico para um auto-estado que pertence ao meio do espectro. Porém, apesar de ainda não termos evidenciado esse característica, o ponto crítico da transição térmico-MBL depende da energia do auto-estado [34, 37], tal característica é chamada

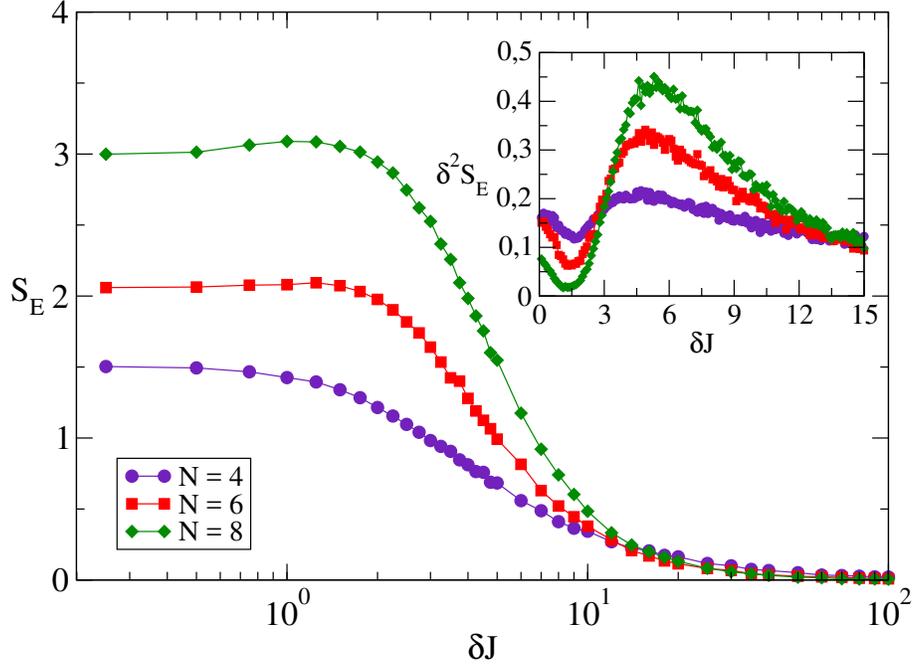


Figura 5.6: Gráfico principal: valor médio da entropia de emaranhamento  $S_E$  entre as duas metades da rede chimera, para várias realizações de desordem, como função da interação entre os spins da rede  $\delta J$ . Inset: variância da entropia de emaranhamento  $\delta^2 S_E$  relativa às várias realizações de desordem. Tais resultados são para o auto-estado do hamiltoniano (5.5) que pertence ao meio do espectro.

de *mobility edge*. No Cap. 3 essa informação foi perdida porque fizemos médias sobre “todos” os auto-estados. Porém agora não fizemos tal média, e a Fig. 5.7 nos fornece como o ponto crítico da transição térmico-MBL varia de acordo com a densidade de energia  $\varepsilon = \frac{E_n - E_{min}}{E_{max} - E_{min}}$  para o modelo descrito pelo hamiltoniano (5.5) com  $N = 8$  spins. Os pontos críticos foram obtidos através da variância da entropia da emaranhamento.

O *mobility edge* para o grafo chimera com mostrado na Fig. 5.7 é bem semelhante ao *mobility edge* para outros modelos [34, 37]. Perceba que os estados no meio do espectro possuem pontos críticos maiores do que estados na borda do espectro. O *mobility edge* é a fronteira entre as fases térmica e MBL no diagrama de fases  $\varepsilon \times \delta J$ . Através da Fig. 5.7 podemos ver, por exemplo, que para  $\delta J \approx 4,0$ , os auto-estados com densidades de energia  $0,20 \lesssim \varepsilon \lesssim 0,75$  estão na fase

térmica, enquanto os outros já estão na fase MBL.

Como veremos mais adiante, a *mobility edge* será muito importante para entendermos a dinâmica da magnetização nas diferentes fases, quantidade essa que é de fato medida nos *annealers* quânticos da D-Wave.

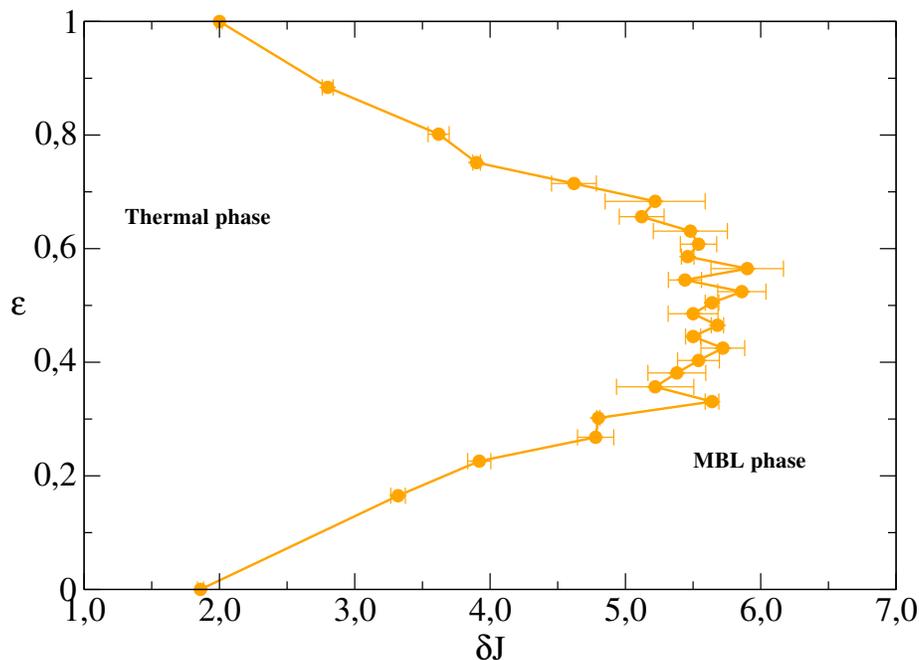


Figura 5.7: Diagrama de fases  $\epsilon \times \delta J$  entre as fases térmica e MBL. A curva explicitada é denominada *mobility edge*, e contém todos os pontos críticos da transição, cada um referente a uma densidade de energia diferente. Tais pontos críticos foram obtidos através da variância de entropia de emaranhamento  $\delta^2 J$  entre as duas metades da rede chimera com  $N = 8$  spins, para um sistema modelado pelo hamiltoniano (5.5).

### 5.4.2 Dinâmica da magnetização

Agora vamos nos voltar para a quantidade que realmente pode ser medida no *annealer* quântico da D-Wave, a magnetização. A Fig. 5.8 mostra a dinâmica do valor esperado da magnetização de um spin da rede chimera em um estado inicialmente produto  $|00\dots 00\rangle$ , ou seja,  $\langle m_i^z(t) \rangle = \langle 0\dots 0 | U(t)^\dagger m_i^z U(t) | 0\dots 0 \rangle$ . Então o sistema evolui sob sua própria dinâmica,

regida pelo hamiltoniano (5.5). Os valores apresentados para cada  $\delta J$  são resultados finais após média sobre  $2 \times 10^3$  configurações de desordem.

