

Sistemas quânticos de spins desordenados

José Abel Hoyos Neto

20 de março de 2006

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN

Sistemas Quânticos de Spins Desordenados

JOSÉ ABEL HOYOS NETO

ORIENTADOR: EDUARDO MIRANDA

Este exemplar corresponde à redação final da tese de Doutorado defendida pelo aluno José Abel Hoyos Neto e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas - SP

Para meus irmãos Roberto, Neto, Victor e Ramona.

Agradecimentos

- Ao prof. Eduardo Miranda não só por cumprir de maneira ímpar o seu papel de orientador e educador, mas também por ter servido de modelo de erudição e principalmente por ter se tornado um grande amigo.
- Aos profs. Amir O. Caldeira, Antônio Rubens Brito de Castro, Eduardo Miranda, Fernando Cerdeira, Guillermo Cabrera, Marcus A. M. de Aguiar e Mário E. Fóglio por terem ministrado ótimos cursos de pós-graduação essenciais para a minha formação.
- Aos meus pais pelo constante apoio de minha escolha de carreira e por terem me dado a oportunidade de vir para a Unicamp.
- Aos meus tios João e Teresa por terem me acolhido e pelo auxílio no início de minha mudança para São Paulo.
- Aos meus colegas Pardal, Celso, Mineirim e Thiago pelas inúmeras e prazerosas discussões sobre Física.
- Aos meus colegas de futebol e ao grupo de dança Forró Brasil pelos momentos de amizade e descontração.
- À Thais por suas inúmeras contribuições,
- Aos meus colegas de república Donga, Márcio, Alexandre Ribeirão, Levenson, Félix, Raimundo Lora, Wagner, Diego, Alexandre Carioca, Júlio e Rogério pelo agradável convívio.
- Ao Instituto de Física Gleb Wataghin pela estrutura que possibilitou a realização dessa tese, em especial à CPG.
- À Carol por este último ano,

- E por fim, à Fapesp (processos 01/02987-0 e 03/00777-3) pelo apoio financeiro.

Epígrafe

“Jamais se deveria criticar o teórico quando se entrega a semelhante trabalho ou tachá-lo de fantasioso. É preciso dar valor a esta fantasia. Porque para ele representa o único itinerário que leva à meta.”

Albert Einstein em *Como vejo o mundo*.

“O curumim, antes de vestir as luvas cobertas por formigas-de-fogo, se despede de sua infância, e após dançar bravamente a noite inteira, resistindo à toda dor que lhe é infligida, morre no leito de sua companheira, e entra assim para vida adulta.”

Ritual da Tucandeira, cultura popular amazônica.

Resumo

O propósito desse trabalho é estudar o papel da desordem em sistemas de spins fortemente interagentes de baixa dimensionalidade. Do ponto de vista teórico, cadeias de spin são extremamente atrativas por apresentarem uma nova física de baixas energias que vem da competição entre o ordenamento magnético e as flutuações quânticas. A introdução de desordem, onipresente no contexto experimental, é um elemento que pode desestabilizar as fases puras dando origem a uma nova física. Essa é a motivação principal do estudo de seu papel. Neste trabalho nós estudamos 4 sistemas de spins antiferromagnéticos desordenados: (i) as escadas de spins-1/2 dos tipos 2 pernas e zig-zag, (ii) as cadeias isotrópicas de spins $SU(N)$, (iii) a cadeia anisotrópica de spins $SU(4)$, e (iv) revisitamos a cadeia de spins-1/2. O estudo destes sistemas foi realizado aplicando generalizações da técnica do grupo de renormalização no espaço real para desordem forte. No caso do primeiro sistema, nós mostramos que as escadas de spins sempre renormalizam em cadeias de spins muito bem conhecidas. A escada de 2 pernas renormaliza para uma cadeia de spins-1/2 dimerizada antiferromagnética desordenada e, portanto, possui duas fases. Para dimerização forte ou equivalentemente desordem fraca, o sistema se encontra na fase de Haldane onde há um “gap” e a desordem é irrelevante. Para dimerização fraca ou equivalentemente desordem forte, o “gap” de Haldane se fecha e o sistema se encontra numa fase de Griffiths onde as quantidades termodinâmicas são controladas por um expoente não universal denominado expoente dinâmico z . Em contraste, a escada zig-zag renormaliza ou para uma cadeia de spins-1/2 antiferromagnética desordenada ou para uma cadeia de spins com acoplamentos ferro e antiferromagnéticos desordenada. Se a desordem e a frustração são suficientemente fracas, a escada renormaliza para a primeira cadeia, caso contrário esta pertence à mesma classe de universalidade da segunda. Além disso, relacionamos o expoente dinâmico da cadeia de spins com acoplamentos ferro e antiferromagnéticos com a distribuição de ponto fixo desses acoplamentos. Finalmente, através de argumentos simples, consideramos dimerizações de acoplamentos correlacionados. Nesse caso, torna-se bem claro que a frustração é

responsável pelo surgimento de acoplamentos ferromagnéticos que põem a escada na bacia de atração do ponto fixo das cadeias com acoplamentos ferro e antiferromagnéticos. Com relação à cadeia $SU(N)$, desenvolvemos uma generalização do método do grupo de renormalização para desordem forte para uma cadeia isotrópica antiferromagnética de spins que pertencem à representações irredutíveis totalmente anti-simétricas do grupo $SU(N)$, com N maior ou igual a 2. Conseguimos resolver as equações de fluxo analiticamente e descobrimos que essas cadeias pertencem a uma nova classe de universalidade cujos pontos fixos são de desordem infinita e, por tal motivo, nossos resultados se tornam assintoticamente exatos. Próximo a esses pontos fixos, os expoentes característicos são universais, i. e., independentes da desordem inicial da cadeia, e dependem somente do posto N do grupo de simetria. Devido às similaridades entre as regras de aglomeração de spins quando da dizimação de uma cadeia de spins com acoplamentos ferro e antiferromagnéticos e da dizimação da cadeia isotrópica de spins $SU(N)$ no limite $N \rightarrow \infty$, fomos capazes de calcular analiticamente, através de expansões de $1/N$, a função correlação da primeira cadeia. Com relação à cadeia de spins $SU(4)$, modificamos a generalização do método de grupo de renormalização para levar em conta a anisotropia dos acoplamentos. Conseguimos determinar o diagrama de fases através de cálculos analíticos e numéricos. Todos os pontos fixos encontrados são universais e de desordem infinita, entretanto, os expoentes característicos dependem de uma maneira não trivial da anisotropia do sistema. Por fim, revisitamos a cadeia de spins-1/2 antiferromagnética. Calculamos a amplitude da função de correlação média e a relacionamos com a amplitude da entropia de emaranhamento da mesma. Além disso, argumentamos em favor da universalidade dessas amplitudes.

Abstract

The purpose of this thesis is the study of the role of quenched disorder in low-dimensional strongly interacting quantum spin systems. From the theoretical point of view, spin chains are extremely attractive due to their unconventional behavior that originates in the competition between magnetic ordering and quantum fluctuations. The introduction of disorder, ubiquitous in experimental realizations, is an element that can destabilize the clean phases giving rise to new physical behavior. That is the main motivation of this study. In this thesis, we study 4 random antiferromagnetic spin systems: (i) the spin-1/2 two-leg and zigzag ladders, (ii) the isotropic $SU(N)$ spin chains, (iii) the anisotropic $SU(4)$ spin chain, and (iv) we also revisit the spin-1/2 chain. For such a task, we use generalizations of the strong disorder real-space renormalization group method. Concerning the first systems, we show that the ladders are always renormalized to well-known spin chains. The two-leg ladder is renormalized to a random dimerized antiferromagnetic spin-1/2 chain, hence exhibiting two phases. For strong dimerization or equivalently weak disorder the system is in the gapful Haldane phase where disorder is irrelevant. Otherwise, the Haldane gap closes and the system is driven into a nonuniversal Griffiths phase, where the thermodynamical quantities are controlled by the dynamical exponent z . In contrast, the zigzag ladder is renormalized either to a random antiferromagnetic spin-1/2 chain or to a random spin chain with both ferro- and antiferromagnetic couplings. If the randomness and frustration are sufficiently weak, the ladder is renormalized to the former chain, but otherwise it belongs to the same universality class of the latter one. In addition, we related the dynamical exponent of the ferro- and antiferromagnetic spin chain with its fixed point coupling constant distributions. Moreover, through simple qualitative arguments, we determined the phase diagram of the zigzag ladder with correlated disorder. That calculation clearly showed that frustration is responsible for the appearance of ferromagnetic couplings, which place the system in the basin of attraction of the fixed point of the ferro- and antiferromagnetic spin chains. With respect to the $SU(N)$ spin chain, we developed a generalization of the

strong-disorder renormalization group method to the case of an antiferromagnetic isotropic spin chain whose spins belong to the totally antisymmetric irreducible representations of the $SU(N)$ group, with N greater than or equal to 2. We solved the flow equations analytically and found that such chains belong to a new universality class whose fixed point distributions are characterized by infinite disorder, rendering our results asymptotically exact. The characteristic exponents of these fixed points are universal, i. e., independent of the bare disorder, and depend only on the symmetry group rank. Due to the similarities of the spin clustering rules between the ferro- and antiferromagnetic spin chain and the isotropic $SU(N)$ spin chain in the limit of $N \rightarrow \infty$, we were able to analytically calculate, through a $1/N$ expansion, the mean correlation function of the former chain. In the case of the $SU(4)$ spin chain, we modified the generalization of the renormalization group method to take into account the coupling anisotropy. We determined the phase diagram through analytical and numerical calculations. All fixed points found are universal and of infinite-randomness type. However, the characteristic exponents depend in a nontrivial fashion on the anisotropy. Finally, we revisited the antiferromagnetic spin-1/2 chain. We calculated the amplitude of the mean correlation function and related it with the amplitude of the entanglement entropy of the chain. In addition, we gave arguments in favor of the universality of these amplitudes.

Sumário

1	Introdução	1
2	O método do grupo de renormalização	11
2.1	O método do grupo de renormalização e a cadeia de Heisenberg de spins-1/2	11
2.2	A cadeia de Heisenberg dimerizada	17
2.3	A cadeia de Heisenberg ferromagnética e antiferromagnética	21
3	As escadas de spins-1/2	31
3.1	O procedimento de renormalização	32
3.2	As escadas de duas pernas	34
3.2.1	O modelo	34
3.2.2	Resultados numéricos	36
3.2.3	Considerações finais	41
3.3	As escadas zig-zag	42
3.3.1	O modelo	42
3.3.2	Resultados numéricos	43
3.3.3	Considerações finais	49
3.4	Conclusões	52
4	As cadeias isotrópicas de spins $SU(N)$	55
4.1	O grupo $SU(N)$	57
4.2	O hamiltoniano	59
4.3	Generalização do Grupo de Renormalização	62
4.4	Aplicação do método do GR	65
4.4.1	As dizimações do grupo $SU(3)$	65
4.4.2	Distribuição de Ponto Fixo	67
4.5	A fase dos singletos aleatórios generalizada	72

4.5.1	Propriedades termodinâmicas	72
4.5.2	Funções de correlação	74
4.6	Características topológicas	77
4.6.1	Outras distribuições de ponto fixo	78
4.6.2	Robustez contra dimerização	79
4.6.3	Limite $N \rightarrow \infty$	80
4.7	Conclusões	82
5	A cadeia anisotrópica de spins SU(4)	85
5.1	O hamiltoniano	85
5.2	O grupo de renormalização	87
5.2.1	Primeiro caso	89
5.2.2	Segundo caso	91
5.2.3	Terceiro caso	93
5.2.4	Quarto caso	94
5.2.5	Demais casos	96
5.2.6	Resumo dos procedimentos de dizimação	98
5.3	O fluxo de renormalização	98
5.3.1	Cadeia isotrópica	99
5.3.2	Acoplamento intra-cadeias $J = 0$	101
5.3.3	Acoplamento intra-cadeias J fraco	102
5.3.4	Acoplamento inter-cadeia $K = 0$	103
5.3.5	Acoplamento inter-cadeia K fraco	103
5.3.6	Pequena anisotropia em torno do ponto $J = K$	105
5.3.7	Simulações numéricas	107
5.4	Considerações finais e conclusões	113
6	Revisitando a cadeia de Heisenberg	117
6.1	A função de correlação	118
6.1.1	Lei de escala da função de correlação média	118
6.1.2	Cálculo da correlação média	119
6.1.3	Simulações numéricas	127
6.2	A função de correlação e a entropia de emaranhamento	129
6.2.1	Cálculo da entropia de um sub-sistema segundo Refael e Moore	130
6.2.2	Cálculo alternativo da entropia de emaranhamento	133

6.3	Discussões pertinentes e conclusões	136
7	Conclusões	143
A	Derivação da equação de normalização	147
B	Casimir de uma tabela de Young em forma de Γ	149
C	Derivação das equações de renormalização	153
C.1	Renormalização em primeira ordem de teoria de perturbação	153
C.2	Renormalização em segunda ordem de teoria de perturbação	157
D	Equações de fluxo	163
D.1	Distribuição de ponto fixo	163
D.2	Estabilidade da distribuição de ponto fixo	165
D.3	Distribuição de comprimentos das conexões	167
D.4	Distribuição de ponto fixo com variáveis auxiliares	170
D.4.1	Caso assimétrico	171
D.4.2	Caso simétrico	172
E	Susceptibilidade magnética de um spin $SU(N)$	173
F	Distribuição de spins originais	175
F.1	Número médio de spins em um aglomerado	175
F.2	Distribuição do número de spins originais em um aglomerado	176
G	Modelo de Hubbard de duas bandas	181
H	Matrizes do grupo $SU(4)$	185
I	Emaranhamento de duas partículas de spins-1/2 em um singleto	191

Capítulo 1

Introdução

Sistemas quânticos interagentes de baixa dimensionalidade são objetos interessantes por apresentarem uma variedade exótica de fenômenos como ordem de quase longo alcance, invariância conforme, transições de fase a temperatura zero, estatística fracionária e ordem escondida entre outros [Fradkin 1991, Sachdev 1999]. Além disso, devido à simplicidade de seus espaços de fase, técnicas teóricas matematicamente muito bem estabelecidas podem ser desenvolvidas fornecendo um profundo entendimento da física envolvida em tais fenômenos. Destacam-se entre essas técnicas o “Ansatz” de Bethe [Bethe 1931], a bosonização [Miranda 2003] e o grupo de renormalização [Wilson 1974/75, Fisher 1974].

O ingrediente marcante dos sistemas de baixa dimensionalidade que os difere de suas contrapartidas em dimensões superiores são as flutuações quânticas. Em uma dimensão estas são responsáveis pela ausência de ordem de longo alcance em temperatura zero [Landau 1959], mas em contrapartida ordens escondidas podem existir a $T = 0$. É de grande interesse o entendimento do papel dessas flutuações na desestabilização das fases presentes em dimensões superiores. É nesse contexto que as cadeias de spin se tornam um sistema atrativo. Muito esforço teórico tem sido despendido sobre elas no intuito de esclarecer esse ponto e grandes progressos já foram obtidos. Por exemplo, um ferromagneto não pode existir em uma dimensão a $T = 0$ porque o ganho entrópico da formação de uma parede de domínio é maior que a perda energética de sua formação, que em uma dimensão é proporcional a ligação entre os poucos spins que a formam.

Em contraposição a esse grande esforço teórico, pouca realização experimental tem sido feita para confrontar as previsões teóricas. Felizmente esse cenário tem mudado com o advento de novas técnicas de construção de nanomateriais e tubos de carbono. E é nesse cenário que o papel desempenhado pela desordem deve ser bem entendido para a correta

interpretação dos resultados experimentais. Exemplos muito bem conhecidos da realização experimental da cadeia de Heisenberg antiferromagnética de spins-1/2 desordenada são os compostos orgânicos de transferência de carga “N-methyl-phenazinium tetracyanoquinodimethanide” (NMP-TCNQ), “quinolinium”-(TCNQ)₂, “acridinium”-(TCNQ)₂ e “phenazine”-(TCNQ) [Bulaesvkii 1972, Schegolev 1972]. Medidas experimentais apontavam uma dependência singular da susceptibilidade magnética com a temperatura em desacordo com a teoria de ondas de spins que prevê que a susceptibilidade deve ser uma constante (na ausência de desordem, o sistema é um líquido de spin de Luttinger [Haldane 1983]). Na época atribuiu-se à desordem nas constantes de acoplamento a responsabilidade por tal discordância, porém nenhuma explicação teórica satisfatória sobre o seu papel foi dada [Bulaesvkii 1972, Theodorou 1976]. Isso só se daria realmente à partir de 1979 quando Ma, Dasgupta e Hu propuseram um método de grupo de renormalização no espaço real para tratar o referido modelo [MDH 1979]. Apesar da equação de fluxo não ter sido resolvida analiticamente, simulações numéricas foram suficiente para explicar de modo irrefutável o comportamento singular da susceptibilidade magnética com a temperatura.

Em 1992, Doty e Fisher mostraram que a desordem é um operador relevante [Doty 1992] e, portanto, o ponto fixo que governa as propriedades de baixas energias das cadeias de Heisenberg de spins-1/2 antiferromagnéticas não é aquele descrito pela teoria de ondas de spin. Mais tarde, Fisher conseguiu resolver analiticamente as equações de fluxo e dessa forma determinou completamente as propriedades desse novo ponto fixo [Fisher 1992, Fisher 1994]. A principal característica deste é que a desordem do sistema torna-se cada vez maior à medida que o grupo de renormalização é iterado e tende ao infinito no limite infra-vermelho. Em uma linguagem mais simples, é como se as constantes de acoplamento do sistema seguissem uma distribuição infinitamente desordenada *em baixas temperaturas*. Tal fato, como será melhor abordado no próximo capítulo, confere ao método de renormalização a qualidade de ser assintoticamente exato [Fisher 1994]. Este é um resultado extremamente importante porque muito pouco se sabe sobre os sistemas desordenados. Excetuando o modelo de McCoy e Wu [McCoy 1968], não se conhece nenhum outro modelo interagente e desordenado que possua solução exata. Devido às quebras de simetria impostas pela desordem, quase nenhuma técnica teórica tão confiável quanto esta existe. É principalmente por esse motivo que iremos explorar tal técnica ao longo deste trabalho.

Antes de apresentarmos os sistemas que foram estudados nesse trabalho (que é um dos objetivos dessa introdução), devemos falar um pouco mais sobre esse método de grupo de renormalização para sistemas desordenados e suas aplicações em outros tipos de cadeias

de spins. O motivo para tal se dá porque muitos de nossos resultados se referem a essas cadeias e suas classes de universalidade.

Primeiramente vamos falar um pouco mais sobre a natureza do estado fundamental da cadeia de Heisenberg. Na estrutura do grupo de renormalização, este nada mais é do que uma coleção de pares de spin acoplados em estados de singleto [MDH 1979]. Tais spin estão acoplados de forma aleatória e podem estar separados por distâncias arbitrariamente longas. Existe ainda uma relação entre a magnitude do acoplamento, Ω , e a distância, L , que os separa, $\ln \Omega \sim -L^\psi$. A essa relação se dá o nome de escalonamento dinâmico ativado (“activated dynamical scaling” no original) com um expoente de tunelamento igual a $\psi = 1/2$. Como existem pares de spin que estão separados por distâncias que vão desde um parâmetro de rede até frações do tamanho da cadeia, a magnitude dos acoplamentos varia enormemente. Por isso dizemos que o sistema tem desordem infinita e os resultados são assintoticamente exatos (no cap. 2 retomaremos esse ponto com mais detalhes). Mais surpreendente é que a função correlação média spin-spin é de quase-longo alcance e decai com expoente igual a 2. Por fim, devido à natureza desse estado fundamental, chamou-se essa fase de singletos aleatórios [Doty 1992] (“random singlet phase” no original). Recentemente, mostrou-se que a entropia de emaranhamento dessa cadeia segue uma lei logarítmica, $c \ln L$, onde L é o tamanho do sub-sistema emaranhado com o resto da cadeia, com c sendo uma constante universal [Refael 2004, Lafflorencie, 2005]. Nós recalculamos a entropia de uma maneira alternativa onde relacionamos c com a amplitude da função de correlação média, c' . Da relação entre essas duas quantidades, extraímos características interessantes sobre o estado fundamental do sistema. Deixaremos essa discussão para o momento oportuno.

Após os trabalhos de Fisher sobre o grupo de renormalização de Ma, Dasgupta e Hu [Fisher 1992, Fisher 1994], um dos primeiros sistemas em que este foi aplicado foi a cadeia de Heisenberg de spins-1/2 antiferromagnética dimerizada na presença de desordem [Hyman 1996]. Neste modelo os acoplamentos pares e ímpares são variáveis aleatórias independentes que seguem distribuições diferentes. Mostrou-se que somente quando as distribuições são as mesmas é que o sistema se encontra na fase de singleto aleatório. Se as distribuições são muito próximas, ou seja, dimerização fraca (ou equivalentemente desordem forte), o sistema não tem “gap” de spin e as quantidades físicas são controladas por um expoente *não universal* denominado expoente dinâmico $z > 1$. Por exemplo, a relação entre as escalas de energia e comprimento é $\Omega \sim L^z$, a susceptibilidade magnética como função da temperatura diverge como lei de potência cujo expoente é $1 - 1/z$. A essa fase

denominou-se fase de Griffiths. Se as distribuições entre os acoplamentos pares e ímpares são muito diferentes, a desordem é irrelevante, ou seja, a física de baixas energias é aquela do sistema limpo. Um "gap" de spin (o "gap" de Haldane) é aberto e o sistema se torna dimerizado. Em ambas as fases a correlação média spin-spin é de curto alcance. Em ambos os casos, o estado fundamental basicamente é uma coleção de dímeros livres, e portanto a função correlação é de curto alcance.

Mais tarde, verificou-se que a aplicação do método de grupo de renormalização nas cadeias de Heisenberg antiferromagnéticas desordenadas de spins-1 era problemática [Boechat 1996], então se fez necessária uma implementação mais sofisticada do método. Duas implementações (melhoramentos) surgiram. Na primeira, considerava-se que os spins-1 são 2 spins-1/2 acoplados forte e ferromagneticamente [Hyman 1997, Monthus 1997, Damle 2002a] (consistente com a estrutura de sólido de ligação de valência da cadeia limpa, "valence bond solid" no original [AKLT 1987]), e na segunda, considerou-se a diagonalização de um cluster de 3 spins ao invés de 2 como era o usual [Saguia 2002]. Em ambos os casos, achou-se que o sistema possui 3 fases cujas transições são seqüencialmente dirigidas pela desordem. Desordem pequena é irrelevante. O "gap" de Haldane persiste e portanto o sistema se encontra na fase de Haldane. Para desordem intermediária, o "gap" é fechado e o sistema se encontra na fase de Griffiths não universal (caracterizada pelo expoente dinâmico z). E finalmente, para desordem grande, o sistema é levado para a fase universal do singlete aleatório com expoente dinâmico $\psi = 1/2$.

Aplicações para a cadeia de spins-3/2 usando o primeiro melhoramento do método (de acordo com a ref. [Monthus 1997]) foram feitas [Refael 2002]. A conclusão é de que o sistema possui duas fases universais dependentes da desordem. A primeira, para desordem pequena, é uma fase de singlete aleatório cujas excitações são de spins-1/2. (Na verdade é um estado de singlete aleatório de spins-1/2 envolto em um estado de sólido de ligação de valência de spins-1.) Para desordem grande, o sistema está numa fase de singlete aleatório com espectro de excitações de spins-3/2. Em ambas as fases o expoente dinâmico é igual a $\psi = 1/2$. Entretanto, no ponto crítico, acredita-se que $\psi = 1/4$ [Refael 2002, Damle 2002b], e está relacionado com peculiaridades de um ponto multicrítico. Tal expoente está intimamente relacionado com as cadeias de spin SU(4) estudadas por nós nesse trabalho como será abordado nos caps. 4 e 5. Este cenário está em perfeito acordo com o que se pensava na época sobre o fato de a desordem desestabilizar sistemas críticos unidimensionais. (A conjectura de Haldane diz que cadeias de spins inteiros tem espectros com "gap" enquanto as cadeias de spins semi-inteiros são críticas [Haldane 1983].)

Porém, tratamentos da cadeia de spins-3/2 pelo segundo melhoramento indicou que o sistema tem 3 fases análogas as da cadeia de spins-1, sendo que a fase de singlete aleatório só era alcançada para desordem inicial extremamente grande [Saguia 2003]. Simultaneamente, Carlon *et al.* [Carlon 2004], através de cálculos numéricos de DMRG, encontraram que desordem fraca é (marginalmente) irrelevante, consistente com os resultados reportados na ref. [Saguia 2003].

Outro importante sistema onde o grupo de renormalização para desordem forte foi aplicado é a cadeia de Heisenberg desordenada com acoplamentos que podem ser tanto ferromagnéticos quanto antiferromagnéticos. Realizações experimentais dessa cadeia são as ligas do tipo $\text{Sr}_3\text{CuPt}_{1-x}\text{Ir}_x\text{O}_6$ [Nguyen 1994], onde a concentração de acoplamentos ferromagnéticos, x , está simplesmente relacionada à presença dos íons de Ir. A generalização do método de grupo de renormalização para levar em conta os acoplamentos ferromagnéticos foi primeiramente realizada por Westerberg *et al.* [Westerberg 1995]. Através de um extenso estudo numérico, eles encontraram que em baixas energias a susceptibilidade magnética deve seguir a lei de Curie e a relação entre escalas de energia e comprimento segue uma lei de escalonamento dinâmico usual, $\Omega \sim L^z$,¹ onde z é universal (aproximadamente igual a 2,27) se a desordem é pequena, e não universal (maior que 2,27) em caso contrário. Além disso, sempre se verifica a presença de grandes momentos magnéticos no limite de baixas temperaturas. Por esse motivo essa fase é denominada fase de grandes spins (“large spin phase” no original) [Westerberg 1995]. Digno de nota é o fato de que as predições teóricas estão em acordo com as medidas experimentais [Nguyen 1996]. Como veremos em maiores detalhes no cap. 3, esta generalização para levar em conta acoplamentos ferromagnéticos é de extrema importância para o estudo das escadas de spins. Mais tarde, de modo impressionante, mostrou-se que a função correlação neste sistema deve cair com o logaritmo da distância [Hikihara 1999, Hoyos 2004b].

Muitos outros modelos de spins desordenados foram estudados utilizando essa técnica de grupo de renormalização e podem ser consultados em um recente artigo de revisão na ref. [Iglói 2005]. Até agora listamos aqueles que consideramos de maior interesse tanto para introduzir o método e o tipo de física envolvida nesses sistemas quanto para dar um mínimo de base necessária para a compreensão do nosso estudo sobre os sistemas que estudamos (listados à partir do próximo parágrafo). Para finalizar esse parágrafo, devemos citar apenas mais uma cadeia de spins: A cadeia de Ising no campo transversal desordenada [Fisher 1992]. Foi neste modelo que Fisher resolveu analiticamente as equações de fluxo

¹Na verdade, esta relação pode ser deduzida analiticamente uma vez obtida as distribuições de ponto fixo das constantes de acoplamento [Hoyos 2004a].

pela primeira vez e relacionou a física do ponto crítico deste com a cadeia de Heisenberg [Fisher 1994]. Além disso, fora do ponto crítico, o sistema se encontra numa fase de Griffiths que também pode ser relacionada com a fase de Griffiths da cadeia de Heisenberg dimerizada [Hyman 1996].