Como no estado inicial todos os spins estão para baixo, independentemente do valor de  $\delta J$ , temos que  $\langle m_i^z(t=0) \rangle = -0,5$ . Para todos os valores de  $\delta J$ , quando a evolução inicia, existe uma variação de  $\langle m_i^z(t) \rangle$ , e para  $t \gg 0$ , o valor esperado  $\langle m_i^z(t \rightarrow \infty) \rangle \approx \xi$ , ou seja, tal quantidade entra em equilíbrio, porém esse valor de equilíbrio depende da intensidade de desordem,  $\xi = \xi(\delta J)$ .

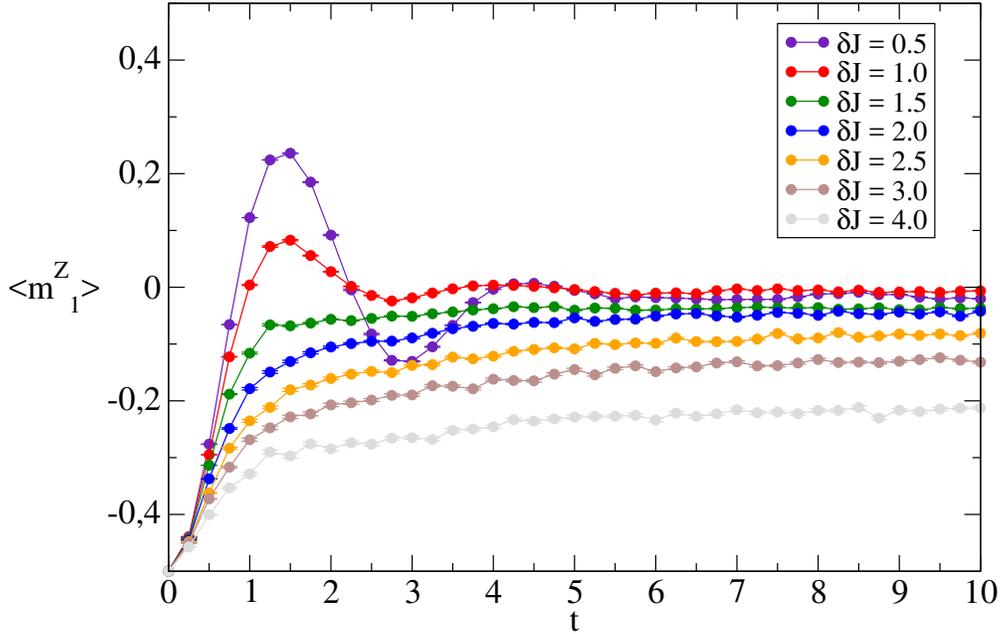


Figura 5.8: Valor esperado da magnetização do spin  $i = 1$  da rede chimera em relação a um estado inicialmente produto  $|00 \dots 00\rangle$ , para vários valores de  $\delta J$ , como função do tempo  $t$ . A dinâmica é dada pelo hamiltoniano (5.5), e todos os resultados são para  $N = 8$  spins.

Sabemos que dependendo do valor da intensidade da desordem  $\delta J$  o sistema estará na fase térmica ou na fase MBL. Na fase térmica o valor esperado da magnetização do spin deve ser igual ao seu valor termodinâmico de equilíbrio, dado pela média no ensemble microcanônico, a saber,  $\langle m_i^z \rangle_{term} = 0$ . Percebemos, ao analisarmos a Fig. 5.8, que os valores de equilíbrio de  $\langle m_i^z(t) \rangle$ ,  $\xi$ , para  $\delta J < 2,0$  são muito próximos do valor termodinâmico,  $\xi(\delta J < 2,0) \approx \langle m_i^z \rangle_{term}$ . Porém,

para os casos em que  $\delta J > 2,0$  já existe uma diferença considerável entre  $\xi(\delta J > 2,0)$  e o valor de equilíbrio térmico  $\langle m_i^z \rangle_{term}$ . Isso sugere que o sistema sofreu a transição de fase térmico-MBL, estando agora, para  $\delta J \gtrsim 2,0$ , na fase MBL. Perceba que para maiores valores de  $\delta J$ , maior é a “memória” do estado inicial, então somos levados a afirmar que  $\lim_{\delta J \rightarrow \infty} [\xi - \langle m_i^z(t=0) \rangle] \rightarrow 0$ .

Ao analisarmos o diagrama de fases dado pela Fig. 5.7, vemos que a transição térmico-MBL, para esse sistema, ocorre para  $\delta J_c \approx 2,0$  somente em auto-estados nas margens do espectro. Então, temos que mostrar que esses auto-estados conseguem influenciar muito fortemente a dinâmica dada na Fig. 5.8.

Vamos explicitar a dependência do valor esperado da magnetização no estado  $|00\dots 00\rangle$  em relação aos auto-estados do hamiltoniano. Usando que  $H|n\rangle = e_n|n\rangle$ , notando que  $|0\rangle = |00\dots 00\rangle$  é um vetor da base computacional, ou seja,  $|n\rangle = \sum_j c_j^n |j\rangle$ , com  $\{|j\rangle\}$  denotando a base computacional, podemos escrever que

$$\begin{aligned} \langle m_i^z \rangle &= \langle 00\dots 00 | m_i^z | 00\dots 00 \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle 00\dots 00 | n \rangle \langle n | m_i^z | m \rangle \langle m | 00\dots 00 \rangle \\ &= \sum_n |c_0^n|^2 \langle n | m_i^z | n \rangle. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Dado o resultado acima, o termo  $|c_0^n|^2$  nos fornece a influência de cada auto-estados  $|n\rangle$  sobre o valor esperado da magnetização do spin no estado inicialmente produto  $|00\dots 00\rangle$ . A Fig. 5.9 nos mostra o valor de  $|c_0^n|^2$  para cada um dos  $2^8$  auto-estados. Podemos perceber que o valor de  $|c_0^n|^2$  é maior exatamente nos auto-estados da borda. E com isso, vemos que o resultado da mostrado na Fig. 5.8 deveria realmente ocorrer.

## 5.5 Discussão

Nossos resultados numéricos mostraram que existe uma transição térmico-MBL em grafos chimera. O ponto crítico de tal transição depende da densidade de energia do estado, como mostrado na Fig. 5.7. Estados na borda do espectro possuem pontos críticos  $\delta J \approx 2,0$ , o menor ponto crítico que encontramos, assim, todos os auto-estados estão na fase térmica para  $\delta J < 2,0$ . Por outro lado, para  $\delta J > 5,5$ , todos os auto-estados estão na fase MBL. Ressalta-se que tais

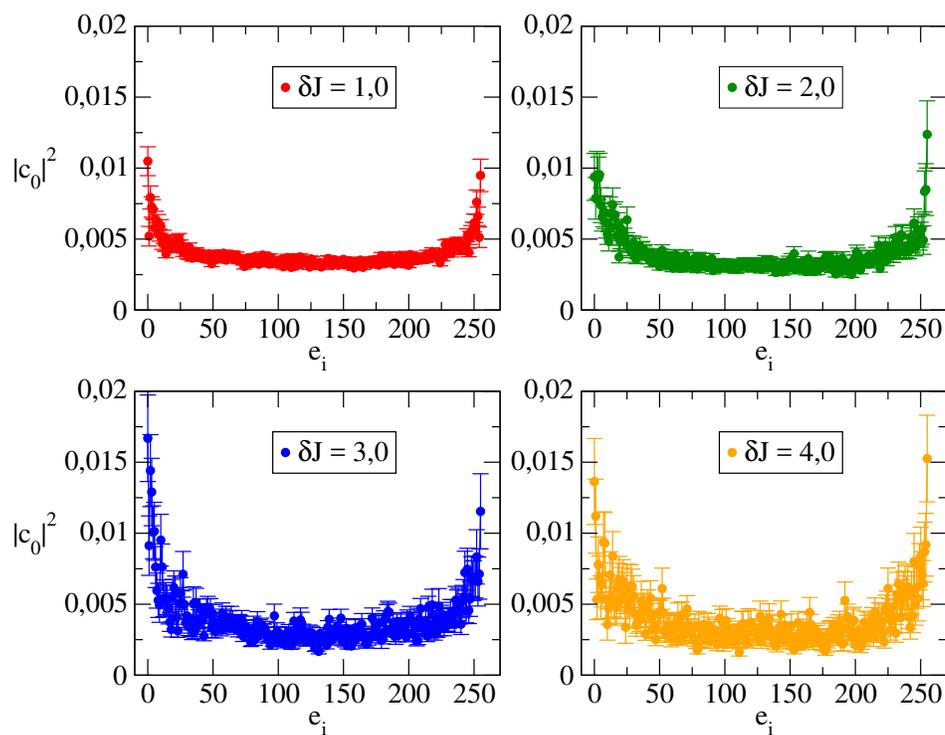


Figura 5.9: Componente  $|00 \dots 00\rangle$  de todos os auto-estados do hamiltoniano (5.5). Tal componente é muito maior nos auto-estados pertencentes à borda do espectro.

resultados foram encontrados usando-se a entropia de emaranhamento, e sua variância, entre as metades da rede, como inicialmente discutido em Sec. 3.4.1.

Um dos objetivos desse capítulo foi fornecer uma conexão entre os resultados que obtivemos para uma hamiltoniano independente do tempo, Eq. (5.5), com uma proposta experimental a ser realizada no *annealer* quântico da D-Wave.

# Considerações Finais

Essa tese foi baseada em três tópicos relacionados à transição térmico-MBL em cadeias de spin-1/2:

- (i) Propor uma nova forma de se obter o ponto crítico da transição térmico-MBL na cadeia de Heisenberg 1-dimensional com um campo externo aleatório, tal abordagem baseou-se na aplicação de correlações de um e dois pontos da cadeia, Cap. 3;
- (ii) Analisar a dinâmica de tais correlações nas fases térmica e MBL, ainda no modelo de Heisenberg, Cap. 4;
- (iii) Verificar a existência da transição térmico-MBL em grafos chimera, bem como a determinação do seu ponto crítico, e analisar uma grandeza cuja dinâmica seja influenciada pelas fases e possa ser medida no *annealer* quântico da D-Wave, Cap. 5.

No Cap. 3 foi mostrado que nossa abordagem produziu resultados bastante condizentes com os já existentes na literatura, porém, com a vantagem de ser um método muito mais simples de se obter o ponto crítico. Com o emaranhamento global, através do colapso das curvas, obtemos o ponto crítico  $h_c \approx 3,8$ , e com as correlações geométricas, através da extrapolação para o limite termodinâmico, obtemos pontos críticos dentro do intervalo  $[3, 4]$ . Tais resultados estão na Ref. [51].

Os resultados apresentados no Cap. 4 mostraram que as fases térmica e MBL influenciam de maneira diferente a dinâmica do emaranhamento global, mesmo para cadeias pequenas. Baseados nos resultados, podemos afirmar que na fase térmica o emaranhamento global se espalha mais rapidamente do que na fase MBL. Já para a dinâmica da discórdia geométrica, não fomos

capazes de diferenciar as fases através da dinâmica. Isso pode ser provocado pelo pequeno tamanho das cadeias que analisamos. Assim, apenas simulações para tamanhos maiores da cadeia poderão confirmar ou não esses resultados parciais que obtivemos.

O modelo e a abordagem usados no Cap. 5 foram um pouco diferentes do que os usados nos capítulos anteriores. Usando a entropia de emaranhamento, e sua variância em relação às realizações de desordem, fomos capazes de encontrar os pontos críticos para vários auto-estados do Hamiltoniano. Nossa análise também foi capaz de estudar a evolução do valor esperado da magnetização de um spin da cadeia em relação a um estado inicialmente produto. Tal quantidade será medida no *annealer* quântico da D-Wave, e, mesmo que os nossos resultados tenham sido obtidos para uma sistema muito mais simples do que o sistema real da D-Wave, demos argumentos plausíveis de que tais resultados devem ser similares.

Assim, temos algumas perspectivas imediatas em relação à esse trabalho. A primeira é analisar a dinâmica de correlações para cadeias maiores. Isso pode ser feito através de técnicas numéricas mais sofisticadas, como t-DRMG [20]. A segunda diz respeito à realização experimental do que foi abordado no Cap. 5. Além dessas, temos a perspectiva de estender várias análises discutidas aqui para sistemas abertos, levando-se em consideração a decoerência, via modelagens através de Hamiltonianos complexos ou de equações mestres locais.

# Apêndice A

## Teorema adiabático

Seja um sistema quântico fechado, cujo Hamiltoniano é  $H(t)$ . A dinâmica do estado  $|\psi(t)\rangle$  que descreve tal sistema é dada pela equação de Schrödinger