O primeiro sistema em que concentramos nossa atenção foram as escadas de spins-1/2 antiferromagnéticas do tipo 2 pernas e zig-zag. Recentemente, realizações experimentais desses sistemas têm sido reportadas na literatura. Por exemplo, os compostos $\text{Sr}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2\text{O}_3$ são realizações experimentais de escadas do tipo 2 pernas [Azuma 1997]. Outro grupo de compostos que formam escadas de spins são os seguintes óxidos de boratos: $\text{M}^{3+}\text{M}'^{2+}\text{OBO}_3$, $\text{M}^{3+}(\text{M}'^{2+})_2\text{O}_2\text{BO}_3$ e $\text{M}^{2+}\text{M}'^{2+}\text{B}_2\text{O}_5$ [Continentino 2005], onde M e M' são metais. Em todos os casos, esses compostos são altamente anisotrópicos e por isso o caráter unidimensional se torna relevante para uma faixa bem determinada de temperaturas. Com relação ao sistema limpo, sabe-se que as escadas de 2 pernas são objetos análogos à cadeia de spins-1. Ambos têm um "gap" de spin e apresentam um parâmetro de ordem escondida de longo alcance diferente de zero [Nijs 1989, Hida 1992, White 1996a]. Por outro lado, a escada do tipo zig-zag (também conhecida como o modelo $J_1 - J_2$ por ser topologicamente equivalente a uma cadeia de Heisenberg com acoplamentos entre primeiros, J_1 , e segundos vizinhos, J_2) possui uma transição de fase em $\Lambda = J_2/J_1 = \Lambda_c \approx 0.24$ [Haldane 1982]. Para $\Lambda < \Lambda_c$, o sistema não possui "gap" e se comporta como a cadeia de Heisenberg, no entanto para $\Lambda > \Lambda_c$, um "gap" de spin é aberto devido a uma dimerização espontânea do sistema. Somente para $\Lambda \rightarrow \infty$ a dimerização vai a zero e o sistema se torna sem "gap" novamente [White 1996b]. No entanto, na maioria dos sistemas citados acima, medidas de susceptibilidade magnética indicam uma dependência singular com a temperatura, novamente em desacordo com as previsões teóricas. (Nas fases com e sem "gap", a susceptibilidade deve ir a zero e tender a uma constante, respectivamente, quando a temperatura vai a zero.) Novamente devemos considerar o papel da desordem para o entendimento desta questão. Esta se faz onipresente tipicamente pela ação de impurezas fora da escada que distorcem localmente a estrutura da rede (e conseqüentemente, o valor da constante de acoplamento) sem afetar os spins que a formam.

Em 2002, Mélin *et al.* aplicou o método de Ma, Dasgupta e Hu para estudar diversas escadas de spins-1/2 antiferromagnéticas na presença de desordem [Mélin 2002]. O estudo se baseou exclusivamente no cálculo numérico do expoente dinâmico e as conclusões em relação às escadas em questão são as seguintes: A escada de 2 pernas possui uma transição de fase em temperatura zero dirigida pela desordem do sistema. Para desordem fraca, o

sistema se encontra na fase de Haldane (a mesma fase do sistema limpo) onde a desordem é irrelevante. Para desordem suficientemente forte o "gap" de Haldane é fechado e o expoente dinâmico é sempre maior do que 1 e dependente da desordem inicial, o que caracteriza uma fase de Griffiths, e portanto espera-se que a susceptibilidade magnética tenha uma dependência singular não universal com a temperatura. Com relação à escada zig-zag, os autores encontraram que o expoente dinâmico era sempre maior que 1 e não universal e concluíram que o sistema sempre se encontra numa fase de Griffiths. Simultaneamente, Yusuf e Yang estudaram a escada de 2 pernas utilizando o mesmo método de grupo de renormalização, porém, o estudo foi focado no cálculo numérico da susceptibilidade magnética e da função correlação spin-spin [Yusuf 2002]. Eles encontraram 2 fases diferentes em temperatura zero cuja transição é uma função da desordem. Para desordem pequena, a susceptibilidade vai a zero, caracterizando uma fase com "gap" de spin (a fase de Haldane). E para desordem grande a susceptibilidade diverge como lei de potência cujo expoente é não universal. Entretanto, em ambas as fases, a função correlação é de curto alcance com comprimento característico da ordem de dezenas de parâmetros de rede. Esses resultados estão em acordo com as conclusões obtidas por Mélin *et al* na ref. [Mélin 2002]. Mais tarde, Yusuf e Yang aplicaram o mesmo método para estudar a escada do tipo zig-zag [Yusuf 2003], porém com acoplamentos entre primeiros e segundos vizinhos correlacionados. O estudo foi baseado principalmente no cálculo numérico da susceptibilidade magnética e na verificação da formação de grandes momentos magnéticos no sistema. Para frustração suficientemente forte, se verifica que grandes momentos magnéticos e acoplamentos ferromagnéticos aparecem, bem como uma susceptibilidade do tipo lei de Curie. Dessa forma conclui-se que o sistema se encontra na fase de grandes momentos magnéticos (como na cadeia de spin com acoplamentos ferromagnéticos e anti-ferromagnéticos). Por outro lado, para frustração pequena, não se verifica a formação de momentos magnéticos diferentes dos próprios spins-1/2 e a susceptibilidade se comporta como na fase de singleto aleatório. Dessa maneira, conclui-se que o sistema possui duas fases, a do singleto aleatório e a de grandes momentos magnéticos. Tal conclusão está em desacordo com aquela de Mélin *et al.* na ref. [Mélin 2002]. Simultaneamente, nós aplicamos o mesmo método para estudar as duas escadas de spin em questão, porém focamos nossa atenção na estrutura topológica da cadeia ao longo do fluxo de renormalização e verificamos que, logo nos primeiros estágios do grupo de renormalização, enquanto a escala de energia ainda está no relativamente alta, acoplamentos de longo alcance são formados. E entretanto, à medida que o limitante de energia diminui estes renormalizam para zero.

Conseqüentemente, no ponto fixo só restavam acoplamentos entre primeiros vizinhos. Portanto, a nossa principal conclusão é que as escadas sempre renormalizam para cadeias de spins [Hoyos 2004a]. Com esse resultado simplificador, facilmente relacionamos a física de baixas energias dessas escadas com aquela já conhecida das cadeias de spins. As escadas do tipo duas pernas sempre renormalizam para uma cadeia de spins-1/2 dimerizada e as escadas do tipo zig-zag renormalizam ou para a cadeia antiferromagnética de spins-1/2 ou para a cadeia com acoplamentos antiferromagnéticos e ferromagnéticos. Voltaremos com mais detalhes a esse ponto no cap. 3. Por ora, adiantamos que nossas conclusões estão em acordo com as de Yusuf e Yang [Yusuf 2002, Yusuf 2003].

A segunda classe de sistemas que estudamos é mais exótica. São as cadeias antiferromagnéticas desordenadas cujas propriedades de rotação dos spins são governadas pelo grupo $SU(N)$, com $N \geq 2$. A seguir daremos várias motivações para o estudo destes. Coqblin e Schrieffer mostraram que as propriedades de transformação do hamiltoniano *magnético efetivo* que descreve a interação entre os momentos magnéticos de terras raras ou actinídeos, em alguns casos, são governadas pelo grupo $SU(N)$ [Coqblin 1969]. Por exemplo, para o Ce^{3+} $N = 6$, e Yb^{3+} $N = 8$. O Modelo de Hubbard com dupla degenerescência orbital no limite fortemente interagente e no preenchimento 1 (1 elétron por sítio) se reduzem ao modelo de Heisenberg de spins $SU(4)$ cuja representação é a fundamental [Yamashita 1998]. O papel da degenerescência orbital em algumas cadeias de pontos quânticos também parece ser muito importante. No preenchimento 2 e no limite fortemente interagente o modelo de Heisenberg de spins $SU(4)$ cuja representação é a auto-conjugada descreve o sistema [Onufriev 1999]. Recentemente tem se despertado o interesse por modelos de spin com degenerescência orbital [Li 1998, Azaria 1999]. Devido ao acoplamento spin-órbita, esses sistemas podem apresentar um aumento no grupo de simetria de $SU(2)$ para $SU(4)$. Tais sistemas devem então apresentar uma transição de fase em temperatura zero se a interação spin-órbita é aumentada. Além disso, técnicas de N infinito são freqüentemente empregadas no intuito de que a física envolvida em N pequeno seja capturada [Sachdev 1999]. Raramente se tem a possibilidade de estudar uma seqüência de problemas para todos os valores de N . Aqui tal possibilidade é realizada (como veremos no cap. 4). Estas basicamente são as motivações que nos levaram a estudar as cadeias isotrópicas de spins $SU(N)$ e as cadeias anisotrópicas de spin $SU(4)$, ambas antiferromagnéticas e desordenadas. Para tal, generalizamos o método de grupo de renormalização para levar em conta a simetria $SU(N)$ dos spins. Resolvendo analiticamente as equações de fluxo, descobrimos que as cadeias isotrópicas se encontram numa espécie de fase do singleto alea-

tório mas com o expoente dinâmico dependente do posto do grupo N [Hoyos 2004b]. Esse assunto será detalhadamente abordado no cap. 4. Com relação à cadeia $SU(4)$ anisotrópica, encontramos o diagrama de fases do sistema (em função da anisotropia e a desordem da mesma) resolvendo analiticamente a maioria das equações de fluxo, exceto para uma pequena região do espaço de parâmetros onde o estudo foi conduzido numericamente. Encontramos que o sistema possui uma transição de fase entre diferentes fases de singlete aleatório dirigida pela anisotropia [Hoyos 2005]. No capítulo 5, retomaremos esses resultados mais detalhadamente. Fechamos esse parágrafo enfatizando que tais resultados são extremamente interessantes porque eles apontam que, sem mesmo conhecer a física da fase limpa, esta deve ser completamente desestabilizada pela desordem.

O objetivo desse trabalho é estudar o papel da desordem em sistemas interagentes unidimensionais. Tal tarefa é feita através do uso da técnica de grupo de renormalização no espaço real para desordem forte, extremamente poderosa para o estudo desses tipos de sistemas por se valer da quebra de simetria translacional imposta pela desordem e das flutuações quânticas. No capítulo 2, introduzimos o método original de grupo de renormalização e suas generalizações e aplicações para outras cadeias de spin de relevância para o desenvolvimento do trabalho. No capítulo 3, reportamos o nosso estudo sobre as escadas de spins-1/2 antiferromagnéticas desordenadas do tipo 2 pernas e zig-zag. No capítulo 4, desenvolvemos a generalização do grupo de renormalização para levar em conta spins $SU(N)$, e reportamos nosso estudo sobre essas cadeias. No capítulo 5, aplicamos a generalização do grupo de renormalização descrita no capítulo anterior para a cadeia de spins $SU(4)$ anisotrópica antiferromagnética desordenada. No capítulo 6 calculamos a amplitude da função correlação da cadeia de spins-1/2 antiferromagnética desordenada e a relacionamos com a amplitude da entropia de emaranhamento. E por fim no capítulo 7, apresentamos as conclusões gerais do trabalho.

Queremos ainda enfatizar que nos cálculos aqui apresentados algumas constantes físicas fundamentais são definidas como a unidade. Estas são $k_B = \hbar = 1$. Este caracteriza o que os teóricos comumente chamam de sistema natural. Entretanto, não é uma tarefa difícil recuperá-las nos resultados aqui reportados.

Para finalizar essa introdução, enquadrámos na tabela 1.1 algumas abreviações e seus significados que serão comumente usadas ao longo do texto.

Os significados destas serão freqüentemente lembrados ao longo do texto, mas caso o leitor necessite, esta tabela torna-se uma fonte de rápida consulta.

Abreviação	Significado
GR	Grupo de renormalização
GRDF	GR para desordem forte
AF	Antiferromagnético(a)
FM	Ferromagnético(a)
PFDI	Ponto fixo de desordem infinita
RI	Representação irredutível

Tabela 1.1: Algumas abreviações e seus significados.

Capítulo 2

O método do grupo de renormalização

O principal objetivo deste capítulo é introduzir o método do grupo de renormalização para desordem forte.

Primeiramente, introduziremos o método como ele é atualmente utilizado na literatura. Tal tarefa será feita em conjunto com a sua aplicação no estudo da cadeia antiferromagnética de Heisenberg de spins-1/2 desordenada. O método como é introduzido na seção 2.1 é interpretado de uma maneira ligeiramente diferente daquela quando de sua introdução por Ma, Dasgupta e Hu em 1979 [MDH 1979]. Tal reinterpretação foi dada por Bhatt e Lee em 1982 [Bhatt 1982] e é reflexo do amadurecimento das idéias físicas por trás do mesmo.

Na seção 2.2, discutiremos os aspectos mais importantes da aplicação do método na cadeia de Heisenberg antiferromagnética com dimerização forçada [Hyman 1996]. E por fim, na seção 2.3, mostraremos a generalização do método realizada por Westerberg *et al.* para levar em conta acoplamentos ferromagnéticos [Westerberg 1995].

2.1 O método do grupo de renormalização e a cadeia de Heisenberg de spins-1/2

Nesta seção, descrevemos o método do grupo de renormalização para desordem forte (GRDF) introduzido inicialmente por Ma, Dasgupta e Hu para o estudo da cadeia de Heisenberg de spins-1/2 antiferromagnética (AF) na presença de desordem temperada [MDH 1979]. Iremos nos ater somente aos aspectos mais relevantes do método e deixaremos para abordar maiores detalhes no cap. 4 quando generalizaremos o método para estudar cadeias de spins cujo grupo de simetria é o $SU(N)$, com $N \geq 2$.

O hamiltoniano que descreve o sistema de estudo é dado por

$$H = \sum_i J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (2.1)$$

onde \mathbf{S}_i é o operador usual de spin-1/2 com relação ao sítio i , e $J_i > 0$, é a constante de acoplamento entre os spin \mathbf{S}_i e \mathbf{S}_{i+1} . A desordem temperada se faz presente considerando que os J_i 's são variáveis aleatórias independentes distribuídas de acordo com $P(J)$.

A estratégia básica do método de GRDF é dizimar (reduzir) graus de liberdade de spin através da combinação de dois deles em um estado de singlete. Essa dizimação é feita obedecendo os seguintes passos/regras. (i) Encontre o maior acoplamento existente na cadeia, $\Omega = \max \{J_i\}$. (Suponha $\Omega = J_2$.) (ii) Considere que a interação entre os spins \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 é a mais relevante, e portanto a interação destes com o resto da cadeia pode ser tratada perturbativamente. Ou seja, trate

$$H_1 = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_3 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4,$$

como uma perturbação de

$$H_0 = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3. \quad (2.2)$$

Como o estado fundamental de H_0 é um singlete, (iii) retire os spins S_2 e S_3 do sistema e faça com que os spins vizinhos, S_1 e S_4 interajam efetivamente de acordo com

$$H^{ef} = \tilde{J} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4, \text{ com } \tilde{J} = \frac{J_1 J_3}{2\Omega}. \quad (2.3)$$

Este resultado é obtido tratando H_1 em segunda ordem de teoria de perturbação [MDH 1979].¹ Como o hamiltoniano efetivo tem a mesma forma que a do original, podemos iterar sucessivamente o grupo de renormalização, ou seja, voltar para o passo (i) e repetir os procedimentos sucessivamente até um ponto que deixaremos para ser determinado mais tarde. O procedimento de dizimação está ilustrado esquematicamente na fig. 2.1.

O objetivo do método do GR é descrever a física de baixas energias de um sistema. No caso em questão, queremos saber como se comportam as quantidades termodinâmicas da cadeia em baixas temperaturas. Supondo que $J_2 = \Omega$ seja muito maior que a temperatura T , então o estado tripleto do hamiltoniano H_0 será pouco acessado termicamente. Esta hipótese justifica a regra (iii). O procedimento perturbativo descrito pelas regras (i) e (ii)

¹Na verdade falta um termo constante no hamiltoniano efetivo (2.3) proporcional a $J_1^2 + J_3^2$, porém este pode ser negligenciado para os nossos propósitos.

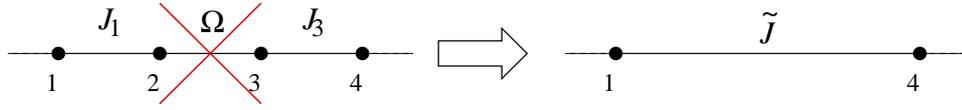


Figura 2.1: Procedimento esquemático da dizimação de um par de spins-1/2.

é justificado se a desordem no sistema é grande. Dessa maneira, há uma boa chance de que os acoplamentos vizinhos J_1 e J_3 sejam muito menores que J_2 .

O método do GR nos diz que devemos iterá-lo até que os parâmetros do hamiltoniano não mudem mais. Quando isso acontece, dizemos que encontramos um ponto fixo, e esse hamiltoniano invariante dita a classe de universalidade de todos aqueles hamiltonianos que estão na bacia de atração deste ponto fixo [Fisher 1974]. Usualmente em sistemas limpos, o hamiltoniano invariante é definido por inúmeros parâmetros, como por exemplo as constantes de acoplamento entre primeiros e segundos vizinhos. No caso em questão, este é definido por infinitos acoplamentos entre primeiros vizinhos que seguem uma determinada distribuição. Então a quantidade que deve ser renormalizada é a distribuição $P(J) \equiv P(J; \Omega)$, onde indicamos com o ponto-e-vírgula que Ω é corte superior de $P(J)$.

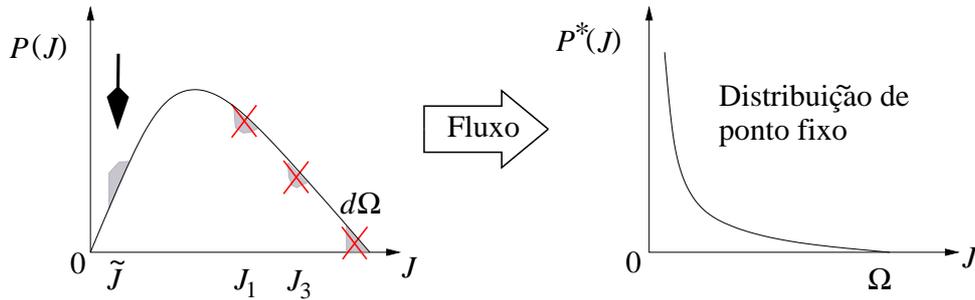


Figura 2.2: Procedimento esquemático do processo de dizimação sobre a distribuição $P(J)$. Note que todas as regiões sombreadas tem a mesma área, e que a distribuição de ponto fixo, $P^*(J)$, é singular.

A fig. 2.2 ilustra esquematicamente como o procedimento de renormalização altera a distribuição $P(J)$. As regiões sombreadas em destaques representam pictoricamente a fração de acoplamentos renormalizados durante os processos de dizimação que levam a escala de energia $\Omega \rightarrow \Omega - d\Omega$. Aquelas 3 marcadas com um X representam a trinca de acoplamentos vizinhos (J_1, Ω, J_3) que devem ser retirados do sistema, e aquela mais à esquerda representa o acoplamento \tilde{J} a ser inserido. Além disso, como não há correlação entre a trinca de acoplamentos retirados, o acoplamento inserido \tilde{J} também é descorrelacionado, e

dessa maneira as novas constantes de acoplamento são *variáveis aleatórias independentes*. O ponto chave que devemos dar destaque é que o acoplamento \tilde{J} a ser inserido é menor que os acoplamentos originais (ver eq. (2.3)). Este fato é perfeitamente condizente com o objetivo do GR em abaixar a escala de energia do sistema. E como veremos a seguir, é responsável por gerar uma distribuição de ponto fixo extremamente larga e singular em J .

A equação de fluxo que descreve as transformações da distribuição $P(J)$ quando a escala de energia Ω é variada é [MDH 1979]

$$\frac{\partial}{\partial \Omega} P = -P(J = \Omega) \int dJ_1 dJ_3 P(J_1) P(J_3) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{2\Omega}\right), \quad (2.4)$$

e apresenta *um único ponto fixo estável* [Fisher 1994],

$$P^*(J; \Omega) = \frac{\alpha}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\alpha} \theta(\Omega - J), \quad \alpha = -\frac{1}{\ln \Omega}. \quad (2.5)$$

Esta distribuição é interessante porque a desordem do sistema aumenta gradativamente à medida que o GR é iterado. E tende ao infinito quando $\Omega \rightarrow 0$. A quantificação desta afirmação é dada quando se calcula

$$\lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{\sqrt{\text{Var } J}}{\langle J \rangle} \rightarrow \infty,$$

onde $\langle J \rangle$ e $\text{Var } J$ são a média e a variância de $P(J)$, respectivamente. A imediata implicação deste fato é tornar o procedimento perturbativo de renormalização assintoticamente exato. No limite $\Omega \rightarrow 0$ a probabilidade de ocorrência de uma dizimação ruim vai a zero, ou seja, a probabilidade de um dos acoplamentos vizinhos a Ω ser igual a $J > C\Omega$, com $0 < C < 1$ é igual a $2 - 2C^\alpha \approx -2\alpha \ln C$ para α pequeno. Portanto, nas palavras de D. S. Fisher: “Isto fortemente sugere que, contanto que possamos atravessar a salvo o regime inicial em que a distribuição dos J 's não é larga, as transformações do GR se tornarão assintoticamente exatas.” [Fisher 1994]. Os efeitos de desordem pequena foram estudados através do método de réplicas [Doty 1992] e por diagonalização exata [Henelius 1998, Lafflorencie 2003, Lafflorencie 2004]. Verificou-se que tais efeitos não retiram uma distribuição inicialmente estreita e bem comportada da bacia de atração da distribuição de ponto fixo (2.5). Dessa maneira conclui-se que a introdução de desordem, por menor que seja, desestabiliza a fase pura, e o sistema é levado para um ponto fixo universal de desordem infinita (2.5) [Fisher 1994].

Para calcular as quantidades físicas, procede-se da seguinte maneira: (a) Itera-se o procedimento de dizimação até que a escala de energia Ω seja diminuída até se igualar a temperatura T . (b) Em seguida, considera-se que os spins não dizimados (ou “spins ativos”) são livres, i. e., não interagem entre si, e que aqueles que foram dizimados estão inertes e devem ser desconsiderados. E sendo assim, o sistema é diagonalizado trivialmente [Bhatt 1982]. (Por exemplo, a susceptibilidade magnética estática, χ , será dada pela contribuição de Curie de cada um dos spins ativos na escala de energia $\Omega = T$.) A justificativa para se proceder dessa maneira é relativamente simples. O procedimento (a) é reflexo do fato de que o estado de tripleto não pode mais ser descartado porque é termicamente ativado abaixo dessa escala de energia, e portanto importante para a descrição da física do sistema.² O procedimento (b) é justificado se a temperatura de interesse T é muito menor que a escala de energia inicial Ω_0 .³ Dessa maneira, $P(J)$ teve bastante “tempo” para fluir e se encontra próximo ao ponto fixo, i. e., $P(J) \approx P^*(J)$ que é extremamente singular. Sendo assim, a escala de energia das interações entre a grande maioria dos spins está muito abaixo da temperatura T e, portanto, são essencialmente livres. Os demais spins dizimados em escalas de energia superiores a T estão “congelados” em estados de singletos, e portanto, podemos considerá-los inertes.

Devemos, a seguir, calcular a fração de spins ativos, n_Ω , na escala de energia Ω . Como em cada dizimação 2 spins são retirados, então a fração de spins dn_Ω dizimados quando se varia $\Omega \rightarrow \Omega - d\Omega$ deve ser igual a 2 vezes a fração de spins disponíveis para dizimação multiplicado pela probabilidade de ocorrência de uma dizimação nessa escala de energia, $P(J = \Omega) d\Omega$. O que nos leva a

$$dn_\Omega = 2n_\Omega P(\Omega) d\Omega, \implies n_\Omega \sim \frac{1}{(\ln 1/\Omega)^2}, \quad (2.6)$$

onde usamos que $P \approx P^*$, imediatamente implicando em uma singularidade da susceptibilidade magnética [Fisher 1994],

$$\chi \sim \frac{n_{\Omega=T}}{T} \sim \frac{1}{T (\ln 1/T)^2}. \quad (2.7)$$

Pelo fato do estado fundamental ser uma coleção de singletos acoplados aleatoriamente

²Lembre-se que a diferença de energia entre o tripleto e o singlete no hamiltoniano (4.6) é igual a constante de acoplamento $J_2 = \Omega$.

³Note que Ω_0 é uma escala global de energia, e dessa maneira podemos reescalar todo o sistema por ela, ou seja, $\Omega_0 = 1$. Na verdade isso foi implicitamente assumido quando da solução de ponto fixo (ver eq. (2.5)).

(ver fig. 2.3), diz-se que o sistema se encontra na fase dos singletos aleatórios [Doty 1992]. Nessa visão pictórica, podemos calcular as excitações fundamentais do sistema da seguinte maneira. As excitações de mais baixa energia são polarizações dos estados de singletos formados por pares de spins arbitrariamente afastados. O custo energético da polarização de um singlete cujos spin estão afastados por uma distância da ordem de L_Ω é igual ao valor do acoplamento compartilhado por estes quando tal par foi dizimado, ou seja, era o mais forte da cadeia (Ω) naquela escala de comprimento (L_Ω). Porém, nesta mesma escala, a fração de spins ativos era n_Ω , logo a distância média entre spins ativos vizinhos era $L_\Omega \sim n_\Omega^{-1}$. E através da eq. (2.6), encontramos que escala de energia e a escala de comprimento se relacionam através de,

$$\ln \frac{1}{\Omega} \sim L_\Omega^\psi, \text{ onde } \psi = \frac{1}{2}. \quad (2.8)$$

A este tipo de relação dá-se o nome de *escalamento dinâmico ativado* com um expoente de tunelamento $\psi = 1/2$ [Fisher 1994]. Esta relação foi recentemente verificada experimentalmente no composto $\text{BaCu}_2(\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5})_2\text{O}_7$ por espalhamento inelástico de nêutrons [Masuda 2004].

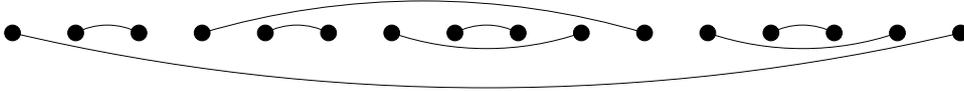


Figura 2.3: Visão pictórica do estado fundamental da fase de singlete aleatório. Pares de spins extremamente distantes podem se acoplar em um estado de singlete. Note que as ligações nunca se cruzam.

A função de correlação spin-spin, $C_{ij} = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$, onde $\langle \dots \rangle$ denota a média no *ensemble*, também pode ser obtida. Note que, em longas distâncias, raros pares de spins, que eventualmente se acoplam em estados de singlete, desenvolvem fortes correlações (da $\mathcal{O}(1)$) e, portanto dominam a função correlação média $\bar{C}_{ij} = C(|i - j|)$, onde a sobrebarra denota a média na desordem.⁴ Dessa maneira, a função correlação média deve ser proporcional ao número de singletos formados na escala de comprimento $|i - j| \sim n_\Omega^{-1}$. Mas a probabilidade de que um spin forme um singlete com um outro qualquer é proporcional à probabilidade de que este não tenha sido dizimado até a escala de comprimento que separa os dois, ou seja, proporcional a própria fração de spins ativos n_Ω [Fisher 1994]. Como

⁴Note que este procedimento torna a função correlação média invariante por translação.

ambos os spins devem estar ativos,

$$C(|i-j|) \sim n_{\Omega}^2 \sim \frac{(-1)^{i-j}}{|i-j|^{\eta}}, \text{ com } \eta = 2. \quad (2.9)$$

Este resultado é intrigante porque, mesmo num regime extremamente desordenado, o sistema possui correlações de quase-longo alcance.