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle , \quad (\text{A.1})$$

cujas solução geral pode ser escrita da seguinte forma

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-i\int_0^t dt' \epsilon_n(t')} |E_n(t)\rangle , \quad (\text{A.2})$$

em que  $\epsilon_n(t)$  e  $|E_n(t)\rangle$  são, respectivamente, as auto-energias e os auto-estados, não-degenerados, assim

$$H(t)|E_n(t)\rangle = \epsilon_n(t)|E_n(t)\rangle . \quad (\text{A.3})$$

Assim, para determinarmos a dinâmica do sistema, temos que determinar  $c(t)$ . Para tal, vamos substituir a Eq. (A.2) na Eq. (A.1). Fazendo isso ficamos com

$$\begin{aligned} \sum_j \left[ \dot{c}_j(t) |E_j(t)\rangle - c_j(t) \epsilon_j(t) |E_j(t)\rangle + c_j(t) |\dot{E}_j(t)\rangle \right] e^{-i\int_0^t dt' \epsilon_j(t')} \\ = - \sum_j c_j(t) \epsilon_j(t) |E_j(t)\rangle e^{-i\int_0^t dt' \epsilon_j(t')} , \end{aligned}$$

perceba que o segundo termo do lado esquerdo cancela ao termo do lado direito, então, ao multiplicarmos por  $\langle E_k(t) |$  pela esquerda podemos escrever

$$\sum_j \left[ \dot{c}_j(t) \langle E_k(t) | E_j(t) \rangle e^{-i\int_0^t dt' \epsilon_j(t')} + c_j(t) \langle E_k(t) | \dot{E}_j(t) \rangle e^{-i\int_0^t dt' \epsilon_j(t')} \right] = 0 ,$$

como  $\langle E_k(t)|E_j(t)\rangle = \delta_{kj}$ , ficamos com

$$\begin{aligned}\dot{c}_k(t) &= -\sum_j c_j(t)\langle E_k(t)|\dot{E}_j(t)\rangle e^{-i\int_0^t dt' g_{jk}(t')} \\ &= -c_j(t)\langle E_k(t)|\dot{E}_k(t)\rangle - \sum_{j\neq k} c_j(t)\langle E_k(t)|\dot{E}_j(t)\rangle e^{-i\int_0^t dt' g_{jk}(t')}\end{aligned}\quad (\text{A.4})$$

em que  $g_{jk}(t) = \epsilon_j(t) - \epsilon_k(t)$  é o *gap* de energia entre os níveis de energia  $j$  e  $k$  no instante de tempo  $t$ .

Agora vamos derivar a Eq. (A.3), assim

$$\begin{aligned}\dot{H}(t)|E_j(t)\rangle + H(t)|\dot{E}_j(t)\rangle &= \dot{\epsilon}_j(t)|E_j(t)\rangle + \epsilon_j(t)|\dot{E}_j(t)\rangle \\ \langle E_k(t)|\dot{H}(t)|E_j(t)\rangle + \langle E_k(t)|H(t)|\dot{E}_j(t)\rangle &= \dot{\epsilon}_j(t)\langle E_k(t)|E_j(t)\rangle + \epsilon_j(t)\langle E_k(t)|\dot{E}_j(t)\rangle \\ \langle E_k(t)|\dot{H}(t)|E_j(t)\rangle + \epsilon_k(t)\langle E_k(t)|\dot{E}_j(t)\rangle &= 0 + \epsilon_j(t)\langle E_k(t)|\dot{E}_j(t)\rangle \\ (\epsilon_j(t) - \epsilon_k(t))\langle E_k(t)|\dot{E}_j(t)\rangle &= \langle E_k(t)|\dot{H}(t)|E_j(t)\rangle \\ \therefore \langle E_k(t)|\dot{E}_j(t)\rangle &= \frac{\langle E_k(t)|\dot{H}(t)|E_j(t)\rangle}{g_{jk}(t)},\end{aligned}\quad (\text{A.5})$$

em que assumimos que  $j \neq k$ . Substituindo a Eq. (A.5) em Eq. (A.4) podemos escrever

$$\dot{c}_k(t) = -c_j(t)\langle E_k(t)|\dot{E}_k(t)\rangle - \sum_{j\neq k} c_j(t) \frac{\langle E_k(t)|\dot{H}(t)|E_j(t)\rangle}{g_{jk}(t)} e^{-i\int_0^t dt' g_{jk}(t')}. \quad (\text{A.6})$$

Agora, iremos nos restringir a evoluções adiabáticas. A evolução adiabática é aquela em que os auto-estados instantâneos do Hamiltoniano evoluem independentemente, então, se o sistema é preparado em um auto-estado do Hamiltoniano  $|E_j(t = t')\rangle$  no instante  $t = t'$ , num instante posterior  $t = t''$ , o sistema estará no auto-estado  $|E_j(t = t'')\rangle$ , ou seja, não existem transições entre níveis de energia durante a evolução adiabática.

Analisando a Eq. (A.6), vemos que o segundo termo é responsável pela transição de níveis, assim, uma condição para que a evolução seja adiabática é dada por

$$\max_{0 < t < T} \frac{\langle E_k(t)|\dot{H}(t)|E_j(t)\rangle}{g_{jk}(t)} \ll 1 \quad \forall \quad k, j. \quad (\text{A.7})$$

Tal relação é conhecida como a *condição de adiabaticidade sobre o Hamiltoniano*. Porém, no nosso caso, uma condição sobre o tempo é mais útil do que uma condição sobre o hamiltoniano.

Para encontrar tal relação, vamos voltar para a Eq. (A.6) e notar que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[ c_k(t) e^{\xi_k(t)} \right] &= \dot{c}_k(t) e^{\xi_k(t)} + c_k(t) \frac{d\xi_k(t)}{dt} e^{\xi_k(t)} \\ &= \dot{c}_k(t) e^{\xi_k(t)} + c_k(t) \langle E_k(t) | \dot{E}_k(t) \rangle e^{\xi_k(t)} \\ \therefore \dot{c}_k(t) &= e^{-\xi_k(t)} \frac{d}{dt} \left[ c_k(t) e^{\xi_k(t)} \right] - c_k(t) \langle E_k(t) | \dot{E}_k(t) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

em que  $\xi_k(t) = \int_0^t dt' \langle E_k(t') | \dot{E}_k(t') \rangle$ . Substituindo na Eq. (A.6) ficamos com

$$\frac{d}{dt} \left[ c_k(t) e^{\xi_k(t)} \right] = - \sum_{j \neq k} c_j(t) e^{\xi_k(t)} \frac{\langle E_k(t) | \dot{H}(t) | E_j(t) \rangle}{g_{jk}(t)} e^{-i \int_0^t dt' g_{jk}(t')}.$$

Agora vamos fazer a seguinte mudança de variáveis  $s = t/T$  na equação acima, em que  $T$  é o tempo total da evolução

$$\frac{d}{ds} \left[ c_k(s) e^{\xi_k(s)} \right] = - \sum_{j \neq k} c_j(s) e^{\xi_k(s)} \frac{\langle E_k(s) | \frac{H(s)}{ds} | E_j(s) \rangle}{g_{jk}(s)} e^{-iT \int_0^s ds' g_{jk}(s')},$$

integrando em  $s$

$$\begin{aligned} \int_0^s ds' \frac{d}{ds'} \left[ c_k(s') e^{\xi_k(s')} \right] &= - \sum_{j \neq k} \int_0^s ds' c_j(s') e^{\xi_k(s')} \frac{\langle E_k(s') | \frac{H(s')}{ds'} | E_j(s') \rangle}{g_{jk}(s')} e^{-iT \int_0^{s'} ds'' g_{jk}(s'')} \\ c_k(s) e^{\xi_k(s)} - c_k(0) &= - \sum_{j \neq k} \int_0^s ds' e^{\xi_k(s')} c_j(s') \frac{\langle E_k(s') | \frac{H(s')}{ds'} | E_j(s') \rangle}{g_{jk}(s')} e^{-iT \int_0^{s'} ds'' g_{jk}(s'')}. \end{aligned}$$

Escrevendo a equação acima em termos do parâmetro

$$F_{jk}(s) = c_j e^{\xi_k(s)} \langle E_k(s) | \frac{H(s)}{ds} | E_j(s) \rangle$$

ficamos com

$$c_k(s) e^{\xi_k(s)} = c_k(0) - \sum_{j \neq k} \int_0^s ds' \frac{F_{jk}(s')}{g_{jk}(s')} e^{-iT \int_0^{s'} ds'' g_{jk}(s'')}. \quad (\text{A.9})$$

Notando que

$$\frac{F_{jk}(s)}{g_{jk}(s)} e^{-iT \int_0^s ds' g_{jk}(s')} = \frac{i}{T} \left[ \frac{d}{ds} \left( \frac{F_{jk}(s)}{g_{jk}^2(s)} e^{-iT \int_0^s ds' g_{jk}(s')} \right) - \frac{d}{ds} \left( \frac{F_{jk}(s)}{g_{jk}^2(s)} \right) e^{-iT \int_0^s ds' g_{jk}(s')} \right]$$

a Eq. (A.9) torna-se

$$\begin{aligned} c_k(s) e^{\xi_k(s)} &= c_k(0) - \frac{i}{T} \sum_{j \neq k} \left[ \frac{F_{jk}(s)}{g_{jk}^2(s)} e^{-iT \int_0^s ds' g_{jk}(s')} - \frac{F_{jk}(0)}{g_{jk}^2(0)} \right. \\ &\quad \left. - \int_0^s ds' \frac{F_{jk}(s')}{g_{jk}^2(s')} e^{-iT \int_0^{s'} ds'' g_{jk}(s'')} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Usando o lema de Riemann-Lebesgue na integral da equação acima

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^s ds' \frac{F_{jk}(s')}{g_{jk}^2(s')} e^{-iT \int_0^{s'} ds'' g_{jk}(s'')} \rightarrow 0, \quad (\text{A.11})$$

assim a Eq. (A.10) torna-se

$$c_k(s) e^{\xi_k(s)} = c_k(0) - \frac{i}{T} \sum_{j \neq k} \left( \frac{F_{jk}(s)}{g_{jk}^2(s)} e^{-iT \int_0^s ds' g_{jk}(s')} - \frac{F_{jk}(0)}{g_{jk}^2(0)} \right). \quad (\text{A.12})$$

Na Eq. (A.12) temos que o termo  $F_{jk}(s)$  é responsável pelas transições entre níveis, assim, se o tempo de evolução total  $T$  for suficientemente grande, tais transições não ocorrerem, e a evolução é adiabática. Portanto, a *condição de adiabaticidade sobre o tempo de evolução* é dada por

$$T \gg \max_{0 < s < 1} \left| \frac{F_{jk}(s)}{g_{jk}^2(s)} \right| \quad \forall \quad k, j. \quad (\text{A.13})$$

Essa é a generalização da condição mencionada no Cap. 5.

# Referências Bibliográficas

- [1] P. W. Anderson, Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [2] L. Fleishman e P. W. Anderson, Interactions and the Anderson Transition. *Phys. Rev. B* **21**, 2366 (1980).
- [3] D. L. Shepelyansky, Coherent Propagation of Two Interacting Particles in a Random Potential, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2607 (1994).
- [4] B. L. Altshuler *et al.*, Quasiparticle Lifetime in a Finite System: A Nonperturbative Approach. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2803 (1997).
- [5] P. Jacquod e D. L. Shepelyansky, Emergence of Quantum Chaos in Finite Interacting Fermi Systems. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1837 (1997).
- [6] B. Georgeot e D. L. Shepelyansky, Breit-Wigner Width and Inverse Participation Ratio in Finite Interacting Fermi Systems. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4365 (1997).
- [7] B. Georgeot e D. L. Shepelyansky, Integrability and Quantum Chaos in Spin Glass Shards. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5129 (1998).
- [8] I. V. Gornyi *et al.*, Interacting Electrons in Disordered Wires: Anderson Localization and Low- $T$  Transport. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 206603 (2005).
- [9] D. Basko *et al.*, Metal-Insulator Transition in a Weakly Interacting Many-Electron System with Localized Single-Particle States. *Ann. Phys.* **321**, 1126 (2006).

- [10] D. A. Abanin e Zlatko Papić, Recent Progress in Many-Body Localization. *Ann. Phys. (Berlin)* **529**, N°. 7, 1700169 (2017).
- [11] R. Nandkishore e D. A. Huse, Many-Body Localization and Thermalization in Quantum Statistical Mechanics. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6**, 15 (2015).
- [12] L. F. Santos *et al.*, Entanglement versus Chaos in Disordered Spin Chains. *Phys. Rev. A* **69**, 042304 (2004).
- [13] W. G. Brown *et al.*, Quantum Chaos, Delocalization, and Entanglement in Disordered Heisenberg Models. *Phys. Rev. E* **77**, 021106 (2008).
- [14] I. L. Aleiner *et al.*, A Finite-Temperature Phase Transition for Disordered Weakly Interacting Bosons in One Dimension. *Nat. Phys.* **6**, 900 (2010).
- [15] P. Jurcevic *et al.*, Quasiparticle Engineering and Entanglement Propagation in a Quantum Many-Body System. *Nature* **511**, 202 (2014).
- [16] J. Eisert *et al.*, Quantum Many-Body Systems Out of Equilibrium. *Nat. Phys.* **11**, 124 (2015).
- [17] M. Schreiber *et al.*, Observation of Many-Body Localization of Interacting Fermions in a Quasirandom Optical Lattice. *Science* **349**, 842 (2015).
- [18] D. A. Huse *et al.*, Localization-Protected Quantum Order. *Phys. Rev. B* **88**, 014206 (2013).
- [19] V. Oganesyan e D. A. Huse, Localization of Interacting Fermions at High Temperature. *Phys. Rev. B* **75**, 155111 (2007).
- [20] M. Znidaric *et al.*, Many-Body Localization in the Heisenberg  $XXZ$  Magnet in a Random Field. *Phys. Rev. B* **77**, 064426 (2008).
- [21] C. Monthus e T. Garel, Many-Body Localization Transition in a Lattice Model of Interacting Fermions: Statistics of Renormalized Hoppings in Configuration Space. *Phys. Rev. B* **81**, 134202 (2010).