Entretanto, tipicamente os spins não estão acoplados em singletos e desenvolvem fracas correlações. Estas correlações podem ser estimadas da seguinte maneira. Considere 3 spins ativos vizinhos, por exemplo, S_1 , S_2 e S_3 , na escala de energia $\Omega = J_2$ separados a uma distância da ordem de $L_{\Omega} \sim n_{\Omega}^{-1}$. Na próxima dizimação, os spins S_2 e S_3 desenvolverão correlações iguais a $C_{23} = -3/4 + \mathcal{O}(J_1/\Omega)^2$, enquanto uma fraca correlação entre os spins S_1 e S_2 igual a $C_{12} = -J_1/\Omega + \mathcal{O}(J_1/\Omega)^2$ será desenvolvida. O *valor típico* da correlação entre spins distantes será então proporcional ao valor típico da distribuição J/Ω . Como $P^*(J)$ é larga, tal valor típico é aproximadamente igual a média geométrica, o que nos leva a uma correlação típica, $C_{tip}(L)$ com decaimento do tipo exponencial esticada [Fisher 1994],

$$C_{tip}(L) \sim \exp \left\{ \overline{\ln(J/\Omega)} \right\} = \exp \{-1/\alpha\} \sim \exp \{-L^{\psi}\}, \quad (2.10)$$

e $\psi = 1/2$.

Em suma, os resultados assintoticamente exatos descritos nas eqs. (2.5), (2.7), (2.8), (2.9) e (2.10) caracterizam bem a fase dos singletos aleatórios governada por um ponto fixo de desordem infinita. Estes foram obtidos em consonância com a introdução do método do GRDF e ilustram quão conveniente é essa técnica. Basicamente, ela usa o fato do sistema ser desordenado para justificar o seu procedimento perturbativo de dizimação, que a priori, não deve ser uma boa estratégia para tratar sistemas poucos desordenados. Entretanto, a desordem cresce indefinidamente quando se aplicam as transformações do grupo, e isso melhora o procedimento de renormalização de tal maneira que o tratamento em segunda ordem de teoria de perturbação se torna assintoticamente exato.

2.2 A cadeia de Heisenberg dimerizada

Nesta seção, aplicamos o método do GRDF introduzido na seção anterior para estudar a cadeia de Heisenberg desordenada de spins-1/2 AF dimerizada (estudada inicialmente por Hyman *et al.* [Hyman 1996]). O objetivo principal é introduzir e caracterizar a fase de Griffiths. Nesta, raras regiões infinitamente desordenadas dominam a física de baixas

energias dando origem a quantidades não universais.

O hamiltoniano de interesse é aquele que descreve a cadeia de Heisenberg AF desordenada, eq. (2.1), porém os acoplamentos pares, J_{2i} , e ímpares, J_{2i+1} , seguem distribuições diferentes: $P_2(J)$ e $P_1(J)$, respectivamente.

O procedimento de renormalização é o mesmo que descrevemos para a cadeia não dimerizada na seção anterior. Retira-se da cadeia o acoplamento mais forte, $\Omega = \max\{J_{2i}, J_{2i+1}\}$, juntamente com seus vizinhos e insere-se um novo de acordo com a eq. (2.3). Porém, como há uma correlação intrínseca nas constantes de acoplamento, a equação de fluxo (2.4) não pode ser mais aplicada. Entretanto, pode-se escrever equações de fluxo separadamente para cada uma das distribuições P_1 e P_2 . Elas descrevem os procedimentos de dizimação da seguinte forma. Toda vez que o acoplamento mais forte a ser dizimado é par, retira-se este da distribuição P_2 , retiram-se também dois acoplamentos a esmo da distribuição P_1 (referentes aos acoplamentos ímpares vizinhos a Ω) e insere-se um novo acoplamento em P_1 (de acordo com a eq. (2.3)) que é menor que os três dizimados. Procede-se analogamente quando Ω é um acoplamento ímpar. Por fim, as equações de fluxo são [Fisher 1992, Hyman 1996],

$$\begin{aligned}\frac{\partial P_2}{\partial \Omega} &= P_2 [P_2(\Omega) - P_1(\Omega)] - P_1(\Omega) \int dJ_a dJ_b P_2(J_a) P_2(J_b) \delta\left(J - \frac{J_a J_b}{2\Omega}\right), \\ \frac{\partial P_1}{\partial \Omega} &= P_1 [P_1(\Omega) - P_2(\Omega)] - P_2(\Omega) \int dJ_a dJ_b P_1(J_a) P_1(J_b) \delta\left(J - \frac{J_a J_b}{2\Omega}\right).\end{aligned}$$

Note a dualidade quando da troca de $1 \leftrightarrow 2$.

A solução trivial desse conjunto é $P_1 = P_2 = P$ descrita em (2.5), porém, ela é instável com relação à introdução de qualquer quantidade de dimerização [Hyman 1996], ou seja, na linguagem do GR a dimerização é um operador relevante.

A desestabilização do ponto fixo de desordem infinita (PFDI) pode ser entendida em termos do parâmetro

$$\delta = \frac{\overline{\ln J_{2i}} - \overline{\ln J_{2i+1}}}{\text{Var}(\ln J_{2i}) + \text{Var}(\ln J_{2i})}, \quad (2.11)$$

que seria uma medida da dimerização ou, equivalentemente, da distância ao ponto crítico $\delta = 0$. Para $|\delta_0| \ll 1$,⁵ o fluxo de renormalização flui muito semelhantemente ao da cadeia não dimerizada, ou seja, o sistema mal “sabe” que há uma pequena diferença entre os acoplamentos pares e ímpares e as distribuições $P_{1,2}$ fluem em direção ao PFDI dado pela

⁵Aqui δ_0 é o valor inicial de δ calculado pela eq. (2.11) para as distribuições originais (não renormalizadas) dos acoplamentos pares e ímpares.

eq. (2.5). Todavia, a perturbação δ cresce linearmente com $\Gamma = -\ln \Omega$ e se torna da ordem da unidade na escala de energia $\Gamma_c^{-1} \approx 2|\delta_0|$ [Fisher 1992, Hyman 1996, Iglói 2001]. Note que nesta, a densidade de spins é aproximadamente igual a $n_c \sim 1/\Gamma_c^2$, uma vez que o fluxo de renormalização era aquele governado pelo PFDI, portanto a distância média entre estes é da ordem de $L_c \sim n_c^{-1} \sim 1/|\delta_0|^2$. Além disso as distribuições P_1 e P_2 são do tipo lei de potência com expoente aproximadamente igual a $1 - 1/z$, com $1/z \approx 1/\Gamma_c \approx 2|\delta_0|$. A partir da escala de energia Γ_c , as distribuições divergem entre si. Isto pode ser facilmente entendido da seguinte maneira. Supondo que $\delta_0 > 0$, a partir de Γ_c os acoplamentos pares serão tipicamente mais fortes que os ímpares, e dessa maneira, há uma maior probabilidade destes serem escolhidos para a dizimação. Quando um acoplamento par é dizimado, retiram-se dois acoplamentos ímpares e insere-se um novo de magnitude muito mais fraca que também é ímpar, logo acoplamentos ímpares extremamente fracos serão gerados. Nos estágios finais do GR a distribuição P_2 será uma lei de potência com expoente $1 - 1/z$ e a distribuição P_1 será extremamente fraca e singular. Teremos então uma coleção de dímeros *livres* extremamente separados entre si. A distância média entre os spins que compõe o par é L_c e os acoplamentos seguem uma distribuição não universal dada por

$$P_2(J) \approx \frac{1}{z\Omega} \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-1/z} \theta(\Omega - J).$$

Com esses resultados, algumas quantidades físicas são imediatamente calculadas. O escalonamento dinâmico é dado por

$$\Omega \sim L_\Omega^{-z}, \quad (2.12)$$

que é uma lei dinâmica usual, a susceptibilidade magnética,

$$\chi \sim T^{-1+1/z}, \quad (2.13)$$

diverge com lei de potência e a função correlação é de curto alcance com comprimento característico

$$\xi \approx L_c \sim z^{-2}, \quad (2.14)$$

ver refs. [Fisher 1992, Hyman 1996]. E pela natureza do estado fundamental, esta fase de Griffiths é comumente denominada fase dos dímeros aleatórios (“Random Dimer Phase” no original). Esses resultados resumem e caracterizam a fase de Griffiths. Esta é uma fase onde raras regiões do sistema tem desordem infinita e controlam a física de baixas energias

dando origem a quantidades não universais. Para ser mais específico, essas raras regiões são aquelas entre o par de spins que formam o dímero geradas pelo fluxo do GR quando o sistema era pouco dimerizado. São excitações virtuais dos singletos de spins lá dizimados que medeiam a fraca interação entre os spins do dímero.

Os resultados (re-)apresentados nesta seção são válidos somente para $|\delta_0| \ll 1$. Isto porque as quantidades de interesse não são universais e dependem de estágios intermediários do fluxo de renormalização. Recentemente, Iglói *et al.* conseguiram acompanhar analiticamente esse fluxo para uma certa família de distribuições iniciais, e dessa forma foram capazes de determinar exatamente o expoente dinâmico z em função de $P_{1,2}$ [Iglói 2001].

Analisemos agora o caso extremo em que $\delta_0 \gg 1$, i. e., dimerização inicialmente forte, ou equivalentemente desordem inicialmente fraca. Neste caso, somente os acoplamentos pares serão dizimados gerando acoplamentos ímpares infinitamente mais fracos, ou seja, a distribuição P_2 não será renormalizada (exceto pela dizimação de seus acoplamentos mais fortes) e portanto o estado fundamental será uma coleção de *dímeros livres ordenados* formados sobre os acoplamentos pares, equivalentemente ao caso limpo. A susceptibilidade magnética dependerá fortemente da distribuição inicial de P_2 e para os casos experimentais de maior relevância deve ir a zero, caracterizando o "gap" de Haldane. Na estrutura do GRDF, os dímeros (singletos) são formados sobre os acoplamentos pares e o ordenamento é perfeito. Isso é verdade na ausência de acoplamentos ímpares. Entretanto, estes não são nulos, e por tal motivo as flutuações quânticas (fortes em 1D) e estatísticas gerarão regiões onde os pares de singleto (dímeros) estarão formados sobre um acoplamento ímpar. Entre essas regiões de diferentes estruturas topológicas um spin desemparelhado deve surgir (sóliton), e como o custo energético da região de estrutura topológica "errada" deve ser proporcional ao seu volume, então o sóliton deve estar confinado em um potencial linear [Hyman 1996].⁶ Neste caso, a física de baixas energias é governada por esses sólitons confinados, equivalentemente ao caso limpo, e não por dímeros acoplados desordenadamente como no caso em que $\delta_0 \ll 1$ (analisado anteriormente). Então dizemos que a desordem fraca é um operador irrelevante e o sistema se encontra na fase de Haldane característica do sistema limpo, cujo expoente dinâmico é $z = 1$.

Para finalizar essa seção, queremos apontar o fato de que as contrapartidas limpas das cadeias AF's de Heisenberg de spins-1 e de spins-1/2 dimerizadas são objetos análogos. Ou seja, definindo que J e J' são os acoplamentos alternantes da cadeia de spins-1/2 dimerizada AF, mostra-se que se pode variar J' de J até $-\infty$ sem uma transição de fase

⁶Para a cadeia *espontaneamente* dimerizada, o sóliton não é confinado. As conseqüências deste fato serão discutidas mais tarde no cap. 3.

[Hida 1992, Hung 2004]. Ambos os sistemas apresentam ordem de longo alcance escondidas com parâmetros de ordem correspondentes [Nijs 1989, Hida 1992]. Tal ordem ainda está presente mesmo no sistema fortemente desordenado [Hyman 1996]. Entretanto, as cadeias de spins-1 AF's desordenadas apresentam 3 fases determinadas pela desordem. Desordem fraca é irrelevante. O "gap" de Haldane persiste e o sistema se encontra na fase de Haldane. Desordem moderada fecha o "gap" de Haldane e o sistema se encontra numa fase de Griffiths. Essas duas fases são análogas as da cadeia dimerizada desordenada discutidas nesta seção. Entretanto, para desordem forte, o sistema é dirigido para a fase universal dos singletos aleatórios [Hyman 1997, Monthus 1997, Saguia 2002], inexistente na cadeia dimerizada. Veja que dois sistemas cujas contrapartidas limpas são análogas apresentam características de baixas energias distintas na presença de desordem.

2.3 A cadeia de Heisenberg ferromagnética e antiferromagnética

Nesta seção, introduzimos a generalização do GRDF para levar em conta a dizimação de acoplamentos ferromagnéticos (FM's), e mostramos sua aplicação para o estudo das cadeias de spins desordenadas com acoplamentos FM's e AF's.

Esta generalização foi introduzida por Westerberg *et al.* (ver ref. [Westerberg 1995]) e é de grande relevância para a aplicação do GR para as escadas de spins que nós estudamos (ver cap. 3).

O objetivo maior desta generalização é levar em conta a dizimação de acoplamentos ferromagnéticos. Para tal considere o hamiltoniano

$$H = \sum_i J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (2.15)$$

onde as constantes de acoplamentos J_i 's são variáveis independentes aleatórias e podem assumir valores positivos e negativos, e os operadores \mathbf{S}_i 's são variáveis de spins de tamanhos arbitrários.

Seguindo os mesmos passos do GRDF, devemos procurar o par de spins mais fortemente acoplados entre si, i. e., com maior "gap" de excitação. Aqui define-se "gap" de excitação

entre o i -ésimo spin e seu vizinho posterior,

$$\Delta_i = \begin{cases} |J_i| (S_i + S_{i+1}), & \text{se } J_i < 0 \text{ (acoplamento FM)}, \\ J_i (|S_i - S_{i+1}| + 1), & \text{se } J_i > 0 \text{ (acoplamento AF)}, \end{cases} \quad (2.16)$$

como sendo é a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental devido o acoplamento entre estes. Note que é natural definir a escala de energia $\Omega = \max \{\Delta_i\}$. Uma vez encontrado tal par de spins, por exemplo S_2 e S_3 , deve-se diagonalizar

$$H_0 = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3,$$

e tratar

$$H_1 = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_2 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4,$$

como uma perturbação de H_0 . O hamiltoniano H_0 é facilmente diagonalizado através do operador de spin total $\mathbf{S} = \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$. Os auto-estados são auto-estados do operador S que pode assumir todos os valores permitidos pelas regras quânticas de soma de momento angular, ou seja, $S = |S_2 - S_3|, |S_2 - S_3| + 1, \dots, S_2 + S_3 - 1, S_2 + S_3$, cujos auto-valores são iguais a $J_2 (\hat{S}^2 - \hat{S}_2^2 - \hat{S}_3^2) / 2$, onde $\hat{S}^2 = S(S + 1)$ é o quadrado do operador momento angular total, e a degenerescência do estado (multiplete) fundamental é igual a $2S + 1$. Caso $S \neq 0$, então em primeira ordem de teoria de perturbação degenerada encontramos que

$$H_{ef} = \langle H_1 \rangle_0 = \tilde{J}_1 \mathbf{S}_1 \cdot \tilde{\mathbf{S}} + \tilde{J}_3 \tilde{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{S}_4, \quad (2.17)$$

onde $\langle \dots \rangle_0$ denota a média no multiplete fundamental, \tilde{S} é o operador de spin S correspondente ($|S_2 - S_3|$ se $J_2 > 0$, $S_2 + S_3$ caso contrário), $\tilde{J}_1 = J_1 c(\tilde{S}, S_2, S_3)$ e $\tilde{J}_3 = J_3 c(\tilde{S}, S_3, S_2)$. Este resultado é obtido pelo teorema de Wigner-Eckart que diz que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}_2 \rangle_0 &= c(\tilde{S}, S_2, S_3) \tilde{\mathbf{S}}, \\ \langle \mathbf{S}_3 \rangle_0 &= c(\tilde{S}, S_3, S_2) \tilde{\mathbf{S}}, \end{aligned}$$

onde $c(\tilde{S}, S_2, S_3)$ é uma constante que não depende do valor da projeção dos spins em alguma direção específica [Sakurai 1985]. Esta foi calculada na ref. [Westerberg 1995] e é igual a

$$c(S, S_2, S_3) = \frac{S(S + 1) + S_2(S_2 + 1) - S_3(S_3 + 1)}{2S(S + 1)}. \quad (2.18)$$

No caso em que $S = 0$, o estado fundamental é um singlete e deve-se ir até segunda ordem em teoria de perturbação, o que nos leva a

$$\begin{aligned}
 H_{ef} &= \sum_{S \neq 0} \frac{\langle 0 | H_1 | S \rangle \langle S | H_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_S}, \\
 &= \frac{1}{E_0 - E_1} \sum_S \langle 0 | H_1 | S \rangle \langle S | H_1 | 0 \rangle, \\
 &= \frac{1}{E_0 - E_1} \langle 0 | H_1^2 | 0 \rangle, \\
 &= \tilde{J} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4 + \text{cte}, \text{ com } \tilde{J} = \frac{2J_1 J_3 S_2 (S_2 + 1)}{3J_2},
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

onde $|S\rangle$ denota os auto-estados correspondentes ao multipletto S , E_S a respectiva auto-energia não perturbada e o termo constante pode ser desprezado. Na primeira passagem usa-se o fato de que $\langle 0 | H_1 | S \rangle$ é diferente de zero somente para $S = 1$, que vem do fato de que o hamiltoniano H_1 só “conecta” multipletos adjacentes. O resultado (2.19) é a generalização para spin S qualquer da eq. (2.3).

Os resultados descritos nas eqs. (2.17) e (2.19) descrevem a generalização dos processos de dizimação para levar em conta acoplamentos ferromagnéticos e spins maiores do que $1/2$. A fig. 2.4 ilustra pictoricamente a generalização do procedimento de dizimação.

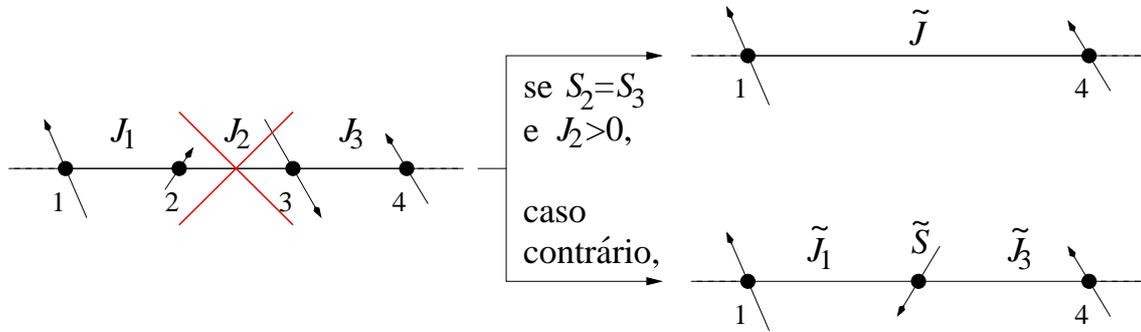


Figura 2.4: Representação pictórica do procedimento de renormalização supondo que o maior "gap" de excitação é igual a $\Omega = \Delta_2$.

Como no caso das cadeias AF's de spins-1/2, devemos iterar as transformações do GR e encontrar as distribuições de ponto fixo. Porém, agora devemos levar em conta as transformações do tamanho dos spins e o tipo de acoplamento (FM ou AF) em adição à magnitude dos "gaps" de excitação. Westerberg e colegas então acompanharam as distribuições dos acoplamentos ferromagnéticos, $P^F(\Delta, S_E, S_D)$, e antiferromagnéticos, $P^A(\Delta, S_E, S_D)$

[Westerberg 1995].

Antes de argumentarmos sobre o fluxo das distribuições $P^{A,F}$, note que a concentração de acoplamentos FM's e AF's deve ser finita perto do ponto fixo. Seja $x = N_A / (N_A + N_F)$ a concentração de acoplamentos AF's na cadeia. Ambas as cadeias FM's ($x = 0$) e AF's ($x = 1$) são instáveis contra a introdução de acoplamentos de sinal oposto. No caso da cadeia totalmente AF ($x = 1$), a menos que o processo de dizimação seja em segunda ordem de teoria de perturbação, a remoção de um acoplamento AF da cadeia converte em FM um dos acoplamentos vizinhos (ver eqs. (2.17) e (2.18)). Na cadeia totalmente FM ($x = 0$), um acoplamento AF sempre sobrevive porque a dizimação de um acoplamento FM não muda o sinal dos acoplamentos vizinhos (novamente, ver eqs. (2.17) e (2.18)), e se este acoplamento AF for dizimado, um dos acoplamentos vizinhos se tornará AF. Dessa forma, argumenta-se que, no ponto crítico, as frações de acoplamentos AF's e FM's, x^* e $1 - x^*$, respectivamente, são não nulas. Somente nos casos em que a cadeia é totalmente FM ou totalmente AF com magnitude uniforme dos spins é que x^* é igual a zero ou 1, respectivamente.

Infelizmente não se tem uma solução analítica das equações de fluxo de $P^{F,A}$. O estudo dessas distribuições realizado por Westerberg *et al.* foi essencialmente numérico, entretanto, algumas hipóteses de escala podem ser feitas. Espera-se que, perto do ponto fixo, as distribuições $P^{F,A}$ exibam o seguinte comportamento [Westerberg 1995]:

$$P^A(\Delta, S_E, S_D; \Omega) = \Omega^{-\mu_A} Q^A \left(\frac{\Delta}{\Omega^{\lambda_A}}, \frac{S_E}{\Omega^{-\kappa_A}}, \frac{S_D}{\Omega^{-\kappa_A}} \right), \quad (2.20)$$

$$P^F(\Delta, S_E, S_D; \Omega) = \Omega^{-\mu_F} Q^F \left(\frac{\Delta}{\Omega^{\lambda_F}}, \frac{S_E}{\Omega^{-\kappa_F}}, \frac{S_D}{\Omega^{-\kappa_F}} \right). \quad (2.21)$$

Esses 6 expoentes não são todos independentes, na verdade, encontra-se que

$$\kappa = \kappa_A = \kappa_F, \quad (2.22)$$

$$1 = \lambda_A = \lambda_F, \quad (2.23)$$

$$1 - 2\kappa = \mu_A = \mu_F. \quad (2.24)$$

A eq. (2.22) vem do fato de que não pode haver uma separação nas escalas do tamanho dos spins que compartilham acoplamentos AF's e FM's (hipótese de que $0 < x^* < 1$). A eq. (2.23) vem de resultados numéricos que indicam que o valor médio dos "gaps" de excitação das distribuições $P^{F,A}$, quando medido em unidades de Ω , é finito e independente de Ω [Westerberg 1995]. E finalmente, a eq. (2.24) vem do Jacobiano quando da mudança

de variáveis entre as distribuições $P^{A(F)} \rightarrow Q^{A(F)}$. Dessa maneira, a hipótese de escala das eqs. (2.20) e (2.21) simplifica em

$$P^{A,F}(\Delta, S_E, S_D; \Omega) = \Omega^{2\kappa-1} Q^{A,F} \left(\frac{\Delta}{\Omega}, S_E \Omega^\kappa, S_D \Omega^\kappa \right). \quad (2.25)$$

Finalmente, a última hipótese de escala se refere ao escalonamento dinâmico

$$L_\Omega \sim \Omega^{-\nu}, \quad (2.26)$$

onde L_Ω é a distância média entre os aglomerados de spins efetivos correspondente à escala de energia Ω . O expoente ν é relacionado ao expoente κ através de

$$\nu = 2\kappa. \quad (2.27)$$

Como o tamanho de um determinado spin efetivo, S , está relacionado com os spins originais por

$$S = \left| \sum_{i=1}^l \pm S_i \right|,$$

onde l é o número de spins originais que compõe o spin efetivo S , e dois spins vizinhos entram na soma com o mesmo sinal se o acoplamento mútuo entre estes for FM, caso contrário entram com sinais opostos. Como a posição dos acoplamentos FM's e AF's é aleatória, isto nos leva a um típico problema de passeio aleatório, e portanto $S \sim \sqrt{l}$. Entretanto, o número médio de spins que compõe um determinado aglomerado de spin é proporcional à distância média entre os aglomerados de spins que formam a cadeia efetiva. Logo,

$$S \sim L_\Omega^{1/2},$$

o que nos leva a eq. (2.27).

Dadas essas hipóteses de escala, vamos nos ater agora aos resultados numéricos obtidos por Westerberg *et al.* [Westerberg 1995]. Estes autores investigaram inúmeras cadeias de spins. Desde cadeias inicialmente pouco desordenadas totalmente AF's de spins-1/2 com uma pequena concentração de impurezas de spins-1 até cadeias extremamente desordenadas com acoplamentos FM's e AF's e com spins cujos tamanhos poderiam ir até 20. O resultado principal foi que todas as hipóteses de escala (eqs. (2.22) a (2.27)) foram confirmadas. Em particular a convergência da hipótese (2.27) foi a mais rápida de todas, ou seja, ν e κ

satisfazem a eq. (2.27) antes de convergirem para seus respectivos valores de ponto fixo, o que confirma a robustez do argumento de passeio aleatório.

O fato mais interessante encontrado por estes autores foi que os expoentes convergem para valores que dependem das distribuições iniciais da seguinte forma:

Para distribuições regulares e pouco singulares, i. e., para distribuições de "gaps" de excitação menos singular que $P(\Delta) \sim \Delta^{-y_c}$, com $0.65 \lesssim y_c \lesssim 0.75$, os autores encontraram que os valores de ponto fixo dos expoentes são

$$\begin{aligned}\kappa_{A,F}^* &= 0,22 \pm 0,01, \\ \lambda_{A,F}^* &= 1,00 \pm 0,005, \\ \nu^* &= 0,44 \pm 0,02.\end{aligned}$$

Além disso, a fração de acoplamentos AF's convergiu para $x^* = 0.63$ e as distribuições de "gaps" de excitação FM's e AF's seguem

$$P^F(\Delta) \sim \Delta^{-0,44}, \quad (2.28)$$

$$P^A(\Delta) \sim \Delta^{-0,70}. \quad (2.29)$$

Para distribuições mais singulares que $P(\Delta) \sim \Delta^{-y_c}$, os expoentes são não universais e as distribuições $P^{A,F}$ convergem para pontos fixos não universais mais singulares que aquela correspondente à região universal. Eles nada comentam sobre a convergência de x , mas é evidente que este é finito e entre 0 e 1.

Pelo fato de que a cadeia renormaliza para uma coleção de spins arbitrariamente grandes e fracamente acoplados, nomeou-se essa fase de **fase dos grandes spins** ("Large Spin phase" no original) [Westerberg 1995].

Como as distribuições de ponto fixo são singulares, as quantidades termodinâmicas são calculadas da mesma maneira que no caso das cadeias de spins-1/2 AF's descrita nas seções anteriores.

A entropia específica, por exemplo, pode ser calculada diretamente pela definição de Boltzmann [Westerberg 1995],

$$\sigma = \frac{1}{L_{\Omega=T}} k_B \ln(2 \langle S \rangle + 1) \sim T^{2\kappa} |\ln T|,$$

no regime em que $\langle S \rangle \gg 1$. O calor específico escala com

$$C_T = T \frac{d}{dT} \sigma \sim T^{2\kappa} |\ln T|.$$

A susceptibilidade magnética estática segue uma lei universal do tipo Curie,

$$\chi \sim \frac{n_\Omega \langle S^2 \rangle}{T} \sim \frac{\langle S^2 \rangle}{TL_{\Omega=T}} \sim \frac{1}{T},$$

independentemente se o sistema se encontra na região universal ou não.

A função correlação que convenientemente surge é

$$C_{ij} = \langle \eta_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle,$$

onde $\eta_{ij} = \prod_{k=i}^{j-1} \text{sgn}(-J_k)$ para $j > i$. Coube a Hikihara *et al.* calcular, através de grandes esforços computacionais, o comportamento desta função [Hikihara 1999]. Devido à natureza das regras de dizimação, os spins efetivos crescem indefinidamente e por isso pode-se pensar que o sistema torna-se clássico, e eventualmente apresentar ordem de longo alcance. Entretanto o sistema é essencialmente quântico, e em 1D pode-se argumentar que a ordem de longo alcance deve ser suprimida. Hikihara e seus colegas encontraram que a função correlação média e típica são próximas uma da outra e se comportam como

$$\bar{C}_{ij} = C_{ij}^{tip} = C(|i-j|) \sim \frac{1}{\ln|i-j|}. \quad (2.30)$$

Realmente não se tem ordem de longo alcance. Porém, impressionantemente, as correlações são maiores do que quase-longo alcance (lei de potência). Este decaimento com o logaritmo da distância é mais um efeito exótico presente em sistemas quânticos interagentes unidimensionais e desordenados. No cap. 4, relacionamos as regras de aglomeração de spins deste sistema com as da cadeia de spins $SU(N)$ AF desordenadas. Dessa maneira conseguimos deduzir analiticamente a função correlação (2.30) [Hoyos 2004b].