- [22] T. C. Berkelbach e D. R. Reichman, Conductivity of Disordered Quantum Lattice Models at Infinite Temperature: Many-Body Localization. *Phys. Rev. B* **81**, 224429 (2010).
- [23] L. F. Santos, e M. Rigol, Localization and the Effects of Symmetries in the Thermalization Properties of One-Dimensional Quantum Systems. *Phys. Rev. E* **82**, 031130 (2010).
- [24] A. Pal e D. A. Huse, Many-Body Localization Phase Transition. *Phys. Rev. B* **82**, 174411 (2010).
- [25] E. Canovi *et al.*, Quantum Quenches, Thermalization, and Many-Body Localization. *Phys. Rev. B* **83**, 094431 (2011).
- [26] F. Buccheri *et al.*, Structure of Typical States of a Disordered Richardson Model and Many-Body Localization. *Phys. Rev. B* **84**, 094203 (2011).
- [27] E. Cuevas *et al.*, Level Statistics of Disordered Spin-1/2 Systems and Materials with Localized Cooper Pairs. *Nat. Commun.* **3**, 1128 (2012).
- [28] R. Berkovits, Entanglement Entropy in a One-Dimensional Disordered Interacting System: The Role of Localization. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 176803 (2012).
- [29] J. H. Bardarson *et al.*, Unbounded Growth of Entanglement in Models of Many-Body Localization. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 017202 (2012).
- [30] E. Khatami *et al.*, Quantum Quenches in Disordered Systems: Approach to Thermal Equilibrium without a Typical Relaxation Time. *Phys. Rev. E* **85**, 050102(R) (2012).
- [31] M. Serbyn *et al.*, Universal Slow Growth of Entanglement in Interacting Strongly Disordered Systems. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 260601 (2013).
- [32] M. Serbyn *et al.*, Local Conservation Laws and the Structure of the Many-Body Localized States. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 127201 (2013).
- [33] S. Iyer *et al.*, Many-body Localization in a Quasiperiodic System. *Phys. Rev. B* **87**, 134202 (2013).

- [34] J. A. Kjäll *et al.*, Many-Body Localization in a Disordered Quantum Ising Chain. *Phys. Rev. Lett.* **113**, 107204 (2014).
- [35] M. Serbyn *et al.*, Quantum Quenches in the Many-Body Localized Phase. *Phys. Rev. B* **90**, 174302 (2014).
- [36] K. Agarwal *et al.*, Anomalous Diffusion and Griffiths Effects Near the Many-Body Localization Transition. *Phys. Rev. Lett.* **114**, 160401 (2015).
- [37] D. J. Luitz *et al.*, Many-Body Localization Edge in the Random-Field Heisenberg Chain. *Phys. Rev. B* **91**, 081103(R) (2015).
- [38] R. Vasseur *et al.*, Quantum Revivals and Many-Body Localization. *Phys. Rev. B* **91**, 140202(R) (2015).
- [39] M. Schiulaz *et al.*, Dynamics in Many-Body Localized Quantum Systems without Disorder. *Phys. Rev. B* **91**, 184202 (2015).
- [40] E. J. Torres-Herrera e L. F. Santos, Dynamics at the Many-Body Localization Transition. *Phys. Rev. B* **92**, 014208 (2015).
- [41] J. Goold *et al.*, Total Correlations of the Diagonal Ensemble Herald the Many-Body Localization Transition. *Phys. Rev. B* **92**, 180202(R) (2015).
- [42] M. H. Fischer *et al.*, Dynamics of a Many-Body-Localized System Coupled to a Bath. *Phys. Rev. Lett.* **116**, 160401 (2016).
- [43] D. J. Luitz *et al.*, Extended Slow Dynamical Regime Close to the Many-Body Localization Transition. *Phys. Rev. B* **93**, 060201(R) (2016).
- [44] S. Bera e A. Lakshminarayan, Local Entanglement Structure Across a Many-Body Localization Transition. *Phys. Rev. B* **93**, 134204 (2016).
- [45] F. Iemini *et al.*, Signatures of Many-Body Localization in the Dynamics of Two-Site Entanglement. *Phys. Rev. B* **94**, 214206 (2016).

- [46] R. Singh *et al.*, Signatures of the Many-Body Localization Transition in the Dynamics of Entanglement and Bipartite Fluctuations. *New J. Phys.* **18**, 023046 (2016).
- [47] E. Mascarenhas *et al.*, Nonequilibrium Localization and the Interplay Between Disorder and Interactions. *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 195602 (2016).
- [48] G. D. Tomasi *et al.*, Quantum Mutual Information as a Probe for Many-Body Localization. *Phys. Rev. Lett.* **118**, 016804 (2017).
- [49] V. Khemani *et al.*, Critical Properties of the Many-Body Localization Transition. *Phys. Rev. X* **7**, 021013 (2017).
- [50] C. Xu e M. G. Vavilov, Response to a Local Quench of a System Near Many-Body Localization Transition. *Phys. Rev. B* **95**, 085139 (2017).
- [51] J. L. C. da C. Filho *et al.*, Many-Body Localization Transition Through Pairwise Correlations. *Phys. Rev. B* **96**, 014204 (2017).
- [52] Z.-C. Yang *et al.*, Entanglement Complexity in Quantum Many-Body Dynamics, Thermalization, and Localization. *Phys. Rev. B* **96**, 020408(R) (2017).
- [53] M. C. Bañuls *et al.*, Dynamics of Quantum Information in Many-Body Localized Systems. *Phys. Rev. B* **96**, 174201 (2017).
- [54] G. Biroli e M. Tarzia, Delocalized Glassy Dynamics and Many-Body Localization. *Phys. Rev. B* **96**, 201114(R) (2017).
- [55] O. L. Acevedo *et al.*, Exploring Many-Body Localization and Thermalization Using Semi-classical Methods. *Phys. Rev. A* **96**, 033604 (2017).
- [56] E. J. Torres-Herrera e L. F. Santos, Extended Nonergodic States in Disordered Many-Body Quantum Systems. *Ann. Phys. (Berlin)* **529**, 1600284 (2017).
- [57] P. T. Brown *et al.*, Spin-imbalance in a 2D Fermi-Hubbard system. *Science* **357**, 1385 (2017)