Antes de finalizar essa seção, gostaríamos de chamar atenção para uma relação relativamente simples que, pelo nosso conhecimento, passou despercebida. Uma vez de posse das distribuições de ponto fixo (2.28) e (2.29), podemos calcular a fração de spins ativos (ou aglomerados de spins efetivos), n_Ω , através dos processos de dizimação. Como em cada dizimação apenas um grau de liberdade de spin é efetivamente retirado (independente se

o processo é da dizimação de um acoplamento FM ou AF),⁷ temos que

$$dn_{\Omega} = [xP^A(\Delta = \Omega) + (1-x)P^F(\Delta = \Omega)] n_{\Omega} d\Omega,$$

o que resulta em

$$n_{\Omega} \sim \Omega^{1/z}, \quad (2.31)$$

onde

$$1/z = x/z_A + (1-x)/z_F, \quad (2.32)$$

com $z_{A,F}$ definidos à partir das distribuições de ponto fixo $P^{A,F} \sim \Delta^{1-1/z_{A,F}}$. Utilizando os valores de $z_{A,F}$ e x obtidos por Westerberg *et al.* na região universal, encontramos que $1/z \approx 0.4$ que está bem próximo do valor de ν encontrado numericamente. Note que a distância média entre os spins ativos L_{Ω} é inversamente proporcional a n_{Ω} , desse modo a eq. (2.31) é a própria equação-hipótese de escalonamento dinâmico (2.26), porém, agora ela é deduzida como consequência das distribuições de ponto fixo assumirem formas do tipo leis de potência [Hoyos 2004a].

Finalmente para finalizar essa seção, gostaríamos de chamar atenção para alguns aspectos da aplicação do método do GRDF na cadeia em questão. Note que uma vez atingida a distribuição de ponto fixo, esta não se torna mais singular. A partir daí, o processo perturbativo de dizimação não tende a melhorar, a probabilidade de encontrar um "gap" de excitação vizinho, Δ , que está entre $C\Omega$ e Ω , ou seja, $C\Omega < \Delta < \Omega$, onde C é uma constante entre 0 e 1, é independente da escala de energia Ω . Lembre-se que no caso da distribuição de PFDI, esta probabilidade ia a zero (ver seção 2.1). Portanto, Westerberg e colegas concluíram que os resultados aqui reportados não são assintoticamente exatos, porém qualitativamente corretos. Por fim, ainda há uma peculiaridade dos processos de dizimação que deve ser apontada. Em certas dizimações, o "gap" de excitação renormalizado é maior que os originais dizimados (chamamos isto de dizimação inconveniente), o que é inconsistente com o intuito de abaixar a escala de energia Ω . Entretanto, para a cadeia em questão, tais processos são raros e na dizimação imediatamente após a dizimação inconveniente o "gap" de excitação renormalizado é dizimado e a escala de energia volta a baixar [Westerberg 1995]. Porém no caso de cadeias AF's de spins- S com $S > 1/2$, a maioria das dizimações são inconvenientes se a desordem do sistema é inicialmente fraca

⁷Isso somente não é verdade no caso em que dois spins de mesma magnitude que compartilham um acoplamento AF são dizimados, entretanto a probabilidade de tal processo é cada vez mais remota no limite $\Omega \rightarrow 0$.

e a escala de energia não abaixa. Neste caso, o GR como aqui mostrado não pode mais ser aplicado [Boechat 1996], e tratamentos mais cuidadosos devem ser levados em conta [Hyman 1997, Monthus 1997, Saguia 2002, Refael 2002, Saguia 2003, Carlon 2004].

Capítulo 3

As escadas de spins-1/2

Neste capítulo, relatamos nosso estudo sobre as escadas de spins-1/2 antiferromagnéticas desordenadas dos tipos 2 pernas e zig-zag.

O estudo foi essencialmente numérico. Aplicamos o grupo de renormalização para desordem forte introduzido no capítulo anterior e acompanhamos a estrutura topológica das escadas ao longo do fluxo de renormalização. Esta abordagem se mostrou de extrema utilidade porque nos permitiu classificar exatamente a classe de universalidade desses sistemas. O nosso resultado mais interessante foi mostrar que as escadas sempre renormalizam em alguma das cadeias de spins abordadas no capítulo anterior.

Com relação à escada de duas pernas, verificamos que esta sempre renormaliza para uma cadeia de spins-1/2 dimerizada antiferromagnética que suporta duas fases, a fase de Haldane e a fase de Griffiths. Com relação à escada zig-zag, encontramos que para frustração e desordem grandes, o sistema renormaliza para uma cadeia de spins com acoplamentos ferro e antiferromagnéticos (porém com algumas diferenças que serão apontadas no momento oportuno). Por outro lado, se a frustração e a desordem são suficientemente pequenos, a escada renormaliza para a cadeia de Heisenberg de spins-1/2 antiferromagnética e se encontra na fase dos singletos aleatórios.

Este capítulo está estruturado da seguinte maneira. Primeiramente na seção 3.1 abordamos como o método do GR se aplica para a diferente topologia das escadas, e em seguida nas seções 3.2 e 3.3 o aplicamos para a escada do tipo duas pernas e zig-zag, respectivamente. Por fim, na seção 3.4, resumimos as conclusões e discutimos algumas possíveis implicações de nosso estudo e outros tipos de cadeia.

3.1 O procedimento de renormalização

Generalizamos nesta seção o grupo de renormalização para desordem forte introduzido no capítulo anterior para uma topologia diferente daquela de uma cadeia. Tal generalização, como ficará mais evidente a seguir, é uma simples extensão do GR da cadeia ferro e antiferromagnética (ver seção 2.3) para um sistema onde o número de coordenação é qualquer.

Considere o hamiltoniano,

$$H = \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.1)$$

onde J_{ij} é a constante de troca referente à interação entre os spins \mathbf{S}_i e \mathbf{S}_j . Consideraremos que esta é uma variável aleatória independente tanto em magnitude quanto em sinal, e \mathbf{S}_i é o operador usual de spin- S referente ao sítio i .

Seguindo a idéia de dizimar graus de liberdade de alta energia, escolhemos o par de spins com maior energia de excitação $\Omega = \max \{\Delta_{ij}\}$ como definido na eq. (2.16). Chamemos o par escolhido de S_α e S_β . Dessa maneira devemos tratar

$$H_0 = J_{\alpha\beta} \mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{S}_\beta,$$

como o termo de maior relevância em H e

$$H_1 = H - H_0,$$

como um perturbação de H_0 . Tratando H_1 perturbativamente, os termos de relevância são aqueles em que S_α e S_β aparecem, ou seja,

$$H_1 = \sum_{i \neq \beta} J_{i\alpha} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_\alpha + \sum_{i \neq \alpha} J_{i\beta} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_\beta.$$

Caso o estado fundamental de H_0 seja degenerado, em primeira ordem de teoria de perturbação encontramos que

$$\begin{aligned} H_{ef} = \langle H_1 \rangle_0 &= c \left(\tilde{S}, S_\alpha, S_\beta \right) \sum_{i \neq \beta} J_{i\alpha} \mathbf{S}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}} + c \left(\tilde{S}, S_\beta, S_\alpha \right) \sum_{i \neq \alpha} J_{i\beta} \mathbf{S}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}}, \\ &= \sum_i \tilde{J}_i \mathbf{S}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

onde $\langle \dots \rangle_0$ denota a média sobre o multipleteo fundamental. Na primeira passagem usamos o teorema de Wigner-Eckart. O operador de spin $\tilde{\mathbf{S}}$ é aquele correspondente à simetria do multipleteo fundamental, $\tilde{S} = S_\alpha + S_\beta$, se $J_{\alpha\beta} < 0$, e $\tilde{S} = |S_\alpha - S_\beta|$, caso contrário. O coeficiente c dá a projeção do spin S_α ou S_β no multipleteo \tilde{S} e está dado pela eq. (2.18). Por fim, a constante de acoplamento renormalizada que liga o spin efetivo \tilde{S} ao spin localizado no i -ésimo sítio do sistema é

$$\tilde{J}_i = c \left(\tilde{S}, S_\alpha, S_\beta \right) J_{i\alpha} + c \left(\tilde{S}, S_\beta, S_\alpha \right) J_{i\beta}. \quad (3.3)$$

Note que o hamiltoniano efetivo (3.2) possui a mesma forma estrutural que o hamiltoniano original (3.1). O efeito líquido deste passo de dizimação foi a retirada de um grau de liberdade de spin, da mesma maneira como na cadeia de spins ferro e antiferromagnética.

Devemos agora analisar o caso em que $S_\alpha = S_\beta = S$ e $J_{\alpha\beta} > 0$. Neste, o estado fundamental é um singlete e não há correções em primeira ordem de teoria de perturbação. Entretanto, em segunda ordem,

$$\begin{aligned} H_{ef} &= \sum_{S \neq 0} \frac{\langle 0 | H_1 | S \rangle \langle S | H_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_S}, \\ &= \frac{1}{E_0 - E_1} \sum_S \langle 0 | H_1 | S \rangle \langle S | H_1 | 0 \rangle, \\ &= \frac{1}{E_0 - E_1} \langle 0 | H_1^2 | 0 \rangle, \end{aligned}$$

onde usamos que o único elemento não nulo se dá quando $S = 1$. O operador H_1^2 é um operador composto por uma soma de termos do tipo 4 corpos. Em cada parcela desta, dois desses 4 corpos são os spins dizimados S_α e S_β (podendo aparecer ou o quadrado de um deles ou os dois na mesma parcela). Ao projetar os graus de liberdade destes spins no singlete em questão, a soma de termos do tipo 4 corpos de H_1^2 dará origem a um hamiltoniano efetivo, H_{ef} , que é uma soma de termos do tipo 2 corpos. As parcelas do tipo S_i^2 dão origem a termos constantes que, para nossos propósitos, devem ser negligenciadas. As parcelas de interesse são aquelas do tipo $\tilde{J}_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, com $\tilde{J}_{ij} = J_{ij} + \delta J_{ij}$, onde J_{ij} é o acoplamento não renormalizado existente entre os spins S_i e S_j antes da dizimação de S_α e S_β , e δJ_{ij} é a renormalização devido a essa dizimação. Dessa maneira concluímos que o hamiltoniano efetivo é

$$H_{ef} = \sum_{i < j} \tilde{J}_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.4)$$

que possui a mesma estrutura do hamiltoniano original (3.1). Para computar δJ_{ij} devemos procurar os termos de H_1^2 em que S_i e S_j aparecem ao mesmo tempo. A soma deste é

$$2 \{ J_{i\alpha} J_{j\alpha} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_\alpha) (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_\alpha) + J_{i\beta} J_{j\beta} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_\beta) (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_\beta) \\ + J_{i\alpha} J_{j\beta} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_\alpha) (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_\beta) + J_{i\beta} J_{j\alpha} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_\beta) (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_\alpha) \},$$

onde a primeira (segunda) parcela é devida à interação dos mesmos com S_α (S_β) e a terceira (quarta) parcela é devida à interação de S_i (S_j) com S_α e S_j (S_i) com S_β . A média destes termos no estado fundamental nos fornece

$$\frac{2S(S+1)}{3} (J_{i\alpha} J_{j\alpha} + J_{i\beta} J_{j\beta} - J_{i\alpha} J_{j\beta} - J_{i\beta} J_{j\alpha}) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j.$$

Como $E_0 - E_1 = -J_{\alpha\beta}$ (ver eq. (2.16)) calculamos o acoplamento renormalizado

$$\tilde{J}_{ij} = J_{ij} + \frac{2S(S+1)}{3J_{\alpha\beta}} (J_{i\alpha} - J_{i\beta}) (J_{j\beta} - J_{j\alpha}). \quad (3.5)$$

Da mesma maneira como na cadeia de spins, dois graus de liberdade de spins são retirados quando da ocorrência de uma dizimação em segunda ordem de teoria de perturbação. Uma vez definidas as regras de dizimação em primeira e segunda ordem de teoria de perturbação, terminamos a descrição da generalização do método do GR.

Para finalizar essa seção queremos frisar que, como esse procedimento se aplica para qualquer sistema de Heisenberg (independentemente do seu número de coordenação), a generalização do método do GR para desordem forte aqui apresentada pode ser, em princípio, aplicada em dimensões superiores [Lin 2003].

3.2 As escadas de duas pernas

Reportamos nesta seção o nosso estudo sobre as escadas de spins-1/2 antiferromagnéticas desordenadas do tipo duas pernas.

3.2.1 O modelo

O sistema leva esse nome por ter a mesma topologia de uma escada usual como mostra a fig. 3.1. As interações do tipo primeiros vizinhos “desenham” os degraus e as pernas da escada.

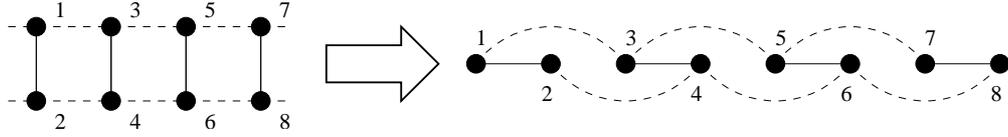


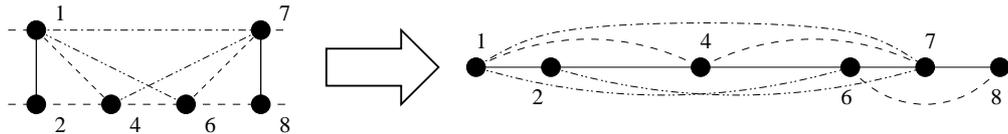
Figura 3.1: A escada de spin de 2 pernas.

Além disso, como ainda ilustrado na mesma figura, a escada pode ser vista como uma cadeia cujo hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_i (J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + K_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}), \quad (3.6)$$

onde J_i e K_i são variáveis aleatórias positivas e independentes que descrevem as interações entre primeiros e segundos vizinhos, respectivamente, e \mathbf{S}_i é o operador de spin-1/2 usual referente ao sítio i . Para que a topologia da cadeia seja respeitada, devemos impor que $J_{2i} = 0, \forall i$, como ilustrado na fig. 3.1, ou seja, inicialmente não há interação entre um spin localizado em um sítio par com o próximo spin à direita.

Uma vez definido o hamiltoniano desordenado (3.6), notamos que este é do tipo descrito pelo hamiltoniano da eq. (3.1), e sendo assim podemos aplicar a generalização do método do GR para estudar o sistema. Mas antes de entrarmos no estudo que realizamos, vamos realizar uma única dizimação para mostrar claramente como o fluxo de renormalização muda o número de coordenação (no caso igual a 3) do sistema. Suponha que o acoplamento mais forte do sistema seja aquele entre os spins S_3 e S_5 , ou seja, $\Omega = K_3$. (Na notação do hamiltoniano (3.1), $\Omega = J_{35}$.) Como ilustra a fig. 3.2, ambos os spins devem ser retirados do sistema, o acoplamento prévio existente entre os spins S_4 e S_6 deve ser renormalizado conforme a eq. (3.5). Além disso, surgem novos acoplamentos. Estes são entre os spins S_6 e S_7 , S_1 e S_4 , S_4 e S_7 , S_1 e S_6 , e finalmente entre os spins S_1 e S_7 . Na cadeia renormalizada (ver fig. (3.2)), o primeiro é do tipo primeiros vizinhos, o segundo e o terceiro são do tipo segundos vizinhos, o quarto e o quinto são do tipo terceiros vizinhos e o último é do

Figura 3.2: A escada de duas pernas renormalizada após a dizimação dos spins S_3 e S_5 .

tipo quartos vizinhos. Note ainda que os acoplamentos entre os spins S_1 e S_4 , e S_6 e S_7 são necessariamente ferromagnéticos (ver eq. (3.5)), portanto, devemos esperar que spins maiores que $1/2$ surjam em futuras dizimações.

Com esta simples dizimação, esperamos ter convencido o leitor de que a estrutura original da cadeia é drasticamente mudada pelo fluxo de renormalização. Tanto o número de coordenação quanto o alcance das interações crescem e o tamanho dos spins que compõem a cadeia também pode crescer. Todas essas mudanças tornam a tentativa de tratar analiticamente o fluxo de renormalização inviável. Por esse motivo, conduziremos numericamente o nosso estudo sobre esse sistema.

3.2.2 Resultados numéricos

Em nosso estudo numérico, consideramos que inicialmente os acoplamentos entre primeiros e segundos vizinhos estão distribuídos de acordo com as seguintes leis de potência

$$P_J(J) = \frac{1-\alpha}{J_0} \left(\frac{J_0}{J}\right)^\alpha, \text{ com } 0 < J < J_0, \quad (3.7)$$

$$P_K(K) = \frac{1-\alpha}{K_0} \left(\frac{K_0}{K}\right)^\alpha, \text{ com } 0 < K < K_0, \quad (3.8)$$

respectivamente, e $0 < \alpha < 1$. O expoente α é uma medida da desordem enquanto a razão $\Lambda = K_0/J_0$ dá o valor típico da magnitude relativa entre os acoplamentos entre segundos e primeiros vizinhos.

O nosso estudo numérico se baseou principalmente no monitoramento da estrutura topológica do sistema, ou seja, monitoramos a fração de acoplamentos que são do tipo primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos. O principal resultado que obtivemos é que, independente dos valores de α e Λ , o sistema sempre renormaliza para uma cadeia, ou seja, a fração de acoplamentos de alcance maior que primeiros vizinhos vai a zero perto do ponto fixo. Tendo esse resultado em vista, resumimos o procedimento numérico da seguinte maneira.

Tomamos inicialmente uma cadeia de tamanho $L_0 = 2 \times 10^5$ spins. Procuramos o par de spins cuja energia de excitação é a maior (Ω) e aplicamos então o procedimento de dizimação conforme especificado na seção 3.1. Este procedimento é aplicado sucessivamente até que restem somente acoplamentos do tipo primeiros vizinhos. Durante o fluxo de renormalização, acompanhamos a fração de acoplamentos do tipo primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos, a fração de spins ativos, a fração de spins maiores que $1/2$ e

a fração de acoplamentos ferromagnéticos. Tudo isso como função da escala de energia Ω . Ao final do procedimento de renormalização, verificamos que a cadeia é sempre populada somente por spins-1/2 interagindo antiferromagneticamente. Entretanto, a distribuição dos acoplamentos pares e ímpares são diferentes. O número de spins ativos na cadeia renormalizada varia entre 500 e 2000, este depende dos parâmetros α e Λ , e a menor escala de energia verificada em nossas simulações é da ordem de $10^{-40}\Omega_0$, onde Ω_0 é a escala de energia inicial que tomamos como a unidade. Finalmente, os dados gerados são obtidos a partir de uma média em 100 realizações de desordem.

A fig. 3.3 ilustra o comportamento típico das quantidades estruturais do sistema ao longo do fluxo de renormalização. Note que nos primeiros estágios do grupo de renormalização a fração de acoplamentos de longo alcance aumenta, entretanto, quando nos aproximamos do ponto fixo, a fração de acoplamentos do tipo primeiros vizinhos vai a 1, enquanto os demais tipos de acoplamento desaparecem, ou seja, a escada fluiu para uma cadeia. Devemos aqui adicionar um detalhe importante. O leitor deve se perguntar como, durante o fluxo de renormalização, acoplamentos de longo alcance desaparecem? Esse mecanismo não é bem claro a partir da generalização do grupo de renormalização descrito

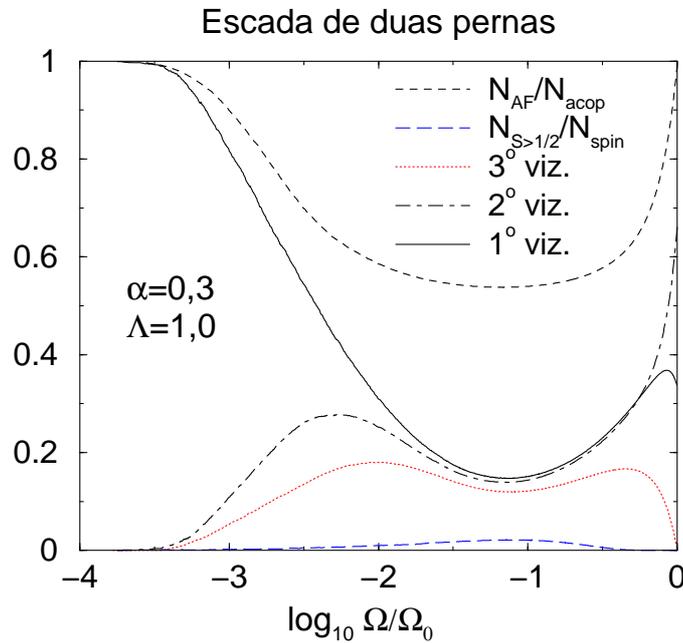


Figura 3.3: A fração de acoplamentos do tipo primeiros, segundos e terceiros vizinhos, a fração de spins maiores que 1/2, e a fração de acoplamentos antiferromagnéticos como funções da escala de energia Ω para o parâmetro de desordem $\alpha = 0,3$ e razão $\Lambda = 1,0$.

na seção 3.1. Na verdade, acoplamentos de longo alcance existem e permanecem. Porém a amplitude destes é menor do que $\Omega_{\min} = 10^{-200}\Omega_0$. Ao longo dos procedimentos de renormalização, nós descartamos acoplamentos menores que o limite inferior Ω_{\min} . Testamos também outros limites como $\Omega_{\min} = 10^{-150}\Omega_0$ e não constatamos nenhuma mudança quantitativa.

Outro dado mostrado pela fig. 3.3 é a fração de spins maiores que $1/2$, $N_{S>1/2}/N_{\text{spin}}$, onde N_{spin} é o número total de spins ativos. Note que muito poucos spins são maiores que $1/2$, em nossas simulações raramente encontramos spins maiores que 1. Este resultado está de acordo com o último dado que a fig. 3.3 ainda nos mostra. A fração de acoplamentos antiferromagnéticos, $N_{\text{AF}}/N_{\text{acop}}$, onde N_{AF} é o número de acoplamentos AF's, vai a 1 perto do ponto fixo. Como vimos na seção 2.3, uma cadeia totalmente antiferromagnética só é possível se todos os spins tem a mesma magnitude. Como já adiantamos anteriormente, a distribuição entre os acoplamentos pares e ímpares é diferente. A magnitude dos acoplamentos pares é ordens de grandeza menor que a dos acoplamentos ímpares de tal maneira que, na maioria das vezes, quando o procedimento de renormalização é interrompido, a maioria dos acoplamentos pares já foi descartada por ser menor que Ω_{\min} , ou seja, a cadeia é literalmente formada por dímeros livres. Esse cenário é perfeitamente compatível com o da cadeia desordenada de spins-1/2 antiferromagnética dimerizada descrita na seção 2.2. Como esse resultado é verificado para todas as condições iniciais de α e Λ , isso nos permite concluir que a escada de duas pernas de spins-1/2 desordenada AF *está na mesma classe de universalidade* da cadeia de spins-1/2 AF desordenada dimerizada. Com base nesta conclusão, a escada de spins está em uma fase de Griffiths que é caracterizada por um expoente não universal denominado expoente dinâmico, z . A relação entre as escalas de comprimento, L_Ω , e de energia, Ω , é dada por

$$\Omega \sim L_\Omega^{-z}. \quad (3.9)$$

Além disso, a susceptibilidade varia com a temperatura da seguinte forma¹

$$\chi \sim T^{-1+1/z}, \quad (3.10)$$

e por fim a função correlação é de alcance finito (ver seção 2.2). Estas propriedades estão de acordo com aquelas obtidas numericamente nas refs. [Mélin 2002, Yusuf 2002].

¹Na página 214411-3 da ref. [Hoyos 2004a], há um erro tipográfico para essa relação. Aqui apresentamos a forma correta.

A fig. 3.4 mostra o diagrama de fases α vs. Λ que divide a região em que há um pseudo-"gap" de spin da região em que este foi completamente destruído. Na primeira, o sistema se encontra numa fase em que o "gap" de Haldane característico do sistema limpo ainda não foi completamente destruído, a esta denominamos fase de Haldane desordenada que é caracterizada por um expoente dinâmico $0 < z < 1$. Na segunda, o expoente dinâmico é maior que 1 e o "gap" de spin desaparece completamente, neste caso o sistema se encontra na fase de Griffiths.

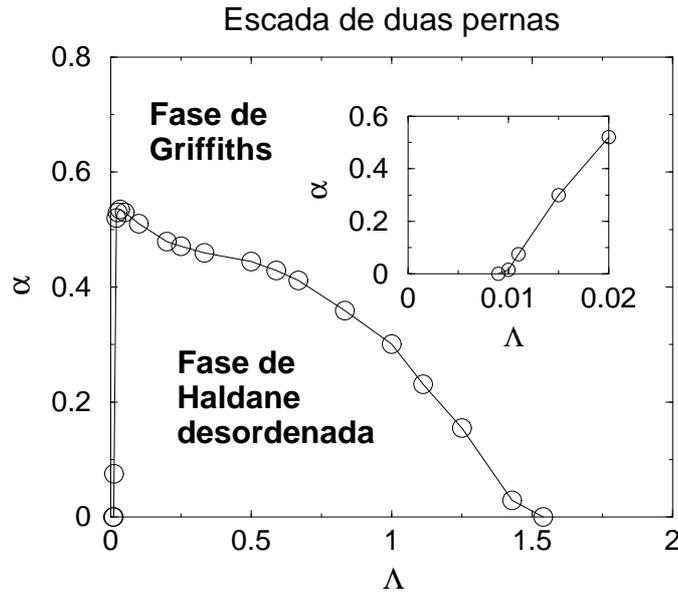


Figura 3.4: Diagrama de fases da escada de duas pernas de spins-1/2 AF desordenada. A fase de Haldane é caracterizada por um pseudo-"gap" de spin onde o expoente dinâmico varia entre $0 < z < 1$. Este "gap" é destruído pela desordem na fase de Griffiths, que por sua vez é caracterizada por um expoente dinâmico $z > 1$. Em ambas as fases o sistema é dimerizado e não universal. O detalhe é um aumento da região em que Λ é pequeno. O erro dos dados é do tamanho dos símbolos.

A linha que delimita as duas fases é calculada simplesmente procurando os pontos em que o expoente dinâmico é igual a $z = 1$. Este, por sua vez, é calculado da seguinte maneira. Durante o fluxo de renormalização, acompanhamos a fração de spins ativos, n_Ω , em função da escala de energia Ω . Relacionando a escala de comprimento, L_Ω , com a distância média entre os spins ativos $1/n_\Omega$, o expoente dinâmico é facilmente calculado através de

$$n_\Omega \sim \Omega^{1/z}.$$

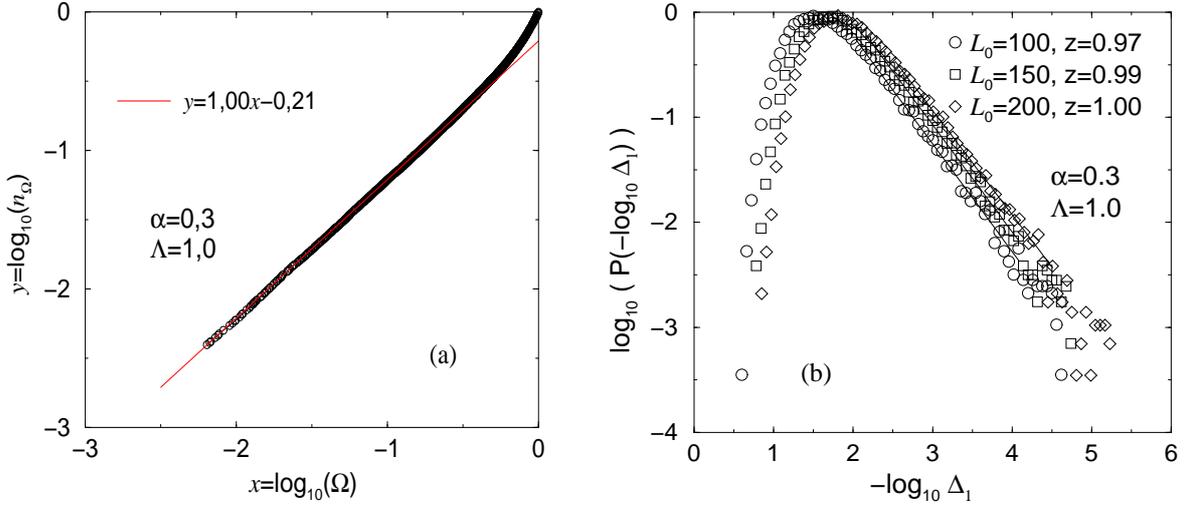


Figura 3.5: Cálculo do expoente dinâmico z , (a) calculado diretamente da relação $\log n_{\Omega} \sim (1/z) \log \Omega + \text{cte}$ para *uma única* cadeia. A variação para outras cadeias é da ordem de 1%. (b) A distribuição de primeiros "gaps", Δ_1 , construída a partir da dizimação de 50 000 cadeias de tamanho $L = 100, 150$ e 200 . Para $L_0 > 200$, o expoente dinâmico satura em $z = 1,0$. Este por sua vez é calculado a partir do ajuste da curva $\log P(-\log \Delta_1) = (1/z) \log \Delta_1 + \text{cte}$.

A fig. 3.5(a) ilustra n_{Ω} como função de Ω ao longo do fluxo de renormalização para uma única realização de desordem onde $\alpha = 0,3$ e $\Lambda = 1,0$. Note que, mesmo os dados sendo gerados a partir de uma única cadeia, a flutuação estatística é extremamente pequena. A fig. 3.5(b) mostra a distribuição do "gap" de excitação da cadeia, Δ_1^2 , para os mesmos parâmetros de α e Λ , e para cadeias de tamanhos $L_0 = 100, 150$ e 200 . Este método de calcular o expoente dinâmico é utilizado na ref. [Mélin 2002]. Se o sistema se encontra numa fase de Griffiths uma medida da escala de energia, Δ_1 , deveria ser distribuída conforme $P \sim \Delta_1^{1-1/z}$, o mesmo comportamento da distribuição de ponto fixo dos acoplamentos da cadeia de spins-1/2 AF desordenada (ver seção 2.2). Os autores dessa referência escolheram o primeiro "gap" da cadeia, Δ_1 , como medida da escala de energia. Dizimando inúmeras cadeias e construindo a distribuição dessa quantidade, o comportamento para Δ_1 pequeno deve seguir o comportamento de escala $P \sim \Delta_1^{1-1/z}$. Para $L_0 > 200$, o sistema está livre de efeitos de borda e o expoente dinâmico é aquele do sistema infinito. Como podemos ver os dois resultados mostrados na fig. 3.5(a) e (b) estão em excelente acordo. Neste

²Calculado quando da dizimação de uma cadeia inteira até que reste somente um par de spins. Δ_1 é o valor do "gap" de excitação desse par.

caso, concluímos que para $\Lambda = 1, 0$, o sistema se encontra na fase de Haldane se $\alpha < 0, 3$, caso contrário, está na fase de Griffiths. Este resultado está de acordo com os resultados numéricos obtidos na ref. [Yusuf 2002] para a susceptibilidade magnética. Para $\alpha < 0, 3$, χ vai a zero para $T \rightarrow 0$ e para $\alpha > 0, 3$, χ é singular com a temperatura. Entretanto, estes resultados numéricos estão em desacordo com os da ref. [Mélin 2002].

Retornando à discussão para o diagrama de fases descrito na fig. 3.4, para $\Lambda \lesssim 10^{-2}$, o sistema sempre se encontra na fase de Griffiths. Entendemos este fato da seguinte maneira. Para $\Lambda \rightarrow 0$, o sistema se reduz a uma coleção de dímeros livres formados sobre os “degraus” da escada. Tais dímeros estão distribuídos de acordo com a eq. (3.7) e, portanto, $z = (1 - \alpha)^{-1} \geq 1$ e portanto o sistema está na fase de Griffiths. Para Λ pequeno esse comportamento é mantido pelo GR, entretanto na região $10^{-2} \lesssim \Lambda \lesssim 1, 53$, o “gap” de Haldane do sistema limpo dá origem a um pseudo-“gap” se a desordem é pequena, neste caso o sistema se encontra na fase de Haldane desordenada. Para desordem suficientemente forte, este é destruído e a fase de Griffiths reemerge novamente. Para $\Lambda \gtrsim 1, 53$, somente a fase de Griffiths existe. Este comportamento suavemente se conecta com o do limite $\Lambda \rightarrow \infty$, onde as duas cadeias se desconectam e são governadas pelo ponto fixo de desordem infinita (ver seção 2.1) que corresponde ao limite $z \rightarrow \infty$. Salientamos entretanto que, para qualquer valor finito de Λ , o comportamento encontrado corresponde somente às duas fases descritas na fig. 3.4, em acordo com o resultado das refs. [Mélin 2002, Yusuf 2002].

3.2.3 Considerações finais

Nesta sub-seção, discutimos brevemente um ponto intrigante que se faz presente na caracterização da fase de Haldane desordenada.

Como mostramos na sub-seção anterior, a escada de duas pernas renormaliza para uma cadeia de spins-1/2 dimerizada, que por sua vez, comporta duas fases determinadas pela desordem. Desordem pequena é irrelevante e a cadeia se encontra na fase dimerizada (fase de Haldane) característica do sistema limpo, cujo expoente dinâmico é igual a $z_l = 1$. Para desordem forte, o “gap” de Haldane é fechado e o sistema se encontra numa fase não universal denominada fase de Griffiths, onde o expoente dinâmico $z > 1$ varia continuamente com a desordem.

O leitor pode se indagar se na fase por nós denominada de fase de Haldane desordenada, onde por $0 < z < 1$ ser menor que z_l , não deveríamos caracterizar a fase pela desordem ser irrelevante? E sendo assim, a sistema não deveria ser governado pela física de baixas energias do sistema limpo? Tais argumentações foram inicialmente feitas por Mélin *et al.*

e eles conjecturaram que, por $z < z_l$, a desordem deve ser irrelevante, e portanto, o sistema deve estar na fase de Haldane do sistema limpo [Mélin 2002].

Como discutimos na seção 2.2, a cadeia dimerizada está na fase de Haldane se a desordem é suficientemente pequena ou a dimerização equivalentemente grande. Dessa maneira o estado fundamental é uma coleção de dímeros formados sobre os acoplamentos pares (supondo que estes são mais fortes que os ímpares). A física de baixas energias é dominada pelas flutuações quânticas, alguns dímeros devem se formar sobre acoplamentos ímpares, e dessa formar sólitons confinados em um potencial linear. Daí a presença do "gap" de spin, e além disso o expoente dinâmico ser igual a $z_l = 1$. Argumentamos, entretanto, que esse cenário não é o caso verificado por nós para o tipo de desordem considerada. Os dímeros que se formam e caracterizam o ponto fixo da escada de duas pernas estão separados por dezenas de parâmetros de rede e os acoplamentos que os conectam não são os acoplamentos originais, e sim acoplamentos efetivos gerados pelo fluxo de renormalização. Além disso, os acoplamentos que conectam os dímeros são extremamente fracos (menores que Ω_{\min}) e portanto não devemos esperar que flutuações quânticas sejam suficientes para desestabilizar os dímeros. E por fim, a distribuição renormalizada dos acoplamentos dos dímeros *não possui* um "gap" e, portanto, no caso em questão ($0 < z < 1$), o espectro não deve possuir um "gap", e sim um pseudo-"gap" como havíamos argumentado.

É bastante provável que, para desordem inicial menor do que a que consideramos, a distribuição de ponto fixo dos acoplamentos dos dímeros possua um "gap", e nesse caso a desordem deve ser irrelevante como conjecturaram Mélin *et al.*, mas para o tipo de desordem aqui consideradas, argumentamos que o sistema se encontra na fase de Haldane *desordenada*.

Os resultados apresentados nesta seção resumem nosso estudo sobre as escadas de spins-1/2 do tipo duas pernas.

3.3 As escadas zig-zag

Relatamos nesta seção o nosso estudo sobre as escadas de spins-1/2 AF's desordenadas do tipo zig-zag.

3.3.1 O modelo

Similarmente ao caso da escada do tipo duas pernas, a topologia desse sistema nos permite descrevê-lo como uma cadeia de spins com interações entre primeiros e segundos vizinhos,

ver fig. 3.6.

O hamiltoniano em questão é o mesmo descrito na eq. (3.6), porém os acoplamentos entre primeiros vizinhos, J_i , são todos não nulos. Todos os acoplamentos são antiferromagnéticos e são variáveis aleatórias independentes inicialmente distribuídos de acordo com $P_J(J)$ e $P_K(K)$ (ver eqs. (3.7) e (3.8)) se são do tipo primeiros e segundos vizinhos, respectivamente. Há uma importante diferença entre essas duas escadas. Como os acoplamentos pares do tipo primeiros vizinhos na escada de duas pernas são nulos, o sistema não é frustrado. Diferentemente, a escada zig-zag é frustrada, e como veremos mais para frente, esse ingrediente é fundamental pra a física que emerge em baixas energias e diferencia as duas escadas. Note que a razão $\Lambda = K_0/J_0$ se torna uma medida da frustração do sistema. Para $\Lambda = 1$, o sistema é maximamente frustrado, e para $\Lambda = 0$ ou ∞ , a frustração vai a zero.

A escada zig-zag é estudada da mesma maneira como a escada de duas pernas. Aplicamos a generalização do GR para desordem forte descrito na seção 3.1. Monitoramos ao longo do fluxo a estrutura topológica do sistema renormalizado através da fração de acoplamentos do tipo primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos. Monitoramos também a fração de spins maiores que 1/2 e a fração de acoplamentos antiferromagnéticos. A principal conclusão é a seguinte: a escada sempre renormaliza para uma cadeia de spins com acoplamentos tanto do tipo antiferromagnéticos quanto ferromagnéticos. Somente para uma pequena região onde tanto a desordem quanto a frustração são pequenas é que o sistema renormaliza para uma cadeia totalmente AF de spins-1/2. No primeiro caso, o sistema se encontra na fase dos grandes spins, e no segundo caso, o sistema está na fase dos singletos aleatórios. A seguir, mostramos os resultados numéricos que nos levaram a essa conclusão.

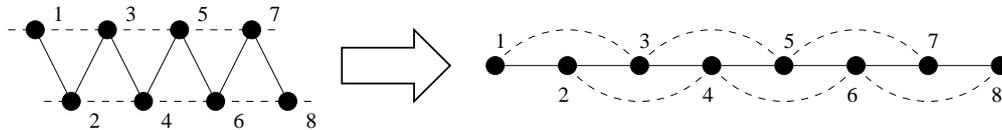


Figura 3.6: A escada do tipo zig-zag.

3.3.2 Resultados numéricos

Consideramos escadas de tamanho inicial $L_0 = 640.000$ e os dados são gerados a partir da média sobre 5 realizações de desordem.

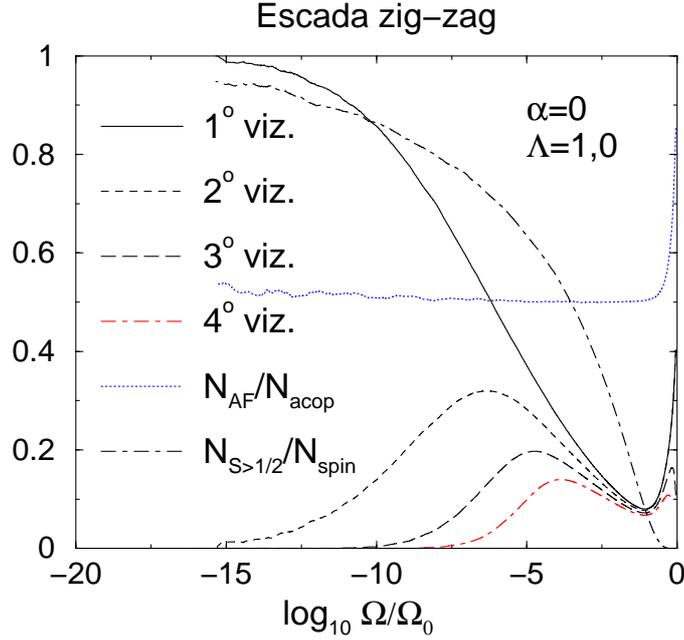


Figura 3.7: Fração de acoplamentos do tipo primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos, fração spins maiores que $1/2$, e fração de acoplamentos antiferromagnéticos, todos como função da escala de energia Ω . Os parâmetros de desordem e frustração são $\alpha = 0, 0$ e $\Lambda = 1, 0$, respectivamente. Os dados são gerados a partir da média sobre 5 realizações de desordem. Para $\Omega/\Omega_0 \geq 10^{-10}$, o erro relativo dos dados é menor que 2%, caso contrário é menor que 8%.

A fig. 3.7 mostra o principal resultado com relação a estrutura topológica do sistema perto do ponto fixo. Este *sempre* renormaliza para uma cadeia de spins. Além disso, a cadeia renormalizada é predominantemente populada por spins efetivos maiores que $1/2$, e grande parte dos acoplamentos são ferromagnéticos. Aqui, chamamos novamente atenção para o fato de que, da mesma maneira como na escada de duas pernas, acoplamentos de longo alcance existem, entretanto, descartamos aqueles menores que $\Omega_{\min} = 10^{-200}\Omega_0$.

O cenário aqui encontrado é característico da cadeia de spins com acoplamentos ferro e antiferromagnéticos (ver seção 2.3), e como ilustra a fig. 3.8, as similaridades entre os dois sistemas não é fortuita. Na referida figura, mostramos o tamanho médio, $\langle l \rangle$, dos aglomerados de spins e o tamanho médio dos spins associados a estes, $\langle S \rangle$, em função da escala de energia Ω . É característica da fase de grandes spins que $\langle l \rangle \sim \Omega^{-1/z}$, onde z é o expoente dinâmico, e $\langle S \rangle \sim \Omega^{-k}$, onde k é uma constante. Além disso, z e k estão relacionados por $1/z = 2k$ (ver eqs. (2.27) e (2.31)). Ambos os comportamentos são

observados nas escadas zig-zag. Relembramos que a relação $1/z = 2k$ vem do fato de que o tamanho dos spins efetivos é dado por uma soma aleatória dos spins que o compõem. Esta reflete o fato de que o processo de dizimação dominante não é a formação de singletos aleatórios. O fato da escada zig-zag apresentar essa característica é forte indício de que ela pertence à mesma classe de universalidade que a da cadeia de Heisenberg com acoplamentos ferro e antiferromagnéticos.

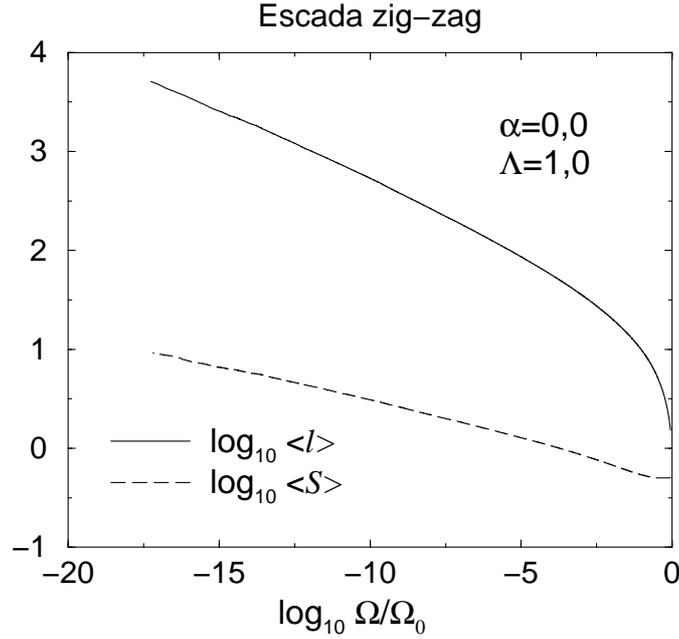


Figura 3.8: O tamanho médio dos aglomerados, $\langle l \rangle$, e o tamanho médio dos spins efetivos, $\langle S \rangle$, como função da escala de energia Ω . No limite de baixas energias obtemos os ajustes de $\langle l \rangle \sim \Omega^{-0,14}$ e $\langle S \rangle \sim \Omega^{-0,069}$. Os parâmetros de desordem e anisotropia são $\alpha = 0,0$ e $\Lambda = 1,0$, respectivamente. Os dados foram obtidos a partir da média sobre 5 realizações de desordem e a variação entre as amostras é menor que 5%.

Nossas simulações também mostram que a distribuição de ponto fixo dos "gaps" de excitação relativos aos acoplamentos FM's e AF's, P^F e P^A , respectivamente, são as mesmas e do tipo lei de potência,

$$P^A(\Delta) = P^F(\Delta) = P(\Delta) \sim \Delta^{-1+1/z}, \quad (3.11)$$

onde z é o mesmo expoente dinâmico obtido pela relação entre $\langle l \rangle$ e Ω , como esperado.

Queremos agora explorar a dependência do expoente dinâmico com a desordem inicial. A fig. 3.9 mostra o comportamento de z em função de α para vários valores de Λ . O

menor valor encontrado foi de $z \approx 1/0,15$. O menor valor encontrado por Westerberg et al. se refere às cadeias inicialmente pouco desordenadas e é universal igual a $z_u = 1/0,44$ (ver seção 2.3). Cadeias inicialmente mais desordenadas são caracterizadas por expoentes dinâmicos não-universais. Como pode ser visto pela fig. 3.9, para distribuições iniciais de acoplamentos do tipo leis de potência, as escadas zig-zag sempre possuem um expoente dinâmico $z > z_u$ e, portanto, estão longe da bacia de atração de comportamento universal das cadeias FM's e AF's.

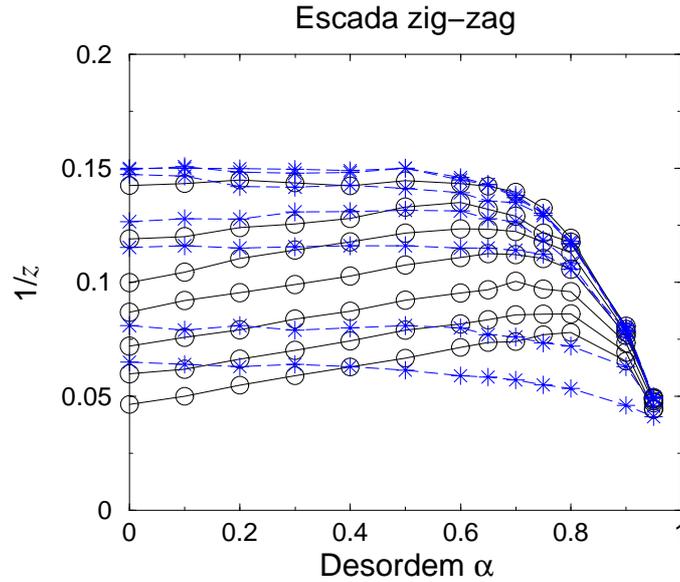


Figura 3.9: Variação do expoente dinâmico z em função do parâmetro de desordem α para várias condições de frustração Λ . De cima para baixo, os círculos e linhas contínuas correspondem a $\Lambda = 1, 0, 0,6, 0,4, 0,2, 0,1, 0,05$, e $0,025$. Analogamente, os asteriscos e linhas pontilhadas correspondem a $\Lambda = 0, 8^{-1}, 0, 6^{-1}, 0, 4^{-1}, 0, 2^{-1}, 0, 1^{-1}, 10^3$, e 10^6 . O erro relativo dos dados é menor que 10%, que corresponde ao tamanho dos símbolos.

Para $\alpha \leq 0,6$, o comportamento de $1/z$ é linear com α ,

$$1/z = a\alpha + b.$$

Note que para $\Lambda \geq 1, 0$, $a = 0$ e para $1, 0 \leq \Lambda \leq 1/0, 4$, b não varia, e assim o sistema flui para um *novo ponto fixo universal* onde $1/z \approx 1/0, 15$. Este comportamento é similar ao da cadeia de spins FM e AF mas com o valor do expoente dinâmico diferente. Para $\Lambda \leq 0, 4$, todas as curvas tem o mesmo coeficiente angular $a \approx 0, 040 \pm 0, 002$, e o coeficiente linear varia logarithmicamente com Λ , i. e., $b = b_1 + b_2 \ln \Lambda$, com $b_1 = 0, 12 \pm 0, 01$, e

$b_2 = 0,020 \pm 0,001$. Então deve haver uma transição de fase no valor de α em que o expoente dinâmico diverge, $\alpha = \alpha_c(\Lambda) = -(b_2 \ln \Lambda + b_1)/a$. Para $\alpha \leq \alpha_c$, o sistema é governado por um ponto fixo de desordem infinita. Neste, a magnitude dos spins não cresce e não há a proliferação de acoplamentos FM's, ou seja, a escada renormaliza para uma cadeia de spins-1/2 AF desordenada. Para $\alpha \geq 0,6$, todas as curvas convergem para o ponto $\alpha = 0,95$ e $1/z = 0,05$. Note, entretanto, que $\alpha = 0,95$ corresponde a uma distribuição inicial com expoente dinâmico igual a $z = 1/0,05$ (ver eqs. (3.7), (3.8) e (3.11)). Isto é reflexo da inabilidade do procedimento de dizimação, que é dominado por dizimações em primeira ordem de teoria de perturbação, gerar distribuições mais singulares do que a inicial.

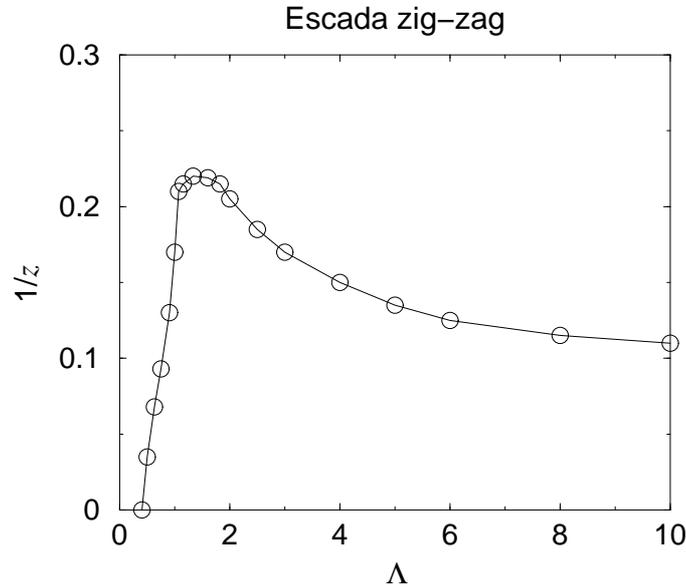


Figura 3.10: Variação do expoente dinâmico z em função do parâmetro de frustração Λ para distribuições iniciais do tipo caixa ($\delta = 0,05$, leia o texto para maiores detalhes). O tamanho inicial da cadeia é de $L_0 = 200\,000$ e o erro relativo dos dados é menor que 5%, do tamanho do símbolos.

No intuito de verificar se as escadas zig-zag de spins podem realizar ou não o ponto fixo universal das cadeias de spins AF's e FM's caracterizadas pelo expoente dinâmico $z = z_u$, estudamos esses sistemas na presença de desordem fraca, ou seja, consideramos distribuições de acoplamentos do tipo caixa, onde os acoplamentos estão uniformemente distribuídos entre $J_0 - \delta < J < J_0$ e $K_0 - \delta < K < K_0$, e tomamos que $\max\{J_0, K_0\} = 1$. Exploramos vários valores de δ e sempre encontramos que z é maior do que z_u . O menor

valor encontrado se deu para o caso extremo $\delta = 0,05$, mostrado na fig. 3.10. Nesta, mostramos $1/z$ em função da frustração Λ . Para $\Lambda \leq 0,4$, o sistema se encontra na fase dos singletos aleatórios onde o expoente dinâmico diverge com $z \sim -\ln \Omega$. Para $\Lambda > 0,4$ o sistema se encontra na fase dos grandes spins onde o expoente atinge um valor mínimo de $z = 1/0,22$ (maior que $z_u = 1/0,44$ encontrado por Westerberg *et al.*) e para $\Lambda \gtrsim 10$, z parece saturar em $\approx 1/0,11$.

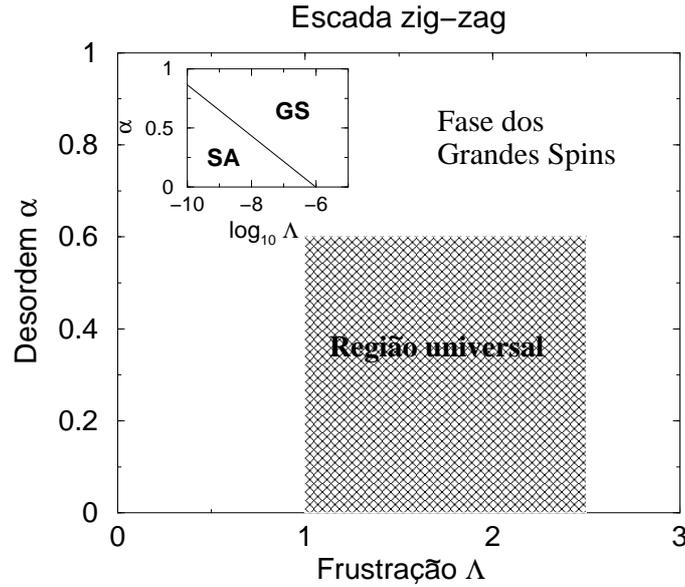


Figura 3.11: Diagrama de fases da escada zig-zag. A fase dos grandes spins (GS) domina a maior parte do espaço de parâmetros. Há uma região universal (área sombreada) para $1 \lesssim \Lambda \lesssim 2,5$ e $0 \lesssim \alpha \lesssim 0,6$ caracterizada por um expoente dinâmico $z \approx 1/0,15$. Há também uma estreita região onde a frustração é pequena (ver detalhe) e o sistema se encontra na fase dos singletos aleatórios (SA).

Concluimos então que a escada zig-zag está na mesma classe de universalidade que a da cadeia de spins com acoplamentos FM's e AF's mas não alcança a região universal encontrada nessas cadeias. Devemos lembrar ainda que a contrapartida limpa da escada zig-zag é crítica para $\Lambda \lesssim \Lambda_c$, com $\Lambda_c \approx 0,24$, e é espontaneamente dimerizada e possui um "gap" de spin para $\Lambda \gtrsim \Lambda_c$ [Haldane 1982]. A natureza topológica do estado dimerizado, entretanto, faz com que este seja instável contra a introdução de desordem e portanto o espectro do sistema desordenado é sempre sem "gap" [Yang 1996].