- [58] J. Smith *et al.*, Many-Body Localization in a Quantum Simulator with Programmable Random Disorder. *Nat. Phys.* **12**, 907 (2016).
- [59] J.-y. Choi *et al.*, Exploring the Many-Body Localization Transition in Two Dimensions. *Science* **352**, 1547 (2016).
- [60] J. Zhang *et al.*, Observation of a Discrete Time Crystal. *Nature* **543**, 217 (2017).
- [61] P. Bordia *et al.*, Periodically Driving a Many-Body Localized Quantum System. *Nat. Phys.* **13**, 460 (2017).
- [62] P. Bordia *et al.*, Probing Slow Relaxation and Many-Body Localization in Two-Dimensional Quasiperiodic Systems. *Phys. Rev. X* **7**, 041047 (2017).
- [63] H. P. Lüschen *et al.*, Signatures of Many-Body Localization in a Controlled Open Quantum System. *Phys. Rev. X* **7**, 011034 (2017).
- [64] P. Roushan *et al.*, Spectroscopic Signatures of Localization with Interacting Photons in Superconducting Qubits. *Science* **358**, 1175 (2017).
- [65] A. W. Sandvik, Computational Studies of Quantum Spin Systems. *AIP Conf. Proc.* **1297**, 135 (2010).
- [66] J. von Neumann, Beweis des Ergodensatzes und des H-Theorems. *Z. Phys.* **57**, 30 (1929), traduzido para o inglês em *Eur. Phys. J. H* **35**, 201 (2010).
- [67] L. D'Alessio *et al.*, From Quantum Chaos and Eigenstate Thermalization to Statistical Mechanics and Thermodynamics. *Adv. Phys.* **65**, 239 (2016).
- [68] J. M. Deutsch, Quantum Statistical Mechanics in a Closed System. *Phys. Rev. A* **43**, 2046 (1991).
- [69] M. Srednicki, Chaos and Quantum Thermalization. *Phys. Rev. E* **50**, 888 (1994).
- [70] M. Rigol *et al.*, Thermalization and its Mechanism for Generic Isolated Quantum Systems. *Nature(London)* **452**, 854 (2008).

- [71] M. Rigol, Breakdown of Thermalization in Finite One-Dimensional Systems. *Phys. Rev. Lett.* **103**, 100403 (2009).
- [72] M. Rigol, Quantum Quenches and Thermalization in One-Dimensional Fermionic Systems. *Phys. Rev. A* **80**, 053607 (2009).
- [73] M. C. Bañuls *et al.*, Strong and Weak Thermalization of Infinite Nonintegrable Quantum Systems. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 050405 (2011).
- [74] A. C. Cassidy *et al.*, Generalized Thermalization in an Integrable Lattice System. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 140405 (2011).
- [75] S. Genway *et al.*, Thermalization of Local Observables in Small Hubbard Lattices. *Phys. Rev. A* **86**, 023609 (2012).
- [76] M. Marcuzzi *et al.*, Prethermalization in a Nonintegrable Quantum Spin Chain After a Quench. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 197203 (2013).
- [77] R. Steinigeweg *et al.*, Eigenstate Thermalization within Isolated Spin-Chain Systems. *Phys. Rev. E* **87**, 012118 (2013).
- [78] H. Kim *et al.*, Testing Whether All Eigenstates Obey the Eigenstate Thermalization Hypothesis. *Phys. Rev. E* **90**, 052105 (2014).
- [79] B. Bertini *et al.*, Prethermalization and Thermalization in Models with Weak Integrability Breaking. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 180601 (2015).
- [80] V. Alba, Eigenstate Thermalization Hypothesis and Integrability in Quantum Spin Chains. *Phys. Rev. B* **91**, 155123 (2015).
- [81] M. Rigol, Fundamental Asymmetry in Quenches Between Integrable and Nonintegrable Systems. *Phys. Rev. Lett.* **116**, 100601 (2016).
- [82] C. N. Yang e C. P. Yang, One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System". *Phys. Rev.* **150**, 321 (1966).

- [83] C. N. Yang e C. P. Yang, One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. II. Properties of the Ground-State Energy Per Lattice Site for an Infinite System. *Phys. Rev.* **150**, 327 (1966).
- [84] J. Preskill, Quantum Information and Physics: Some Future Directions. *J. Mod. Opt.* **47**, 127 (2000).
- [85] L. Amico *et al.*, Entanglement in Many-Body Systems. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
- [86] A. Osterloh *et al.*, Scaling of Entanglement Close to a Quantum Phase Transitions. *Nature (London)* **416**, 608 (2002).
- [87] T. Osborne e M. Nielsen, Entanglement in a Simple Quantum Phase Transition. *Phys. Rev. A* **66**, 032110 (2002).
- [88] G. Vidal *et al.*, Entanglement in Quantum Critical Phenomena. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- [89] L.-A. Wu *et al.*, Quantum Phase Transitions and Bipartite Entanglement. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 250404 (2004).
- [90] M. S. Sarandy, Classical Correlation and Quantum Discord in Critical Systems. *Phys. Rev. A* **80**, 022108 (2009).
- [91] R. Dillenschneider, Quantum Discord and Quantum Phase Transition in Spin Chains. *Phys. Rev. B* **78**, 224413 (2008).
- [92] A. Einstein *et al.*, Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?. *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
- [93] M. Nielsen e I. Chuang, Quantum Computation and Quantum Communication. Cambridge Univ. Press, Cambridge (2000).
- [94] J. I. Latorre e A. Riera, A Short Review on Entanglement in Quantum Spin Systems. *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504002 (2009).

- [95] C. H. Bennett *et al.*, Concentrating Partial Entanglement by Local Operations. *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).
- [96] D. A. Meyer e N. R. Wallach, Global Entanglement in Multiparticle Systems. *J. Math. Phys.* **43**, 4273 (2002).
- [97] G. Brennen, An Observable Measure of Entanglement for Pure States of Multi-Qubit Systems. *Quantum Inf. Comput.* **3**, 619 (2003).
- [98] A. Saguia *et al.*, Witnessing Nonclassical Multipartite States. *Phys. Rev. A* **84**, 042123 (2011).
- [99] H. Ollivier e W. H. Zurek, Quantum Discord: A Measure of the Quantumness of Correlations. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 017901 (2002).
- [100] K. Modi *et al.*, The Classical-Quantum Boundary for Correlations: Discord and Related Measures. *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1655 (2012).
- [101] A. Brodutch e K. Modi, Criteria for Measures of Quantum Correlations. *Quantum Inf. Comput.* **12**, 0721 (2012).
- [102] F. M. Paula *et al.*, Overcoming Ambiguities in Classical and Quantum Correlation Measures. *Europhys. Lett.* **108**, 10003 (2014).
- [103] F. Ciccarello *et al.*, Toward Computability of Trace Distance Discord. *New J. Phys.* **16**, 013038 (2014).
- [104] P. C. Obando *et al.*, Trace-Distance Correlations for  $X$  States and the Emergence of the Pointer Basis in Markovian and Non-Markovian Regimes. *Phys. Rev. A* **92**, 032307 (2015).
- [105] P. A. Lee e T. V. Ramakrishnan, Disordered Electronic Systems. *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
- [106] E. Abrahams *et al.*, Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).