Baseado no comportamento do expoente dinâmico, podemos determinar o diagrama de fases da escada zig-zag desordenada como mostra a fig. 3.11. A fase dos grandes spins

domina a maior parte do espaço de parâmetros (Λ, α) . Nesta fase, a física de baixas energias é governada por um ponto fixo onde o tamanho médio dos spins efetivos cresce quando a escala de energia é diminuída, e estes são fracamente acoplados. A distribuição dos "gaps" de excitação não é universal exceto na região sombreada, onde o expoente dinâmico é igual a $z = 1/0,15$. Nesta fase as propriedades termodinâmicas são bem conhecidas (ver seção 2.3): O calor específico $C \sim T^{1/z} |\ln T|$ e a susceptibilidade magnética segue uma lei de Curie, $\chi \sim T^{-1}$. A função de correlação spin-spin média e típica caem logarithmicamente (como será visto no cap. 4). Além disso, há uma estreita região onde o sistema flui para um ponto fixo de desordem infinita e a escada se encontra na fase dos singletos aleatórios (ver detalhe da fig. 3.11). Nesta, as propriedades termodinâmicas são universais onde, por exemplo, o calor específico $C \sim -1/\ln^3 T$, a susceptibilidade magnética diverge com $\chi \sim 1/(T \ln^2 T)$, e a função correlação média decai com lei de potência com expoente igual a 2 e a função correlação típica é suprimida exponencialmente, $\sim \exp\{-r^{1/2}\}$ (ver seção 2.1).

3.3.3 Considerações finais

Desejamos agora discutir alguns aspectos intrigantes do comportamento do expoente dinâmico com relação à desordem inicial mostrado na fig. 3.9. Quanto maior o expoente dinâmico, maior é a desordem do sistema no ponto fixo. Entretanto, para $\Lambda < 1$ e $\alpha < 0,6$ (linhas contínuas), quanto maior é a desordem inicial do sistema, menor é a desordem final efetiva. É intuitivo aceitar que, quanto maior a desordem inicial, maior deve ser a desordem final, uma vez que os procedimentos de renormalização aqui descritos sempre tendem a aumentar a desordem renormalizada. Como mostraremos agora, esse inesperado comportamento pode ser entendido analisando os procedimentos de renormalização no limite $\Lambda \ll 1$.

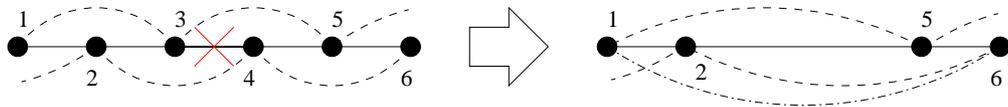


Figura 3.12: Dizimação esquemática nos primeiros estágios do GR.

Para começar vamos escrever os acoplamentos efetivos gerados pelo procedimento de dizimação nos primeiros estágios do fluxo do GR quando todos os spins ainda são spins-1/2 e os acoplamentos são AF's (ver fig. 3.12). Supondo que os spins a serem dizimados são os

S_3 e S_4 , após o procedimento de renormalização estes devem ser retirados do sistema e os acoplamentos restantes são os seguintes. Do tipo primeiros vizinhos,

$$\begin{aligned}\tilde{J}_{12} &= J_{12} - \frac{K_{13}(J_{23} - K_{24})}{2\Omega}, \\ \tilde{J}_{25} &= \frac{(J_{23} - K_{24})(J_{45} - K_{35})}{2\Omega}, \\ \tilde{J}_{56} &= J_{56} - \frac{K_{46}(J_{45} - K_{35})}{2\Omega},\end{aligned}$$

do tipo segundos vizinhos,

$$\begin{aligned}\tilde{K}_{15} &= \frac{K_{13}(J_{45} - K_{35})}{2\Omega}, \\ \tilde{K}_{26} &= \frac{K_{46}(J_{23} - K_{24})}{2\Omega},\end{aligned}$$

e surge um acoplamento do tipo terceiros vizinhos entre os spins S_1 e S_6 ,

$$\tilde{L}_{16} = \frac{K_{13}K_{46}}{2\Omega},$$

onde $\Omega = J_{34}$.

Como os acoplamentos renormalizados do tipo primeiros, segundos e terceiros vizinhos são $\mathcal{O}(\Lambda^0)$, $\mathcal{O}(\Lambda^1)$ e $\mathcal{O}(\Lambda^2)$, respectivamente, no limite em questão podemos desprezar os acoplamentos do tipo terceiros vizinhos e, dessa maneira, o sistema renormalizado é topologicamente igual ao anterior onde a magnitude dos acoplamentos entre primeiros vizinhos é muito maior que a dos acoplamentos entre segundos vizinhos. Neste caso, nenhum acoplamento FM é gerado e a magnitude dos acoplamentos entre segundos vizinhos vai a zero mais rapidamente que a dos acoplamentos entre primeiros vizinhos. Logo, o sistema flui para um ponto fixo de desordem infinita característico da cadeia de spins-1/2 AF, e portanto, está na fase dos singletos aleatórios. Este esquema é desestabilizado quando, *devido à frustração*, um acoplamento FM entre primeiros vizinhos é gerado. Dos 3 acoplamentos renormalizados desse tipo, aquele que tem a maior chance de ser FM é o

\tilde{J}_{25} , e com probabilidade

$$\begin{aligned}
P\left(\tilde{J}_{25} < 0\right) &= 2P\left(J_{23} < K_{24}\right)P\left(J_{45} > K_{35}\right), \\
&= 2\left\{\int_0^\Lambda P_J(J)\left[\int_J^\Lambda P_K(K)dK\right]dJ\right\}\times \\
&\quad \left\{1 - \int_0^\Lambda P_J(J)\left[\int_J^\Lambda P_K(K)dK\right]dJ\right\}, \\
&= \Lambda^{1-\alpha}\left(1 - \frac{1}{2}\Lambda^{1-\alpha}\right) \approx \Lambda^{1-\alpha}.
\end{aligned}$$

Como esperado, $P\left(\tilde{J}_{25} < 0\right)$ é maior quanto maior for Λ , uma vez que Λ é uma medida da frustração. Além disso, esta probabilidade aumenta com α . Quanto mais acoplamentos FM forem gerados, mais o fluxo do GR tenderá a se desviar daquele que leva o sistema para a fase dos singletos aleatórios. Como resultado, o expoente dinâmico deverá ser menor. Isto explica o comportamento anômalo de z em função de α .

No limite oposto ($\Lambda \gg 1$), este esquema de dizimação não é válido. Supondo que $\Omega = K_{35}$, o acoplamento renormalizado entre os spins S_2 e S_4 é agora um acoplamento do tipo primeiros vizinhos e igual a

$$\tilde{J}_{24} = K_{24} + \frac{J_{23}(J_{45} - J_{34})}{2\Omega},$$

enquanto o acoplamento de segundos vizinhos entre os spins S_1 e S_4 é

$$\tilde{K}_{14} = \frac{K_{13}(J_{45} - J_{34})}{2\Omega}.$$

Vemos claramente que, neste caso, um acoplamento do tipo primeiros vizinhos ganha “força” e um acoplamento entre segundos vizinhos tem grandes chances de se tornar FM logo nos primeiros estágios do GR. Dessa forma, rapidamente o sistema será dirigido para longe do PFDI em direção ao ponto fixo que governa a fase dos grandes spins. Esperamos, portanto que, neste limite, a fase dos singletos aleatórios seja atingida somente no ponto $\Lambda^{-1} = 0$.

Note que a competição entre as tendências do fluxo do GR para Λ grande e pequeno aqui analisadas leva a um valor mínimo de z (ver figs. 3.9 e 3.10). A presença desse mínimo parcialmente explica a existência da região universal onde z é aproximadamente constante.

Para finalizar essa seção, queremos utilizar o raciocínio aqui explicitado para analisar o caso considerado pela ref. [Yusuf 2003] em que a desordem é correlacionada. Nesta, Yusuf

e Yang consideraram que os acoplamentos entre primeiros vizinhos da escada zig-zag estão distribuídos de acordo com a eq. (3.7), porém, o valor dos acoplamentos entre segundos vizinhos está correlacionado com o dos primeiros através de

$$K_i = \Lambda \frac{J_i J_{i+1}}{\Omega_0}, \quad (3.12)$$

onde $\Omega_0 = 1$ e $0 < \Lambda < 1$. Em suas análises, os autores identificaram uma fase de singletos aleatórios para $\Lambda < 0,5$ e uma fase de grandes spins para $0,5 < \Lambda < 1,0$. Usando a definição de K_i acima e supondo que o acoplamento a ser dizimado é $\Omega = J_{34}$, como ilustrado na fig. 3.12, encontramos que

$$\begin{aligned} \tilde{J}_{25} &= (1 - \Lambda)^2 \frac{J_{23} J_{45}}{2\Omega}, \\ \tilde{K}_{15} &= \Lambda' \frac{J_{12} \tilde{J}_{25}}{\Omega}, \\ \tilde{K}_{26} &= \Lambda' \frac{\tilde{J}_{25} J_{56}}{\Omega}, \end{aligned}$$

onde $\Lambda' = \Lambda / (1 - \Lambda)$. Negligenciando o acoplamento entre terceiros vizinhos e as correlações nas constantes de acoplamento J_{12} e J_{56} , o novo hamiltoniano tem a mesma forma que o original exceto pelo fato de que o parâmetro de frustração Λ para \tilde{K}_{15} e \tilde{K}_{26} foi renormalizado. Note que, pela definição de K_i (ver eq. (3.12)), nas primeiras dizimações não há possibilidade de geração de um acoplamento FM. Entretanto, num estágio imediatamente depois, há uma probabilidade finita de surgimento de um acoplamento FM aparecer se $\Lambda' > 1$. Isto acontece se $\Lambda > 0,5$. Neste caso, a frustração é suficientemente forte para gerar acoplamentos FM's, que é o mecanismo que dirige o sistema para longe da fase dos singletos aleatórios em direção à fase dos grandes spins.

3.4 Conclusões

Neste capítulo, nós aplicamos o método do grupo de renormalização para desordem forte para estudar as escadas de duas pernas e zig-zag de spins-1/2 antiferromagnéticas.

Focamo-nos principalmente na estrutura topológica do sistema e encontramos que, nos primeiros estágios do fluxo de renormalização inúmeros acoplamentos de longo alcance eram gerados, mas assim que o fluxo era levado para o ponto fixo, somente interações entre primeiros vizinhos restavam. Portanto, de maneira indubitável, concluimos que as escadas

renormalizam para uma cadeia de spins (ver figs. 3.3 e 3.7). Tal conclusão nos permitiu classificar as classes de universalidade desses sistemas em termos daquelas das escadas de spins analisadas no capítulo 2.

As escadas de duas pernas sempre renormalizam para uma cadeia de spins-1/2 AF dimerizada. Para o tipo de desordem analisada, ou o sistema se encontra na fase de Haldane desordenada ou na fase de Griffiths. Ambas as fases são caracterizadas por um expoente dinâmico z não universal, onde na primeira, $0 < z < 1$, e na segunda, $z \geq 1$. Nessas fases, a susceptibilidade magnética escala com $\chi \sim T^{-1+1/z}$ e a relação entre as escalas de comprimento, L , e energia, Ω , é $\Omega \sim L^{-z}$. Como o sistema é dimerizado em ambas as fases, a função de correlação média deve ser de curto alcance. A distinção entre as duas fases se deve simplesmente ao fato de que na primeira a desordem não foi capaz de destruir por completo o "gap" de spin (o "gap" de Haldane) presente no sistema limpo, possuindo assim um pseudo-"gap", enquanto na segunda, este foi completamente destruído. Procurando no espaço de parâmetros os pontos onde $z = 1$, construímos o diagrama de fases desse sistema como ilustrado na fig. 3.4. Dessa maneira, concluímos que a escada de duas pernas sempre está na mesma classe de universalidade que a da cadeia de spins-1/2 AF dimerizada.

A escada zig-zag, entretanto, ou renormaliza para uma cadeia de spins FM e AF, ou, para desordem e frustração suficientemente pequenas, renormaliza para uma cadeia de spins-1/2 AF. No primeiro caso, o sistema se encontra na mesma classe de universalidade que aquela da cadeia de spins FM e AF. O sistema é caracterizado por um expoente dinâmico z que governa as leis de escala entre comprimento e energia, $\Omega \sim L^{-z}$, mas a susceptibilidade magnética segue uma lei de Curie, $\chi \sim T^{-1}$. Além disso, os spins efetivos que governam a física de baixas energias escala de uma maneira interessante com o tamanho do aglomerado, $\langle S \rangle \sim \sqrt{L}$ (ver fig. 3.8), por isso dizemos que o sistema se encontra na fase dos grandes spins. As funções de correlação média e típica têm comportamentos semelhantes e decaem logaritmicamente. O sistema não possui ordem de longo alcance, mas possui correlações que decaem mais lentamente que no caso de quase-longo-alcance. Além disso, o sistema apresenta uma região universal onde z independe da frustração Λ e da desordem α (ver fig. 3.11). Entretanto, esse ponto fixo universal é diferente daquele observado nas cadeias FM's e AF's. Para desordem e frustração suficientemente pequenas, o expoente dinâmico diverge, acoplamentos FM's não são gerados, e a escada renormaliza para a cadeia de spins-1/2 desordenada. Logo, concluímos que o sistema se encontra na fase dos singletos aleatórios, governada por um ponto fixo universal de desordem infinita.

Nesta, a susceptibilidade magnética diverge com $\chi \sim 1/(T \ln^2 T)$ e a função de correlação média cai com lei de potência cujo expoente é universal igual a 2. A função de correlação típica é de curto alcance e $\sim \exp -\sqrt{L}$. Além disso, com simples argumentos, indicamos o mecanismo que leva a escada zig-zag para longe do ponto fixo de desordem infinita: este é a frustração. É este elemento que permite que acoplamentos FM's sejam gerados de maneira descorrelacionada no sistema acarretando assim um aumento efetivo da magnitude dos aglomerados de spins efetivos, levando assim o sistema para a fase dos grandes spins. Da mesma maneira, indicamos o diagrama de fases para a escada correlacionada encontrada por Yusuf e Yang na ref. [Yusuf 2003]. Nossas conclusões estão em acordo com as de Yusuf e Yang mas divergem das de Mélin *et al.* reportadas na ref. [Mélin 2002].

Finalmente, queremos salientar que o fato das duas escadas renormalizarem para uma cadeia não deve ser exclusivo desses sistemas. Provavelmente, sistemas com topologias quase-unidimensionais, como por exemplo a cadeia de 3 pernas, no limite de baixas energias, devem se comportar como uma cadeia. Essa extrapolação é utilizada por Continentino *et al.* no estudo de vários boratos altamente anisotrópicos. As medidas experimentais de susceptibilidade magnética estão em acordo com as previstas neste capítulo [Continentino 2005].

Capítulo 4

As cadeias isotrópicas de spins $SU(N)$

Neste capítulo relatamos o nosso estudo sobre as cadeias isotrópicas de spins $SU(N)$ anti-ferromagnéticas desordenadas.

O nosso estudo é focado em cadeias cujos spins são representações irredutíveis *totalmente anti-simétricas* do grupo $SU(N)$. Nós generalizamos o método do GRDF para levar em conta a dizimação de tais spins. Em seguida nós escrevemos a equação de fluxo para as constantes de acoplamento e a resolvemos analiticamente. Encontramos um único ponto fixo estável de desordem infinita que dirige o sistema para uma *fase universal* independente da desordem inicial, e portanto o método se torna assintoticamente exato. As quantidades termodinâmicas e as funções de correlação média e típica são calculadas em função de N .

Recomendamos ao leitor a leitura das referências [Cheng 1988] e [Jones 1990] para uma introdução à teoria de grupos, em especial ao grupo $SU(N)$ e tabelas de Young. Entretanto, o leitor não deve ser um especialista em teoria de grupos para entender os cálculos que são apresentados, podendo até dispensar a leitura dessas referências se o intuito for somente entender a física de baixas energias desses sistemas. Como nos focamos nos spins cujas representações são totalmente anti-simétricas, pode-se escrevê-los como função de operadores fermiônicos de criação e destruição, e a partir destes deduzir as regras necessárias de dizimação. Também fazemos uso das tabelas de Young. Estas são extremamente convenientes para calcular o valor do "gap" de excitação de um par de spins acoplados, para calcular a série de Clebsch-Gordan de duas representações irredutíveis e para ilustrar os procedimentos/regras de dizimação.

Como mencionamos na introdução, a motivação para tal estudo é múltipla. No estudo de compostos dopados por terras raras e/ou actinídeos, Coqblin e Schrieffer consideraram a interação dessas impurezas com os elétrons de condução do sistema e mostraram que esta

apresenta uma simetria aumentada dada pelo grupo $SU(N)$. Quando os graus de liberdade dos elétrons de condução são integrados, o hamiltoniano torna-se aquele que descreve a interação efetiva entre as impurezas magnéticas, que são os íons de terras raras e actinídeos. Tal hamiltoniano magnético efetivo pode possuir, em certas condições, simetria por rotações do grupo $SU(N)$, sendo N a degenerescência do momento magnético fundamental do íon. Por exemplo, o íon Ce^{3+} tem um único elétron na camada $4f$ e todos os outros orbitais preenchidos. Pelas regras de Hund, a soma do momento angular ($l = 3$) com o momento de spin ($s = 1/2$) resulta em um momento magnético total igual a $j = 5/2$, ou seja, a degenerescência do orbital $4f^1$ é igual a 6, portanto, neste caso $N = 6$. Analogamente, o íon Yb^{+3} , com 13 elétrons na camada $4f$, tem momento magnético total igual a $j = 7/2$ e, portanto, $N = 8$. Este resultado pode ser entendido como se a forte interação spin-órbita alinhasse os momentos magnéticos de spin e orbital. A descrição da entidade efetiva que descreve o momento magnético total requer um aumento do grupo de simetria de $SU(2)$ para $SU(N)$. Por fim, a condição que deve ser satisfeita para que o hamiltoniano efetivo possua simetria $SU(N)$ é que o campo cristalino do substrato não quebre a degenerescência do momento magnético fundamental [Coqblin 1969] e que as bandas de condução também preservem essa simetria.

O hamiltoniano do modelo de Hubbard com dupla degenerescência orbital, no limite fortemente interagente e no preenchimento de 2 elétrons por sítio, também tem, sob algumas condições, simetria aumentada de $SU(2)$ para $SU(4)$ (como abordaremos em mais detalhes na seção 5.1) e tem atraído muita atenção recentemente [Azaria 1999, Li 1998, Yamashita 1998].

Além disso, cadeias de pontos quânticos que têm seu orbital p semi-preenchido também podem ser descritas por uma cadeia de spins $SU(4)$. Neste caso, a degenerescência orbital não é levantada pela repulsão Coulombiana devido a certas peculiaridades do potencial do ponto quântico [Onufriev 1999].

Finalmente, técnicas aproximativas de N infinito são comumente usadas no intuito de capturar a física de N pequeno. Podemos estudar a física no limite de N grande através do método de ponto de sela e, em princípio, obter correções ordem a ordem em $1/N$ [Sachdev 1999]. Neste trabalho, nós resolvemos o problema assintoticamente para todos os valores de N . Dessa forma, podemos verificar se a física do sistema no limite N infinito captura ou não o comportamento físico do sistema para N pequeno.

O capítulo é dividido da seguinte maneira. Na seção 4.1 introduzimos muito brevemente o grupo $SU(N)$ e as tabelas de Young no intuito de dar noções sobre a álgebra envolvida, na

seção 4.2 motivamos e escrevemos o hamiltoniano de interesse, na seção 4.3 generalizamos o método do GR propriamente dito, na seção 4.4 resolvemos as equações de fluxo do GR, na seção 4.5 calculamos as propriedades termodinâmicas dessas cadeias, e finalmente na seção 4.7 resumimos nossas conclusões.

4.1 O grupo $SU(N)$

Por completeza, nesta seção devemos definir o grupo $SU(N)$.

Este é chamado de grupo unitário especial por ser o grupo das matrizes unitárias $N \times N$ que possuem determinante igual a 1, ou seja, se U é uma matriz desse grupo, então

$$U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbf{1}, \text{ e } \det U = 1.$$

Mas qualquer matriz unitária pode ser escrita em termos de uma matriz hermitiana, S , na forma $U = \exp iS$. Pela identidade $\det e^S = e^{\text{tr}S}$ e por $\det U = 1$, segue que $\text{tr}S = 0$. Como existem $N^2 - 1$ matrizes hermitianas $N \times N$ de traço nulo linearmente independentes, então um elemento do grupo $SU(N)$ pode ser escrito como

$$U = \exp \left\{ i \sum_{a=1}^{N^2-1} c_a S^{(a)} \right\},$$

onde os c_a 's são números reais ditos parâmetros do grupo e as matrizes S 's são ditas geradoras do grupo. Ao conjunto de matrizes U 's geradas pelas matrizes S 's denomina-se representação irredutível fundamental do grupo, que na notação de tabelas de Young é representada por uma simples caixa, \square . Como somente $N - 1$ das $N^2 - 1$ matrizes geradoras são diagonais, diz-se então que o $SU(N)$ é um grupo de posto $N - 1$.

No caso $SU(2)$, as matrizes S 's são usualmente as matrizes de Pauli. Delas geram-se todas as outras representações do grupo $SU(2)$, i. e., todos os outros spins maiores que $1/2$. Por exemplo, um spin de tamanho 1 é obtido quando se simetizam dois spins $1/2$, que na notação de tabelas de Young é concatenar duas caixas horizontalmente, ou seja, um spin 1 equivale a $\square \square$. Por sua vez, o estado de singleto entre dois spins $1/2$ é obtido através da anti-simetrização dos mesmos. Em notação de tabela de Young significa que devem-se empilhar duas caixas verticalmente, ou seja, o singleto equivale à $\begin{array}{c} \square \\ \square \end{array}$. A dimensão de uma tabela de Young é a dimensão linear em que atua a representação, ou

seja, é a dimensão das matrizes da representação. Esta ainda representa o número de graus de liberdade associado ao spin correspondente. Por exemplo, no grupo $SU(2)$, uma caixa tem dimensão igual à 2 (representando os dois estados de um spin $1/2$), duas caixas concatenadas horizontalmente tem dimensão 3 (correspondente aos estados de um spin-1) e duas caixas concatenadas verticalmente tem dimensão 1 (só há uma maneira de anti-simetrizar 2 números quânticos tomados dois a dois). A série de Clebsh-Gordan de dois spins $1/2$ é representada, na notação de tabelas de Young, por

$$\square \otimes \square = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \square \square ,$$

que correspondem às regras quânticas de soma de momento angular.

Essas duas tabelas compostas por duas caixas representam os auto-estados de um hamiltoniano invariante por rotações do grupo $SU(2)$, que descreve a interação entre dois spins $1/2$ (por exemplo o hamiltoniano descrito na eq. (2.2)). As auto-energias correspondentes são dadas pela quantidade chamada Casimir, que na linguagem de spins $SU(2)$ é o operador momento angular total ao quadrado, $\hat{S}^2 = S(S+1)$, onde $\mathbf{S} = \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$, e \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 são os operadores de spins- $1/2$ do hamiltoniano (2.2). No momento oportuno mostraremos como calcular os Casimires de nosso interesse.

Por fim, devemos listar a relação de comutação entre as matrizes geradoras do grupo,

$$[S^{(a)}, S^{(b)}] = f^{a,b,c} S^{(c)}, \quad (4.1)$$

onde $f^{a,b,c}$ é dito fator de estrutura do grupo. No caso $SU(2)$, por exemplo, $f^{a,b,c}$ é igual ao tensor de Levi-Civita multiplicado por i .

Podemos associar operadores S^a 's às matrizes $S^{(a)}$'s em termos de operadores de criação, f^\dagger , e aniquilação, f , de férmions, ou seja, podemos criar uma representação do grupo $SU(N)$ em termos dos operadores

$$S^a = \sum_{\alpha,\beta} f_\alpha^\dagger S_{\alpha,\beta}^{(a)} f_\beta, \quad (4.2)$$

onde $S_{\alpha,\beta}^{(a)}$ são os elementos da matriz $S^{(a)}$ da *representação fundamental*. Pode-se mostrar que os operadores \mathbf{S} satisfazem as relações de comutação, eq. (4.1). A formulação (4.2) não se restringe à representação fundamental. Na verdade, os operadores \mathbf{S} são operadores de qualquer representação totalmente anti-simétrica. Na notação de tabelas de Young, estes equivalem à tabelas formadas por Q caixas concatenadas verticalmente. A representação

é especificada restringindo a definição (4.2) ao sub-espço em que

$$\sum_{\alpha=1}^N f_{\alpha}^{\dagger} f_{\alpha} = Q.$$

Note que esta formulação é semelhante à representação dos bósons de Schwinger para spins $SU(2)$ [Fradkin 1991, Read 1989]. Sendo \mathbf{S} um operador de spin- S do grupo $SU(2)$, então este pode ser escrito em termos dos operadores bosônicos b e b^{\dagger} como

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} b_{\alpha}^{\dagger} \vec{\sigma}_{\alpha,\beta} b_{\beta},$$

onde

$$\sum_{\alpha=1}^N b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha} = 2S.$$

Na notação de tabelas de Young, um operador de spin- S do grupo $SU(2)$ corresponde a uma tabela formada por $2S$ caixas concatenadas horizontalmente.

Há uma outra combinação linear conveniente dos operadores S em termos de operadores de criação, f^{\dagger} , e aniquilação, f , de férmions,

$$S_{\alpha,\beta} = f_{\alpha}^{\dagger} f_{\beta} - \frac{1}{N} \delta_{\alpha,\beta}, \quad (4.3)$$

onde α, β correm de 1 até N , e a delta de Kronecker assegura que as matrizes associadas aos operadores tenham traço nulo. (Note que dessa maneira constróem-se N^2 operadores, porém um deles é linearmente dependente dos demais.) Dessa maneira, os operadores $S_{\alpha,\beta}$ obedecem a seguinte álgebra de Lie,

$$[S_{\alpha,\beta}, S_{\mu,\nu}] = \delta_{\beta,\mu} S_{\alpha,\nu} - \delta_{\alpha,\nu} S_{\mu,\beta}.$$

Portanto, as regras de comutação na formulação (4.3) não depende do fator de estrutura do grupo.

4.2 O hamiltoniano

Em compostos com impurezas diluídas de terras-raras (Cério, por exemplo), o hamiltoniano efetivo que descreve as interações entre os momentos magnéticos dessas impurezas pode ser invariante por transformações do grupo $SU(N)$, onde N é a degenerescência do

multipleteo fundamental da impureza [Coqblin 1969]. Mais recentemente, Onufriev e Mars-ton mostraram que uma cadeia de pontos quânticos pode ser modelada como uma cadeia de spins SU(4) auto-conjugada [Onufriev 1999]. Essa modelagem é possível porque a interação Coulombiana entre os dois elétrons que compartilham um mesmo ponto quântico pode ser, *em certas condições*, negligenciada. Dois elétrons que compartilham o mesmo orbital atômico em um cristal, por exemplo, não podem ser descritos por uma entidade com simetria maior porque a interação Coulombiana levanta a degenerescência desse orbital. Isto reduz a simetria do sistema para a simetria mínima SU(2) intrínseca dos spins. A peculiaridade do potencial efetivo de um ponto quântico permite que os estados permaneçam degenerados, e dessa maneira, a simetria do problema é aumentada para SU(4) [Onufriev 1999]. Recentemente, os modelos de Hubbard com dupla degenerescência orbital têm despertado bastante interesse. No limite fortemente interagente e no preenchimento 1/4 o hamiltoniano magnético efetivo se reduz ao modelo de Heisenberg de spins SU(4) cujas representações são a fundamental [Yamashita 1998, Azaria 1999].¹ Além disso, modelos de spins SU(N) no limite $N \rightarrow \infty$ são de grande interesse no estudo de sistemas quânticos antiferromagnéticos. Quando tomamos o limite de N -grande, muitos modelos podem ser resolvidos pelo método de ponto de sela e correções de N finito podem ser, a priori, obtidas de maneira controlada. Tal aproximação tem tido muito sucesso por descrever uma enorme variedade de fases encontradas nesses sistemas [Sachdev 1999]. Entretanto, raramente há a possibilidade de acompanhar a solução de um modelo com o aumento progressivo de N . Como será relatado ao longo deste capítulo, tal possibilidade é aqui realizada.

Entender como o aumento da simetria muda a física das cadeias de spins, bem como o papel da desordem, é fundamental para a interpretação dos resultados experimentais. Por esses motivos, estudaremos as cadeias desordenadas antiferromagnéticas de spins cujo grupo de simetria é o SU(N), com $N \geq 2$.

O hamiltoniano naturalmente generalizado é

$$H = \sum_i^{L_0} J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (4.4)$$

onde $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \sum_{a=1}^{N^2-1} S_i^{(a)} S_j^{(a)}$, as matrizes $S_i^{(a)}$'s são as geradoras de uma representação irredutível (RI) do grupo SU(N) referente ao sítio i , onde $a = 1, \dots, N^2 - 1$, os J_i 's são variáveis aleatórias independentes maiores que zero, e L_0 é o número de sítios na cadeia.

Nosso interesse é estudar as cadeias cujas RI's são totalmente anti-simétricas, que na

¹Voltaremos com mais detalhes a esse sistema no próximo capítulo.

notação de tabelas de Young ("Young Tableaux" no original) são representadas por um número Q de caixas concatenadas verticalmente. Ou seja,

$$\mathbf{S}_i \text{ equivale a } \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \vdots \\ \hline Q_i \\ \hline \end{array},$$

onde $1 \leq Q_i \leq N - 1$. Sendo assim, podemos escrever as RI's do grupo $SU(N)$ como funções de operadores de criação e aniquilação de férmions: $\mathbf{S}_i = f_{i\alpha}^\dagger \mathbf{S}_{\alpha\beta} f_{i\beta}$, onde $\sum_{\alpha=1}^N f_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} = Q_i$, e $\mathbf{S}_{\alpha\beta}$ são as matrizes da RI fundamental. Esta é a generalização natural de um spin $SU(2)$ para $SU(N)$.

Como mencionamos anteriormente, podemos tratar o problema do ponto de vista fermiônico. Substituindo a identidade (A.3) (ver apêndice A) na eq. (4.4),

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \frac{1}{2} J_i \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} f_{i\alpha}^\dagger f_{i\beta} f_{i+1\gamma}^\dagger f_{i+1\delta} \left(\delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{1}{N} \delta_{\delta\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right) \\ &= \sum_i \frac{1}{2} J_i \left(\sum_{\alpha\beta} f_{i\alpha}^\dagger f_{i\beta} f_{i+1\beta}^\dagger f_{i+1\alpha} - \frac{1}{N} \sum_{\alpha\beta} f_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} f_{i+1\beta}^\dagger f_{i+1\beta} \right). \end{aligned}$$

Note que o último termo é constante igual a $-\sum J_i Q_i Q_{i+1} / (2N)$.

Assim, definimos o novo hamiltoniano:

$$H = \sum_i \frac{J_i}{2} \sum_{\alpha\beta} f_{i\alpha}^\dagger f_{i\beta} f_{i+1\beta}^\dagger f_{i+1\alpha} - \frac{1}{2N} \sum_i J_i Q_i Q_{i+1}, \quad (4.5)$$

sujeito aos vínculos

$$\sum_{\alpha=1}^N f_{i\alpha}^\dagger f_{i\alpha} = Q_i.$$

Para estudar a física de baixas energias desse sistema, utilizamos a técnica do grupo de renormalização introduzido por Ma, Dasgupta e Hu e descrito no cap. 2 [MDH 1979]. Mostraremos a generalização do método para o sistema em questão na próxima seção.

Note ainda que o hamiltoniano (4.4) possui simetria "partícula-buraco". Isso quer dizer que o espectro de H deve permanecer o mesmo se trocamos as RI's dos spins S_i 's pelas RI's conjugadas.² Ou seja, o espectro de H permanece o mesmo se fazemos $Q_i \rightarrow N - Q_i$.

²Uma RI totalmente anti-simétrica é conjugada à outra (necessariamente totalmente anti-simétrica) quando o total de caixas que compõem suas tabelas de Young somam N .

Considere a matriz da RI fundamental. Os auto-estados correspondentes são

$$f_{\alpha_1}^\dagger |0\rangle,$$

onde α_1 vai de 1 até N , e $|0\rangle$ é o estado de vácuo. Os auto-estados da matriz da RI conjugada à RI fundamental são

$$f_{\alpha_1}^\dagger \dots f_{\alpha_{N-1}}^\dagger |0\rangle.$$

Redefinindo o vácuo como o estado completamente cheio, $|1, 2, \dots, N\rangle = |\bar{0}\rangle$, estes últimos auto-estados podem ser reescritos como,

$$f_{\alpha_1} |\bar{0}\rangle.$$

Analogamente, os auto-estados da matriz da RI fundamental tornam-se

$$f_{\alpha_1} \dots f_{\alpha_{N-1}} |\bar{0}\rangle.$$

Isto tudo é equivalente a trocar $f \rightleftharpoons f^\dagger$ e $Q \rightleftharpoons N - Q = \bar{Q}$. Como tais trocas deixam o hamiltoniano (4.5) invariante (além de um termo constante), dizemos que o sistema tem simetria “partícula-buraco”.

Por fim, concluímos essa seção justificando o mapeamento do sistema em operadores de criação e aniquilação de férmions. A única motivação para tal é por conveniência. Temos bastante experiência com tais operadores e com eles obtivemos as regras de dizimação. Algum especialista em grupos $SU(N)$ poderia obter essas regras usando propriedades do grupo. Escolhemos essa abordagem por ser mais familiar para nós, físicos da matéria condensada.

4.3 Generalização do Grupo de Renormalização

Nesta seção, generalizamos o procedimento de renormalização introduzido por Ma, Dasgupta e Hu [MDH 1979].

Primeiramente, definimos como Δ_i a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental de um sistema de dois spins acoplados entre si via,

$$H_0 = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3, \tag{4.6}$$

onde estamos supondo que $i = 2$. Os auto-estados de (4.6) são aqueles representados pelas RI's da série de Clebsch-Gordan de $Q_2 \otimes Q_3$, que na notação de tabela de Young é

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \vdots \\ \hline Q_2 \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \vdots \\ \hline Q_3 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \cdot \\ \hline \cdot \\ \hline \cdot \\ \hline \tilde{Q} \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & \\ \hline \cdot & \\ \hline \cdot & \\ \hline \cdot & \\ \hline Q' \\ \hline \end{array} \oplus \dots \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline \vdots & \vdots \\ \hline Q_2 & Q_3 \\ \hline \end{array}$$

onde $\tilde{Q} = Q_2 + Q_3$, $Q' = \tilde{Q} - 1$, e estamos supondo que $Q_2 + Q_3 \leq N$ e $Q_3 \leq Q_2$. Caso $Q_2 + Q_3 > N$, a série de Clebsch-Gordan será dada pelas RI's conjugadas da série de Clebsch-Gordan das RI's conjugadas de S_2 e S_3 , uma vez que $\bar{Q}_2 + \bar{Q}_3 \leq N$, onde $\bar{Q} = N - Q$ é o número de caixas da RI conjugada de uma RI totalmente anti-simétrica [Cheng 1988, Jones 1990].

No procedimento de renormalização, substituiremos os dois spins S_2 e S_3 por um novo spin \tilde{S} , que é representado pela tabela de Young de mais baixa energia da série acima, e descartamos os demais estados excitados. Como $J_2 > 0$, a RI totalmente anti-simétrica é a de mais baixa energia. Dessa forma, todos os spins da cadeia renormalizada continuam representados por RI's totalmente anti-simétricas.

Como a tabela de Young em forma de Γ representa o primeiro estado excitado, necessitamos do valor de seu Casimir para o cálculo de Δ_i . Este se encontra derivado no apêndice B, o que nos leva a,

$$\Delta_i = \begin{cases} \frac{1}{2} J_i (Q_2 + Q_3), & \text{se } Q_2 + Q_3 \leq N, \\ \frac{1}{2} J_i (2N - Q_2 - Q_3) = \frac{1}{2} J_i (\bar{Q}_2 + \bar{Q}_3), & \text{se } Q_2 + Q_3 > N. \end{cases} \quad (4.7)$$

Uma vez definido o "gap" de excitação do acoplamento entre dois spins, procuramos na cadeia o par de spins mais fortemente acoplados, ou seja, procuramos o maior "gap" de excitação $\Omega = \max \{\Delta_i\}$. No limite de baixas escalas de energia ($T \ll \Omega$), dizemos que estes dois spins estão "congelados" no multipletto fundamental, portanto devemos descartar os graus de liberdade correspondentes aos multipletos mais excitados. Isto corresponde a substituir os spins S_2 e S_3 por um spin efetivo \tilde{S} que é representado pelo multipletto de mais baixa energia. Devemos ainda projetar sobre este, o hamiltoniano que liga o resto da cadeia a esses dois spins,

$$H_1 = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_3 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4. \quad (4.8)$$

Na verdade, isto é equivalente a tratar H_1 como uma perturbação de H_0 . Para $Q_2 + Q_3 \neq N$ (ver apêndice C.1), o hamiltoniano efetivo é

$$H^{ef} = \tilde{J}_1 \mathbf{S}_1 \cdot \tilde{\mathbf{S}} + \tilde{J}_3 \tilde{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{S}_4, \quad (4.9)$$

onde

$$\tilde{J}_1 = \begin{cases} \xi J_1, & \text{se } Q_2 + Q_3 < N, \\ \bar{\xi} J_1, & \text{se } Q_2 + Q_3 > N, \end{cases} \quad (4.10)$$

$$\tilde{J}_3 = \begin{cases} (1 - \xi) J_3, & \text{se } Q_2 + Q_3 < N, \\ (1 - \bar{\xi}) J_3, & \text{se } Q_2 + Q_3 > N, \end{cases} \quad (4.11)$$

com $\xi = Q_2 / (Q_2 + Q_3)$ e $\bar{\xi} = \bar{Q}_2 / (\bar{Q}_2 + \bar{Q}_3)$, e o spin $\tilde{\mathbf{S}}$ corresponde a um RI totalmente anti-simétrica composta por \tilde{Q} caixas, onde

$$\tilde{Q} = \begin{cases} Q_2 + Q_3, & \text{se } Q_2 + Q_3 < N, \\ Q_2 + Q_3 - N, & \text{se } Q_2 + Q_3 > N. \end{cases} \quad (4.12)$$

No caso em que $Q_2 + Q_3 = N$, o estado fundamental é um singleto, e portanto não há um spin $\tilde{\mathbf{S}}$ correspondente, ou seja, não há correções em primeira ordem de teoria de perturbação. Ambos os spins S_2 e S_3 são retirados do sistema e H_1 deve ser tratado em *segunda ordem de teoria de perturbação* (ver apêndice C.2), o que leva a um hamiltoniano efetivo dado por

$$H^{ef} = \tilde{J} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4, \quad \text{onde } \tilde{J} = 2 \frac{Q_2 Q_3}{N^2 (N - 1)} \frac{J_1 J_3}{J_2}, \quad (4.13)$$

que corresponde a um acoplamento efetivo entre os spins vizinhos, S_1 e S_4 , originado por *polarizações virtuais* do singleto.

Esta é a generalização do grupo de renormalização para cadeias de spin $SU(N)$ cujas representações são totalmente anti-simétricas. A fig. 4.1 ilustra esquematicamente o procedimento de dizimação, que pode ser resumido em dois passos. (i) Procure o maior "gap" de excitação na cadeia, digamos $\Omega = \Delta_2$, em seguida (ii) retire do sistema os spins S_2 e S_3 que o compartilham e, (ii.a) se $Q_2 + Q_3 = N$, acople os spins vizinhos de acordo com a eq. (4.13), caso contrário (ii.b), insira um novo spin $\tilde{\mathbf{S}}$ de acordo com a eq. (4.12) e acople-o com os spins vizinhos de acordo com as eqs. (4.10) e (4.11). A semelhança destes procedimentos com os do método do GRDF para tratar a cadeia de spins com acoplamentos FM's e AF's é evidente.

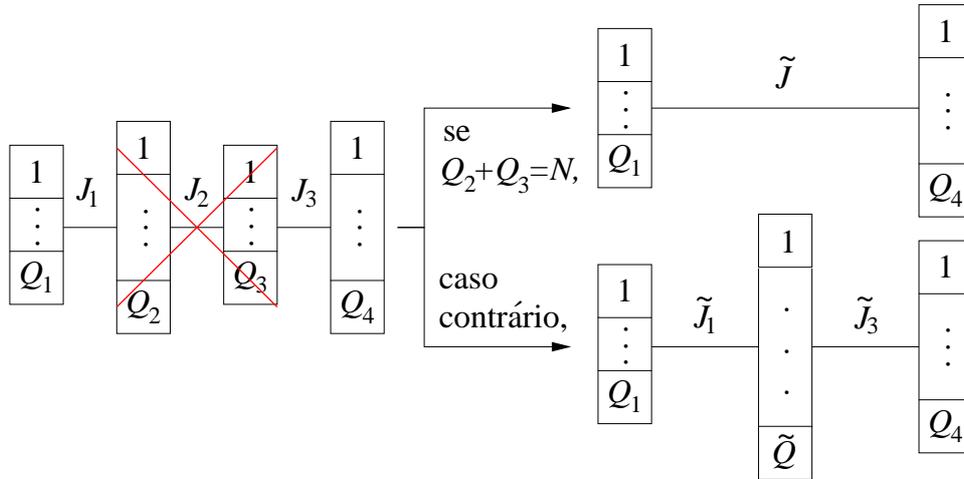


Figura 4.1: Procedimento esquemático da dizimação em uma cadeia de spins $SU(N)$.

A seguir, aplicamos esse método para as cadeias de spins $SU(N)$ e procuramos por pontos fixos.

4.4 Aplicação do método do GR

Nesta seção, aplicamos a generalização do método do GR às cadeias de spins $SU(N)$. Derivamos as equações de fluxo e encontramos analiticamente os pontos fixos correspondentes.

4.4.1 As dizimações do grupo $SU(3)$

Antes de darmos continuidade à aplicação do método do GR nas cadeias de spins $SU(N)$, queremos ilustrar brevemente todos os possíveis procedimentos de dizimação na cadeia de spins $SU(3)$. O objetivo para tal é familiarizar o leitor com os mesmos e com a notação de tabelas de Young.

Por se tratar do grupo $SU(3)$, as únicas RI's totalmente anti-simétricas são aquelas denotadas por uma ou duas caixas empilhadas verticalmente, ou seja, $Q_i = 1$ ou $2, \forall i$, onde a RI cuja tabela de Young tem $Q = 1$ é dita fundamental, caso contrário, é dita antifundamental. Assim, as seguintes séries de Clebsch-Gordan de interesse são:

$$\bullet \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array},$$

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} = \mathbf{1} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}, \\
 \bullet \quad & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array},
 \end{aligned}$$

onde $\mathbf{1}$ denota a tabela de Young com 3 caixas empilhadas verticalmente que tem dimensão unitária por se tratar do estado singlete. Estas séries dizem respeito aos processos de dizimação que podem ocorrer durante a iteração do GR. Se o acoplamento de maior "gap" de excitação (Ω) for compartilhado por dois spins cujas representações são as fundamentais, estes devem ser retirados do sistema e substituídos por um spin efetivo cuja representação é a antifundamental. Caso Ω seja compartilhado por um spin fundamental e um antifundamental, os dois serão retirados do sistema e um acoplamento efetivo surge entre os spins vizinhos a estes. Note que o terceiro processo é semelhante ao primeiro se tomamos o conjugado das representações.

Dessa maneira, conforme as eqs. (4.10), (4.11), (4.12) e (4.13), as renormalizações pertinentes ao grupo $SU(3)$ são:

$$\begin{aligned}
 1. \quad & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_1} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_2} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_3} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{\tilde{J}_1} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{\tilde{J}_3} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}, \\
 2. \quad & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_1} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_2} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_3} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{\tilde{J}} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}, \\
 3. \quad & \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_1} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_2} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{J_3} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \Rightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{\tilde{J}_1} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \xrightarrow{\tilde{J}_3} \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array},
 \end{aligned}$$

onde $\tilde{J}_1 = J_1/2$, $\tilde{J}_3 = J_3/2$, $\tilde{J} = 2J_1J_3/(9J_2)$, e o "gap" de excitação é $\Omega = \Delta_2$, com

$$\Omega = \begin{cases} J_2, & \text{nos processos 1 e 3,} \\ \frac{3}{2}J_2, & \text{no processo 2,} \end{cases}$$

onde usamos que o Casimir da RI $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$ é igual ao Casimir da RI $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$, uma vez que uma RI é a conjugada da outra.

4.4.2 Distribuição de Ponto Fixo

Finalmente iremos escrever a equação de fluxo da distribuição conjunta de RI's e "gaps" de excitação da cadeia isotrópica de spins $SU(N)$ AF desordenada.

O procedimento de renormalização pode ser descrito em termos de conexões, onde definimos como conexão a trinca de valores (Q_i, Δ_i, Q_{i+1}) que são renormalizados a cada passo de dizimação. Dessa maneira, devemos considerar a distribuição $P(Q_E, \Delta, Q_D; \Omega) d\Delta$ que dá a probabilidade de se encontrar um "gap" de excitação entre Δ e $\Delta + d\Delta$ cujo acoplamento é compartilhado por spins cujas RI's tem Q_E e Q_D caixas, respectivamente, tudo isso na escala de energia Ω ("cut-off" de P).

A equação de fluxo que rege as transformações do GR é dada por

$$P(Q_E, \Delta, Q_D; \Omega - d\Omega) \times \text{Norm} = P(Q_E, \Delta, Q_D; \Omega) + R_1[P] + R_2[P], \quad (4.14)$$

onde Norm é igual à 1 (unidade) menos a fração de conexões perdida por $P(Q_E, \Delta, Q_D; \Omega)$ quando $\Omega \rightarrow \Omega - d\Omega$, para manter $P(Q_E, \Delta, Q_D; \Omega - d\Omega)$ normalizada. Os funcionais R_1 e R_2 correspondem as frações de conexões perdidas e adquiridas por P quando da dizimação em primeira e segunda ordem de teoria de perturbação, respectivamente.

O primeiro termo, e o mais simples de todos, é o fator de normalização

$$\begin{aligned} \text{Norm} = & 1 - d\Omega \sum_{Q_E, Q_D} P(Q_E, \Omega, Q_D; \Omega) (1 - \delta_{Q_E+Q_D, N}) \\ & - 2d\Omega \sum_{Q_E, Q_D} P(Q_E, \Omega, Q_D; \Omega) \delta_{Q_E+Q_D, N}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde o segundo (terceiro) termo do lado direito da equação é igual à fração de conexões perdidas na cadeia (ou por P) por dizimações em primeira (segunda) ordem de teoria de perturbação.

O funcional R_1 é dado por

$$\begin{aligned} R_1 = & d\Omega \sum_{Q_2, Q_3} P(Q_2, \Omega, Q_3) (1 - \delta_{Q_2+Q_3, N}) \sum_{Q_1, Q_4} \int d\Delta_1 \int d\Delta_3 \\ & P(Q_1, \Delta_1, Q_2 | Q_2, \Omega, Q_3) P(Q_3, \Delta_3, Q_4 | Q_1, \Delta_1, Q_2, \Omega, Q_3) \\ & \times \left[\delta(\Delta - \tilde{\Delta}_1) \delta_{Q_E, Q_1} \delta_{Q_D, \tilde{Q}} - \delta(\Delta - \Delta_1) \delta_{Q_E, Q_1} \delta_{Q_D, Q_2} \right. \\ & \left. + \delta(\Delta - \tilde{\Delta}_3) \delta_{Q_E, \tilde{Q}} \delta_{Q_D, Q_4} - \delta(\Delta - \Delta_3) \delta_{Q_E, Q_3} \delta_{Q_D, Q_4} \right], \end{aligned} \quad (4.16)$$

onde $P(Q_2, \Omega, Q_3) P(Q_1, \Delta_1, Q_2 | Q_2, \Omega, Q_3) P(Q_3, \Delta_3, Q_4 | Q_1, \Delta_1, Q_2, \Omega, Q_3) d\Delta_1 d\Omega d\Delta_3$ é a probabilidade de encontrar a seqüência de Q 's e Δ 's $(Q_1, \Delta_1, Q_2, \Omega, Q_3, \Delta_3, Q_4)$ que deve ser modificada (a seqüência mais à esquerda na fig. 4.1). Aqui fazemos uso da notação $P(Q_1, \Delta_1, Q_2 | Q_2, \Omega, Q_3)$ para especificar a probabilidade condicional de se encontrar a conexão (Q_1, Δ_1, Q_2) dada que a conexão ao lado é (Q_2, Ω, Q_3) . O primeiro e segundo termo da terceira linha representam a inserção e dizimação das conexões $(Q_1, \tilde{\Delta}_1, \tilde{Q})$ e (Q_1, Δ_1, Q_2) , respectivamente. Analogamente para as conexões $(\tilde{Q}, \tilde{\Delta}_3, Q_4)$ e (Q_2, Δ_3, Q_4) na última linha. As somatórias e integrais em $Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, \Delta_1$ e Δ_3 representam a soma sobre todas as possibilidades de dizimação quando se encontra $\Delta_2 = \Omega$. Entretanto, o termo $(1 - \delta_{Q_2+Q_3,N})$ na primeira linha exclui a possibilidade de que a dizimação ocorra em segunda ordem de teoria de perturbação. Finalmente, as quantidades renormalizadas $\tilde{\Delta}_1, \tilde{\Delta}_3$ e \tilde{Q} são dadas de acordo com as eqs. (4.10) (4.11), (4.7) e (4.12).

Analogamente, o funcional R_2 é dado por

$$\begin{aligned}
R_2 = & d\Omega \sum_{Q_2, Q_3} P(Q_2, \Omega, Q_3) \delta_{Q_2+Q_3,N} \sum_{Q_1, Q_4} \int d\Delta_1 \int d\Delta_3 \\
& P(Q_1, \Delta_1, Q_2 | Q_2, \Omega, Q_3) P(Q_3, \Delta_3, Q_4 | Q_1, \Delta_1, Q_2, \Omega, Q_3) \\
& \times \left[-\delta(\Delta - \Delta_1) \delta_{Q_E, Q_1} \delta_{Q_D, Q_2} - \delta(\Delta - \Delta_3) \delta_{Q_E, Q_3} \delta_{Q_D, Q_4} \right. \\
& \left. + \delta(\Delta - \tilde{\Delta}) \delta_{Q_E, Q_1} \delta_{Q_D, Q_4} \right], \tag{4.17}
\end{aligned}$$

onde o termo da última linha se refere a inserção da conexão $(Q_1, \tilde{\Delta}, Q_4)$ no sistema, onde $\tilde{\Delta}$ é dado pelas eqs. (4.13) e (4.7).

Como o leitor deve perceber, a equação de fluxo (4.14) não é facilmente resolvida devido à possibilidade de correlações entre os "gaps" de excitação Δ 's e as RI's dos spins, Q_D e Q_E , que compartilham a constante de acoplamento correspondente. Porém, uma solução pode ser obtida se considerarmos que tais correlações vão a zero no limite $\Omega \rightarrow 0$. Imagine uma cadeia AF de spins SU(3) muito pouco desordenada, de tal maneira que todos os "gaps" de excitação estejam distribuídos em torno de Δ_0 e muito próximos a este. Considere ainda que todas as RI's são as fundamentais, ou seja, $Q_i = 1, \forall i$. Nos primeiros estágios do GR, teremos somente dizimações em primeira ordem de teoria de perturbação. Dessa forma, rapidamente a população de RI's antifundamentais cresce, e após todos os "gaps" em torno de Δ_0 terem sido renormalizados, a cadeia deve ser populada por RI's fundamentais e antifundamentais. Entretanto, duas RI's fundamentais não devem ser vizinhas, porque isso constituiria uma conexão original cujo "gap" de excitação está perto

de Δ_0 . Os "gaps" de excitação compartilhados por RI's diferentes, são aproximadamente 3/4 dos originais, e os "gaps" de excitação compartilhado por duas RI's iguais (no caso duas RI's antifundamentais) são aproximadamente 1/4 dos originais. Voltando a iterar os procedimentos de dizimação, teremos que somente dizimações de segunda ordem em teoria de perturbação ocorrerão. Após estas, *restarão somente RI's antifundamentais na cadeia*. Todavia, devido aos processos em segunda ordem de teoria de perturbação, a dispersão da distribuição renormalizada dos "gaps" de excitação é maior que a da original. A seguir, teremos uma nova inversão da população de RI's na cadeia e assim sucessivamente. Porém, em cada inversão, as constantes de acoplamentos são dizimadas em segunda ordem de teoria de perturbação. Nesses processos, a largura da distribuição é enormemente aumentada e sendo assim, haverá uma escala de energia em que as distribuições dos "gaps" de excitação compartilhados por RI's iguais e diferentes estarão entrelaçadas. Abaixo desta, a seqüência de dizimações que ocorreram nos primeiros estágios do GR não mais serão obedecidas e haverá dizimações entre RI's iguais ou não sem nenhum privilégio. Logo, concluímos que próximo do ponto fixo, não deve haver correlações entre os Δ 's e Q 's. E sendo assim, podemos reescrever P como

$$P(Q_E, \Delta, Q_D) d\Delta = P_Q(Q_E, Q_D) P_\Delta(\Delta) d\Delta, \quad (4.18)$$

onde $P_\Delta(\Delta) d\Delta \equiv P_\Delta(\Delta; \Omega) d\Delta$ é a probabilidade de se encontrar um "gap" de excitação entre Δ e $\Delta + d\Delta$ na escala de energia Ω , e $P_Q(Q_E, Q_D)$ é a probabilidade de encontrar dois spins consecutivos cujas RI's são Q_E e Q_D , respectivamente.³

Esta conclusão aparentemente simples nos permite chegar a uma importante conclusão sobre a população das RI's na cadeia de ponto fixo. Uma vez que a RI gerada é *sempre diferente das originais* (ver eq. (4.12)), a cadeia de ponto fixo deve então ser *igualmente* populada por todas as $N - 1$ possíveis RI's totalmente anti-simétricas, ou seja,

$$P_Q^*(Q_E, Q_D) = P_Q(Q_E) P_Q(Q_D) = \left(\frac{1}{N-1} \right)^2, \quad (4.19)$$

independente de Q . Dessa maneira pode-se reinterpretar o procedimento de renormalização perto do ponto fixo da seguinte maneira. (i) Encontre o maior "gap" de excitação na cadeia; (ii) Em seguida, com probabilidade $p = 1/(N-1)$, dizime os spins correspondentes em

³Nossas simulações numéricas mostram que essas correlações vão a zero exponencialmente em função da escala de energia Ω . Isto é reflexo da eficiência das dizimações em segunda ordem de teoria de perturbação em aumentar a desordem do sistema e em abaixar a escala de energia.

segunda ordem de teoria de perturbação, e com probabilidade $q = 1 - p$, dizime-os em primeira ordem de teoria de perturbação. Esta nova interpretação é facilmente obtida a partir da equação de fluxo (4.14), onde usando os resultados das eqs. (4.18) e (4.19), encontramos que

$$\begin{aligned} \text{Norm} &= 1 - (2p + q) P_{\Delta}(\Omega) d\Delta, \\ R_1 &= qd\Omega P_{\Delta}(\Omega) \int d\Delta_1 \int d\Delta_3 P_{\Delta}(\Delta_1) P_{\Delta}(\Delta_3) \\ &\quad \times \left[\delta(\Delta - \tilde{\Delta}_1) + \delta(\Delta - \tilde{\Delta}_3) - \delta(\Delta - \Delta_1) - \delta(\Delta - \Delta_3) \right], \\ R_2 &= pd\Omega P_{\Delta}(\Omega) \int d\Delta_1 \int d\Delta_3 P_{\Delta}(\Delta_1) P_{\Delta}(\Delta_3) \\ &\quad \times \left[\delta(\Delta - \tilde{\Delta}) - \delta(\Delta - \Delta_1) - \delta(\Delta - \Delta_3) \right]. \end{aligned}$$

Note que $p = 1/(N-1)$ é a probabilidade de se encontrar duas RI's consecutivas, Q_2 e Q_3 por exemplo, tal que $Q_2 + Q_3 = N$, ou seja, p é a probabilidade de ocorrência de uma dizimação em segunda ordem de teoria de perturbação.