- [107] F. Evers e A. D. Mirlin, Anderson Transitions. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1355 (2008).
- [108] D. S. Wiersma *et al.*, Localization of Light in a Disordered Medium. *Nature* **390**, 671 (1997).
- [109] F. Scheffold *et al.*, Localization or classical diffusion of light?. *Nature* **398**, 206 (1999).
- [110] M. Störzer *et al.*, Observation of the Critical Regime Near Anderson Localization of Light. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 063904 (2006).
- [111] T. Schwartz *et al.*, Transport and Anderson Localization in Disordered Two-Dimensional Photonic Lattices. *Nature* **446**, 52 (2007).
- [112] Y. Lahini *et al.*, Anderson Localization and Nonlinearity in One-Dimensional Disordered Photonic Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 013906 (2008).
- [113] R. Dalichaouch *et al.*, Microwave Localization by Two-Dimensional Random Scattering. *Nature* **354**, 53 (1991).
- [114] A. A. Chabanov *et al.*, Statistical Signatures of Photon Localization. *Nature* **404**, 850 (2000).
- [115] J. Billy *et al.*, Direct Observation of Anderson Localization of Matter Waves in a Controlled Disorder. *Nature (London)* **453**, 891 (2008).
- [116] G. Roati *et al.*, Anderson Localization of a Non-Interacting Bose-Einstein Condensate. *Nature (London)* **453**, 895 (2008).
- [117] J. Chabé *et al.*, Experimental Observation of the Anderson Metal-Insulator Transition with Atomic Matter Waves. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 255702 (2008).
- [118] V. Mastropietro, Localization of Interacting Fermions in the Aubry-André Model. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 180401 (2015).
- [119] J. Z. Imbrie, Diagonalization and Many-Body Localization for a Disordered Quantum Spin Chain. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 027201 (2016).

- [120] J. Z. Imbrie, On Many-Body Localization for Quantum Spin Chains. *J. Stat. Phys.* **163**, 998 (2016).
- [121] R. Berkovits e Y. Avishai, Localization in Fock Space: A Finite Size Scaling Hypothesis for Many Particle Excitation Statistics. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 568 (1998).
- [122] S. Sachdev, Quantum Phase Transitions, 2<sup>a</sup> ed., Cambridge University Press, Cambridge (2011).
- [123] R. Nandkishore *et al.*, Spectral Features of a Many-Body-Localized System Weakly Coupled to a Bath. *Phys. Rev. B* **90**, 064203 (2014).
- [124] S. Johri *et al.*, Many-body Localization in Imperfectly Isolated Quantum Systems. *Phys. Rev. Lett.* **114**, 117401 (2015).
- [125] M. Znidaric, Relaxation Times of Dissipative Many-Body Quantum Systems. *Phys. Rev. E* **92**, 042143 (2015).
- [126] E. Levi *et al.*, Robustness of Many-Body Localization in the Presence of Dissipation. *Phys. Rev. Lett.* **116**, 237203 (2016).
- [127] B. Everest *et al.*, Role of Interactions in a Dissipative Many-Body Localized System. *Phys. Rev. B* **95**, 024310 (2017).
- [128] J. M. Hickey *et al.*, Signatures of Many-Body Localisation in a System Without Disorder and the Relation to a Glass Transition. *J. Stat. Mech.*, 054047 (2016).
- [129] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York (1990).
- [130] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer-Verlag, New York (1989).
- [131] B. Sutherland, *Beautiful Models*, 1<sup>a</sup> ed., World Scientific, New Jersey (2005).
- [132] J. S. Caux e J. Mossel, Remarks on the Notion of Quantum Integrability. *J. Stat. Mech.*, 02023 (2011).

- [133] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, 1<sup>a</sup> ed., Springer-Verlag, Berlin (1991).
- [134] V. V. Flambaum e F. M. Izrailev, Statistical Theory of Finite Fermi Systems Based on the Structure of Chaotic Eigenstates. *Phys. Rev. E* **56**, 5144 (1997).
- [135] R. Vosk e E. Altman, Many-Body Localization in One Dimension as a Dynamical Renormalization Group Fixed Point. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 067204 (2013).
- [136] G. Refael e J. E. Moore, Entanglement Entropy of Random Quantum Critical Points in One Dimension. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 260602 (2004).
- [137] T. Werlang *et al.*, Quantum Correlations in Spin Chains at Finite Temperatures and Quantum Phase Transitions. *Phys. Rev. Lett.* **105**, 095702 (2010).
- [138] J. Maziero *et al.*, Long-Range Quantum Discord in Critical Spin Systems. *Phys. Lett. A* **376**, 1540 (2012).
- [139] V. Ros e M. Müller, Remanent Magnetization: Signature of Many-Body Localization in Quantum Antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.* **118**, 237202 (2017).
- [140] P. Calabrese e J. Cardy, Time Dependence of Correlation Functions Following a Quantum Quench. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 136801 (2006).
- [141] H. Kim e D. A. Huse, Ballistic Spreading of Entanglement in a Diffusive Nonintegrable System. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 127205 (2013).
- [142] E. Lieb *et al.*, Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Ann. Phys. (N.Y.)* **16**, 407 (1961).
- [143] P. Pfeuty, The One-Dimensional king Model with a Transverse Field. *Ann. Phys.* **57**, 79 (1970).
- [144] M. W. Johnson *et al.*, Quantum Annealing with Manufactured Spins. *Nature (London)* **473**, 194 (2011).
- [145] G. Parisi *et al.*, *Spin Glass Theory and Beyond*, 1<sup>a</sup> ed., World Scientific, Singapore (1987).

- [146] A. V. Aho, J. E. Hopcroft, e J. D. Ullman, *The Design and Analysis of Computer Algorithms*, 1<sup>a</sup> ed., Addison-Wesley, Massachusetts (1974).
- [147] M. R. Garey e D. S. Johnson, *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*, 1<sup>a</sup> ed., Freeman, San Francisco (1979).
- [148] S. Kirkpatrick *et al.*, Optimization by Simulated Annealing. *Science* **220**, 671 (1983).
- [149] S. Geman e D. Geman, Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images. *IEEE Trans. Pattern. Anal. Mach. Intell.* **6**, 721 (1984).
- [150] T. Kadowaki e H. Nishimori, Quantum Annealing in the Transverse Ising Model. *Phys. Rev. E* **58**, 5355 (1998).
- [151] G. E. Santoro *et al.*, Theory of Quantum Annealing of an Ising Spin Glass. *Science* **295**, 2427 (2002).
- [152] B. Heim *et al.*, Quantum versus Classical Annealing of Ising Spin Glasses. *Science* **348**, 215 (2015).
- [153] J. Brooke *et al.*, Quantum Annealing of a Disordered Magnet. *Science* **284**, 779 (1999).
- [154] M. Born e V. Fock, Beweis des Adiabatenatzes. *Zeit. für Phys.* **51**, 165 (1928).
- [155] T. Kato, On the Adiabatic Theorem of Quantum Mechanics. *J. Phys. Soc. Jpn.* **5**, 435 (1950).
- [156] A. Messiah, *Quantum mechanics*, 1<sup>a</sup> ed., North-Holland, Amsterdam (1962).
- [157] E. Farhi *et al.*, *Quantum computation by adiabatic evolution*, Preprint quant-ph/0001106 (2000).
- [158] E. Farhi *et al.*, A Quantum Adiabatic Evolution Algorithm Applied to Random Instances of an NP-Complete Problem. *Science* **292**, 472 (2001).
- [159] J. Marshall *et al.*, Thermalization, Freeze-out, and Noise: Deciphering Experimental Quantum Annealers. *Phys. Rev. Applied* **8**, 064025 (2017).