Agora os funcionais R_1 e R_2 parecem bem mais amistosos. Entretanto, ainda devemos fazer mais uma aproximação para resolver analiticamente a equação de fluxo. Supondo que a distribuição de ponto fixo seja bem larga, os fatores numéricos nas equações de renormalização (4.10), (4.11) e (4.13) e na equação do "gap" de excitação (4.7) não desempenham nenhum papel importante. Portanto, perto do ponto fixo,

- Consideraremos que o "gap" de excitação entre dois spins é igual ao acoplamento entre os mesmos e independente de suas RI's. Ou seja,

$$\Delta_i = J_i.$$

- Desprezaremos os fatores numéricos das renormalizações escritas nas eqs. (4.10), (4.11) e (4.13), ou seja, $\tilde{J}_1 = J_1$, $\tilde{J}_3 = J_3$, $\tilde{J} = J_1 J_3 / J_2$.

E mais uma vez simplificamos a equação de fluxo, onde

$$\begin{aligned} \text{Norm} &= 1 - (2p + q) P_J(\Omega) d\Delta, \\ R_1 &= 0, \\ R_2 &= pd\Omega P_J(\Omega) \int dJ_1 \int dJ_3 P_J(J_1) P_J(J_3) \\ &\quad \times \left[\delta\left(\Delta - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right) - \delta(J - J_1) - \delta(J - J_3) \right]. \end{aligned}$$

Uma vez assumidas essas aproximações e negligenciando os termos de $\mathcal{O}(d\Omega^2)$ a equação de fluxo de $P_J(J)$ (eq. (4.14)) torna-se

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial\Omega} P_J &= qP_J(\Omega)P_J(J) \\ &\quad + pP_J(\Omega) \int dJ_1 dJ_3 P_J(J_1) P_J(J_3) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right), \end{aligned} \quad (4.20)$$

cuja única solução estável é (ver apêndice D),

$$P_J^*(J; \Omega) = \frac{\alpha}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\alpha} \theta(\Omega - J), \quad \text{com } \alpha = \frac{N-1}{\ln(\Omega_0/\Omega)}. \quad (4.21)$$

Note que a distribuição de ponto fixo (4.21), como no caso $SU(2)$ (ver eq. (2.5)), é de desordem infinita, ou seja,

$$\lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{\sqrt{\text{Var } J}}{\langle J \rangle} = \lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\alpha(\alpha+2)}} \rightarrow \lim_{\Omega \rightarrow 0} \sqrt{\frac{\ln(\Omega_0/\Omega)}{2(N-1)}} \rightarrow \infty. \quad (4.22)$$

Dessa maneira a probabilidade de encontrar um acoplamento entre $C\Omega$ e Ω com $0 < C < 1$ é igual à $1 - C^\alpha \approx -\alpha \ln C$, para α pequeno. Este resultado implica que o tratamento perturbativo utilizado em cada dizimação se torna cada vez melhor no limite de baixas energias, ou seja, perto do ponto fixo, a probabilidade de ocorrência de uma dizimação ruim vai a zero. Em analogia com as cadeias de spins $SU(2)$ [Fisher 1992, Fisher 1994], isto sugere fortemente que, uma vez que possamos passar pelo regime em que a distribuição não é larga, os resultados aqui apresentados são assintoticamente exatos. O sistema se encontra numa fase de singleto aleatório generalizada, onde spins que podem estar arbitrariamente afastados se aglomeram em estados de singleto como ilustra a fig. 4.2.

Este resultado nos permite concluir que o sistema, independentemente de sua desordem



Figura 4.2: Representação pictórica do estado fundamental da fase de singlete aleatório generalizada. Os spins conectados estão acoplados em um estado de singlete.

inicial, flui para um *ponto fixo universal de desordem infinita*. Como veremos na seção 4.5, isso implica que muitas das propriedades dessa fase de singletos aleatórios generalizada também é universal.

4.5 A fase dos singletos aleatórios generalizada

Nesta seção, calculamos as propriedades físicas de baixa energia de uma cadeia de spins $SU(N)$ AF desordenada que se encontra na fase dos singletos aleatórios governada pelo ponto fixo dado pela eq. (4.21).

4.5.1 Propriedades termodinâmicas

Como é usual para o cálculo de propriedades de baixa temperatura utilizando este método, consideramos que os spins dizimados em escalas de energia muito maiores que a temperatura T estão congelados em estados de singlete e não contribuem para as propriedades termodinâmicas. Já quanto aos spins não dizimados até a escala de energia $\Omega = T$, consideramos que estes estão muito fracamente acoplados, e portanto, livres. Estas aproximações são as mesmas utilizadas anteriormente quando do cálculo das propriedades de baixa energia da cadeia de Heisenberg AF de spins-1/2 (ver seção 2.1).

A susceptibilidade magnética é dada pela soma das contribuições de Curie de cada aglomerado spin ativo na cadeia (ver apêndice E), ou seja, $\chi \sim n_{\Omega=T} T^{-1}$, onde n_{Ω} é a fração de aglomerados de spins na escala de energia Ω . Esta fração pode ser calculada pela seguinte equação de taxa,

$$\frac{d}{d\Omega} n_{\Omega} = (2p + q) P_J(\Omega; \Omega) n_{\Omega},$$

onde, quando $\Omega \rightarrow \Omega - d\Omega$, um (dois) grau (graus) de liberdade de spins é (são) retirados do sistema quando da ocorrência de um processo de dizimação em primeira (segunda) ordem

de teoria de perturbação. Como $p + q = 1$, então

$$\frac{d}{d\Omega} n_{\Omega} = (p + 1)P_J(\Omega; \Omega)n_{\Omega} = (p + 1)P_J^*(\Omega; \Omega)n_{\Omega} = \frac{\alpha(p + 1)}{\Omega}n_{\Omega},$$

portanto,

$$n_{\Omega} \sim \left[\ln \left(\frac{\Omega_0}{\Omega} \right) \right]^{-1/\psi}, \quad (4.23)$$

onde $\psi = p/(p + 1) = 1/N$. Note que esta é a generalização da eq. (2.6).

Uma vez de posse da fração de aglomerados de spins ativos, a susceptibilidade magnética é facilmente calculada,

$$\chi \sim \frac{1}{T} n_T \sim \frac{1}{T(-\ln T)^{1/\psi}}. \quad (4.24)$$

Outra importante propriedade que pode ser calculada diretamente da fração de aglomerados de spins ativos é a relação entre escalas de comprimento e energia. Relacionando a escala de comprimento L com a distância média entre os aglomerados de spins, então $L \sim n_{\Omega}^{-1}$. Dessa maneira, encontramos que

$$\Omega \sim \exp \{ -L^{\psi} \}, \quad (4.25)$$

que consiste em um escalonamento dinâmico ativado com expoente de tunelamento $\psi = 1/N$. Note que tal escalonamento dinâmico é diferente do usual em sistemas quânticos onde as escalas de energia e comprimento se relacionam por leis de potências, $\Omega \sim L^{-z}$, onde z é dito expoente dinâmico. A eq. (4.25) pode ser medida experimentalmente por espalhamento inelástico de nêutrons. A diferença de momento linear do nêutron espalhado está associado ao inverso de L , e a energia perdida a Ω .

Considere agora a entropia por unidade de comprimento,

$$\sigma(T) = \frac{1}{L_0} \ln(\Upsilon(T)),$$

onde L_0 é o número original de spins, e $\Upsilon(T)$ é o número de estados acessíveis na escala de energia $\Omega = T$. Nesta aproximação, o número de estados acessíveis é dado pela degenerescência dos aglomerados de spins não dizimados,

$$\Upsilon(\Omega) = \prod_{Q=1}^{N-1} \mathcal{D}_Q^{\mathcal{N}_Q},$$

onde $\mathcal{D}_Q = \binom{N}{Q}$ é a dimensão de uma RI cuja tabela de Young tem Q caixas empilhadas verticalmente, e \mathcal{N}_Q é o número de spins cuja RI tem dimensão \mathcal{D}_Q . Na distribuição de ponto fixo, sabemos que os spins são distribuídos de tal maneira que $\mathcal{N}_Q = \mathcal{N}/(N-1)$, $\forall Q$, onde \mathcal{N} é o número total de spins ativos. Então,

$$\Upsilon(\Omega) = \left[\prod_{Q=1}^{N-1} \mathcal{D}_Q \right]^{\frac{\mathcal{N}}{N-1}} = [g(N)]^{\mathcal{N}},$$

onde, $g(N)$ só depende da simetria do grupo envolvida.

Logo,

$$\sigma \sim \frac{\mathcal{N}(\Omega)}{L_0} \ln g(N) = n_{\Omega=T} \ln g(N) \sim n_T \sim (-\ln T)^{-1/\psi}, \quad (4.26)$$

Uma vez calculada a dependência da entropia com a temperatura, podemos calcular o calor específico,

$$c(T) = T \frac{d}{dT} \sigma(T) \sim (-\ln T)^{-\frac{\psi+1}{\psi}}. \quad (4.27)$$

4.5.2 Funções de correlação

Devemos agora calcular as funções de correlação típica

$$C_{tip}(|i-j|) \equiv \exp \left\{ \overline{\langle \ln |C_{ij}| \rangle} \right\},$$

e média

$$C(|i-j|) \equiv \overline{\langle C_{ij} \rangle},$$

onde $C_{ij} = \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, e $\overline{\langle \dots \rangle}$ denota a média sobre a desordem e sobre o *ensemble*.

Para calcular C_{tip} , considere o problema de 3 spins S_1 , S_2 e S_3 dado pelo hamiltoniano

$$H = JS_1 \cdot S_2 + \Omega S_2 \cdot S_3, \quad (4.28)$$

e esquematizado na fig. 4.3.

Na próxima dizimação, os spins S_2 e S_3 serão dizimados e desenvolverão correlações da ordem da unidade, ou seja, estarão fortemente correlacionados. Se a dizimação for em segunda ordem de teoria de perturbação, esse par de spins ficará congelado em um singlete e o spin S_1 ficará fracamente correlacionado com eles, caso contrário, todos os 3 spins desenvolverão fortes correlações.

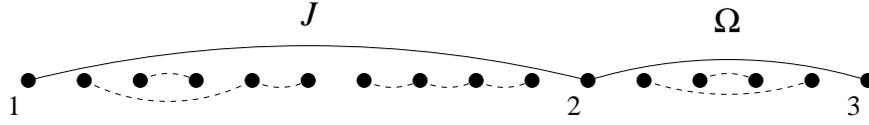


Figura 4.3: 3 spins acoplados conforme o hamiltoniano (4.28). Os spins conectados por acoplamentos pontilhados já foram dizimados e estão “congelados” em estados de singleto.

Para exemplificar a afirmação acima, considere o grupo $SU(2)$, onde os spins S_i são spins-1/2 usuais. O hamiltoniano (4.28) pode ser diagonalizado exatamente, e no limite $\Omega \gg J$, encontramos que $C_{23} = -3/4 + \mathcal{O}(J/\Omega)^2$ e $C_{12} = -J/\Omega + \mathcal{O}(J/\Omega)^2$. (Neste caso, a dizimação só pode ser dada em segunda ordem de teoria de perturbação.) Considere agora o caso $SU(3)$ onde $Q_1 = Q_2 = Q_3$ (ou seja, a dizimação se dará em primeira ordem de teoria de perturbação). Desse modo, encontramos que $C_{12} = C_{23} = C_{13} = -2/3$, i. e., os spins se congelam num singleto e desenvolvem fortes correlações. Por outro lado, se $Q_2 \neq Q_3$, então $C_{23} = -4/3 + \mathcal{O}(J/\Omega)^2$ and $C_{12} = -8J/(27\Omega) + \mathcal{O}(J/\Omega)^2$. Este resultado é análogo ao caso $SU(2)$, os spins S_2 e S_3 fortemente se correlacionam em um estado de singleto enquanto o spin S_1 fracamente se correlaciona com o par. Conjecturamos que este resultado permanece válido para qualquer grupo $SU(N)$: Se um par de spins pertence ao mesmo aglomerado, estes estão fortemente correlacionados, caso contrário, desenvolvem fracas correlações da ordem de J/Ω .

Tipicamente, um par de spins extremamente separados entre si não pertencem ao mesmo aglomerado, dessa maneira, o valor típico da distribuição da função correlação será dado pelo valor típico de J/Ω . Como a distribuição de ponto fixo (4.21) é extremamente larga, o valor típico é aproximadamente dado pela média geométrica. Sendo assim,

$$-\ln C_{tip} \approx \left\langle \ln \frac{\Omega}{J} \right\rangle = \frac{1}{\alpha}.$$

A distância correspondente a essa intensidade é obtida através da relação entre energia e comprimento, eq. (4.23), implicando que

$$C_{tip}(|i-j|) \sim \exp\{-|i-j|^\psi\}, \quad (4.29)$$

que é de curto alcance. Esta é a generalização para o caso $SU(N)$ da função correlação típica eq. (2.10).

O cálculo da função correlação média é um pouco mais complicado. No caso $SU(2)$,

Fisher supôs que a média da função correlação é dominada pelos raros pares de spins que se acoplam em singletos, e que a quantidade desses separados por uma distância $|i - j|$ é proporcional a probabilidade de que os spins S_i e S_j se acoplem. Essa probabilidade é dada pela chance desses dois não terem sido dizimados até a escala de comprimento $|i - j|$ e portanto $C \sim n_\Omega^{-2}$. Para o caso $SU(N)$, com $N > 2$, os aglomerados de spins não são mais os operadores de spins originais, e a probabilidade de que dois spins se tornem fortemente correlacionados não será mais proporcional a n_Ω^2 . Entretanto, a função correlação média deve ser proporcional a m_Ω^2 , onde m_Ω é a densidade de spins originais não retirados do sistema até a escala de energia Ω . Note que $m_\Omega \geq n_\Omega$, uma vez que em um único aglomerado de spin ativo pode haver vários spins originais dizimados em primeira ordem de teoria de perturbação. Em média, após a total dizimação de uma cadeia, os aglomerados de spins possuem N spins originais (ver apêndice F.1), ou seja, o estado fundamental esquematizado na fig. 4.2 é formado por uma coleção de aglomerados de N spins em média acoplados em um estado de singlete. No apêndice F.2, nós calculamos a probabilidade m_Ω de encontrar um spin original na escala de comprimento correspondente, e dessa maneira,

$$C(|i - j|) \sim m_\Omega^2 \sim \frac{1}{|i - j|^\eta}, \text{ com } \eta = \frac{4}{N}, \quad (4.30)$$

ou seja, apesar do regime ser extremamente desordenado, a função correlação média cai como uma lei de potência com a distância, e conforme N aumenta, maior são as correlações. Isto é um reflexo das dizimações em primeira ordem de teoria de perturbação que aumentam o número de spins correlacionados em um único aglomerado. Note também que as funções de correlação média e típica tem comportamento bastante distintos e isto é uma assinatura de fases totalmente dominadas pela desordem.

Podemos ainda estimar a função correlação média térmica, $\overline{C}_{ij}(T)$, relacionando a temperatura com a escala de energia correspondente Ω . Os aglomerados de spins não dizimados são essencialmente livres, e portanto não contribuem para a correlação média. Dessa maneira,

$$\overline{C}_{ij}(T) \sim \exp\{-|i - j|/\xi_T\}, \quad (4.31)$$

onde ξ_T é o comprimento de correlação térmico característico dado pelo acoplamento *entre os spins originais* que se formou até a escala de energia $\Omega = T$, que em média é igual a $m_\Omega^{-1} = n_\Omega^{-2/N}$, ou seja,

$$\xi_T \sim m_{\Omega=T}^{-1} \sim n_T^{-2/N} \sim \ln\left(\frac{\Omega_0}{T}\right)^2, \quad (4.32)$$

que, surpreendentemente, não depende do grupo de simetria.

Para finalizar essa seção, queremos colocar a relação entre as escalas de energia e comprimento de uma maneira mais formal. Para isso, devemos calcular diretamente a distribuição do tamanho das conexões da cadeia na escala de energia Ω . Primeiramente devemos escrever a relação de recorrência da variável l (tamanho da conexão) assim que os procedimentos do GR são iterados. Suponha que a conexão “2” é aquela a ser dizimada. No caso de uma dizimação em primeira ordem de teoria de perturbação, extraem-se as variáveis de comprimento l_1 , l_2 e l_3 da distribuição original e adicionam-se duas novas iguais a $\tilde{l}_1 = l_1 + l_2/2$ e $\tilde{l}_3 = l_3 + l_2/2$. No caso de uma dizimação em segunda ordem de teoria de perturbação l_1 , l_2 e l_3 são substituídas por uma única variável de comprimento $\tilde{l} = l_1 + l_2 + l_3$. Tratando l como um variável contínua, a equação de fluxo para a distribuição de acoplamentos e comprimento $P(J, l; \Omega)$ é dada por

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \Omega} P &= -qP(J, l)P(\Omega, l) + 2q \int dl_1 dl_2 P(J, l_1)P(\Omega, l_2) \delta\left(l - l_1 - \frac{l_2}{2}\right) \\ &+ p \int dl_1 dl_2 dl_3 dJ_1 dJ_3 P(\Omega, l_2)P(J_1, l_1)P(J_3, l_3) \times \\ &\times \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right) \delta(l - l_1 - l_2 - l_3). \end{aligned} \quad (4.33)$$

No apêndice D.3, esboçamos a solução de ponto fixo da eq. (4.33) e encontramos que a distribuição de comprimentos deve ser igual a

$$Pr(l; \Omega) \equiv \int dJ P(J, l; \Omega) \sim e^{yl/\Gamma^\kappa}, \quad (4.34)$$

com y sendo uma constante real negativa, $\Gamma = \ln(\Omega_0/\Omega)$, e $\kappa = N$. Deste resultado, recuperamos a eq. (4.25) quando relacionamos a escala de comprimento, L , com a média do comprimento das conexões $\bar{l} = \int l Pr(l; \Omega) dl$.

4.6 Características topológicas

Esta seção tem dois objetivos: (i) apontar algumas características topológicas das cadeias de spins $SU(N)$ ligadas ao fato de que um singleto de spins pode ser composto por mais de 2 spins e (ii) discutir os resultados aqui apresentados no limite $N \rightarrow \infty$.

4.6.1 Outras distribuições de ponto fixo

Chamamos atenção agora para outras distribuições de ponto fixo diferentes daquelas encontradas na sub-seção 4.4.2, onde todas as RI's são equiprováveis e a distribuição de ponto fixo dos acoplamentos é dada pela eq. (4.21). A principal característica que esses outros pontos fixos compartilham é que todos são fortemente dependentes da distribuição inicial das RI's dos spins.

Considere, por exemplo, a cadeia de spin $SU(4)$ AF desordenada onde todos os spins pertencem à RI auto-conjugada, i. e., $Q_i = 2, \forall i$. Neste caso, somente dizimações de segunda ordem deverão ocorrer, e sendo assim, o fluxo de renormalização será o mesmo que o da cadeia de spins-1/2. Portanto, o expoente de tunelamento deve ser igual a 1/2, e a função de correlação média deve cair como uma lei de potência com expoente igual a $\eta = 2$ (ver eq. (4.30)). O mesmo raciocínio se aplica a todas as cadeias $SU(2k)$, com $k > 1$ e inteiro, e todos os spins pertencentes à RI totalmente anti-simétrica e auto-conjugada ($Q_i = k, \forall i$). Note que, apesar desses sistemas apresentarem um "gap" em seus espectros [Affleck 1991], a natureza do fluxo do GR aqui apresentada fortemente sugere que estes são *instáveis* contra a introdução de desordem. Como a escada de spins-1/2 do tipo zig-zag AF desordenada [Yang 1996], tais sistemas são espontaneamente dimerizados. Há dois estados fundamentais degenerados, $|R\rangle$ e $|L\rangle$, que representam a dimerização sobre os acoplamentos pares e ímpares, respectivamente. Se uma pequena quantidade de desordem é introduzida, será energeticamente favorável que o estado fundamental seja formado por regiões alternadas onde a dimerização se dá ora sobre os acoplamentos pares, ora sobre os ímpares [Yang 1996]. Dessa maneira, a física de baixas energias deve ser dominada pelos spins desemparelhados nas paredes de domínio (sólitons). Tais spins devem estar muito fracamente acoplados, e esperamos que o espectro da dinâmica deles não apresente um "gap".

Existem outros pontos fixos além desses discutidos acima. Considere uma cadeia de spins $SU(6)$ onde $Q_i = 2, \forall i$. Da relação de recorrência (4.12), concluímos que somente RI's com $\tilde{Q} = 2$ ou 4 devem surgir. Dessa maneira, a competição entre dizimações de primeira e segunda ordem será a mesma que a da cadeia $SU(3)$, o que implica em $\psi = 1/3$ e $\eta = 4/3$. Deixamos para o leitor a generalização desse raciocínio para as cadeias de simetria superior, $SU(2k)$. Finalmente, para terminar de listar essas outras distribuições de ponto fixo, ainda há alguns outros para as cadeias $SU(N)$, com N ímpar, que apresentam os mesmos expoentes característicos da cadeia $SU(2)$. Tais cadeias tem a propriedade de que $Q_i + Q_{i+1} = N, \forall i$. Esta condição assegura que somente dizimações em segunda ordem

de teoria de perturbação ocorrerão.

A mais importante característica que todos esses pontos fixos compartilham, além da intrigante característica topológica, é a de serem *instáveis* contra a introdução de “impurezas”. Neste caso, nos referimos à impureza um spin que pertence a uma outra RI além daquelas necessárias para assegurar que nem todas as RI's totalmente anti-simétricas apareçam. Por exemplo, considere a cadeia de spin $SU(4)$ auto-conjugada com uma pequena concentração, n_i , de spins espúrios. Neste caso, o estágio inicial do fluxo do GR será então controlado pelo PFDI com $\psi = 1/2$ até que a escala de energia $\Omega \sim \exp\{-n_i^{-1/2}\}$ (ver eq. (4.23)) seja alcançada. Abaixo dela, o fluxo de renormalização muda em direção ao PFDI característico da cadeia $SU(4)$ com $\psi = 1/4$ e $\eta = 1$.

4.6.2 Robustez contra dimerização

É bem conhecido que o ponto fixo de desordem infinita da fase dos singletos aleatórios da cadeia de spins-1/2 AF desordenada (cadeia $SU(2)$) é instável contra a introdução de dimerização (ver seção 2.2 e ref. [Hyman 1996]). Entretanto, é interessante notar que os outros PFDI referentes às cadeias cujo grupo de simetria $SU(N)$ é maior ($N > 2$) são robustos contra a introdução de dimerização.

Nas cadeias de spins $SU(2)$, mesmo no limite de fraca dimerização, a fase dos singletos aleatórios é desestabilizada. Suponha que as constantes de acoplamento pares são, em média, um pouco maiores que as ímpares. Neste caso, o estágio inicial de fluxo de renormalização será governado pelo PFDI característico do grupo $SU(2)$. Ambas as distribuições de constantes de acoplamento pares e ímpares serão renormalizadas, porém a de acoplamentos ímpares será um pouco mais que a de acoplamentos pares. Isso porque a dizimação de um acoplamento par (ímpar) renormaliza um acoplamento ímpar (par). E sendo que a distribuição de constantes de acoplamento ímpares é um pouco mais renormalizada que a de acoplamentos pares, a primeira se tornará singular um pouco mais rapidamente que a segunda, e isso acentuará a diferença entre elas aumentando assim a dimerização do sistema. Conseqüentemente o sistema fluirá para longe do PFDI em direção a um ponto fixo de desordem finita não universal. [Hyman 1996, Fisher 1992]

Considere agora uma cadeia de spins $SU(N)$, com $N > 2$ e $Q_i = 1, \forall i$, no limite fortemente dimerizado. Considere também que as constantes de acoplamentos pares são as mais fortes. De acordo com as regras de dizimação, devemos primeiramente dizimar as constantes de acoplamentos pares em primeira ordem de teoria de perturbação. Após esse estágio inicial, a cadeia será inteiramente populada por spins cujas RI's são tais que os \tilde{Q} 's =

2. Além disso, eles estão acoplados pelas constantes de acoplamentos ímpares originais divididas por um fator numérico de 2 ou 4. Dessa maneira, o fluxo de renormalização que se segue dirige o sistema para o PFDI correspondente. (Note que se N é par, o expoente de tunelamento será igual a $\psi = 2/N$.) Analogamente, o raciocínio pode ser aplicado para o limite de dimerização fraca. Com isso, concluímos que o PFDI correspondentes ao grupo $SU(N)$ com $N > 2$ é robusto contra dimerização.

4.6.3 Limite $N \rightarrow \infty$

Mudemos a discussão para as características do sistema no limite de N grande.

Pela eq. (4.22), a desordem do sistema no limite $N \rightarrow \infty$ não diverge no limite $\Omega \rightarrow 0$. O limite descrito na referida equação não é bem definido porque depende da ordem em que se toma o limite. De qualquer maneira, a desordem de $P(J)$ diverge logicamente com $\Omega \rightarrow 0$, enquanto vai a zero mais rapidamente, com $N^{-1/2}$, no limite de $N \rightarrow \infty$. Isto sugere que a física do sistema, fortemente dependente da desordem, no limite de N grande deve ser diferente.

Na tentativa de estudar o limite de $N \rightarrow \infty$, devemos reescalar alguma variável do sistema. Esta naturalmente deve ser o número de caixas que compõem as RI. Então, naturalmente definimos

$$\Pi_i = \frac{Q_i}{N},$$

onde Π_i varia continuamente entre 0 e 1.

Próximo da distribuição de ponto fixo, as relações de recorrência (4.10), (4.11), (4.12) e (4.13) tornam-se,

$$\tilde{J}_1 = \begin{cases} \xi J_1, & \text{se } \Pi_2 + \Pi_3 < 1, \\ \bar{\xi} J_1, & \text{se } \Pi_2 + \Pi_3 > 1, \end{cases} \quad (4.35)$$

$$\tilde{J}_3 = \begin{cases} (1 - \xi) J_3, & \text{se } \Pi_2 + \Pi_3 < 1, \\ (1 - \bar{\xi}) J_3, & \text{se } \Pi_2 + \Pi_3 > 1, \end{cases} \quad (4.36)$$

com $\xi = \Pi_2 / (\Pi_2 + \Pi_3)$ e $\bar{\xi} = \bar{\Pi}_2 / (\bar{\Pi}_2 + \bar{\Pi}_3)$,

$$\tilde{\Pi} = \begin{cases} \Pi_2 + \Pi_3, & \text{se } \Pi_2 + \Pi_3 < 1, \\ \Pi_2 + \Pi_3 - 1, & \text{se } \Pi_2 + \Pi_3 > 1, \end{cases} \quad (4.37)$$

$$\tilde{J} = 2 \frac{\Pi_2 \Pi_3}{(N-1)} \frac{J_1 J_3}{J_2} \rightarrow 0, \quad (4.38)$$

respectivamente. A eq. (4.38) se torna indesejável porque diz que a correção em segunda ordem de teoria de perturbação para o acoplamento efetivo é nula. Na verdade, esta é nula somente no limite $N \rightarrow \infty$, mas como a probabilidade de ocorrência de uma dizimação em segunda ordem de teoria de perturbação vai a $1/(N-1) \rightarrow 0$, não há a necessidade de obter a correção na energia em terceira ordem. Em suma, as dizimações no sistema são dadas essencialmente em primeira ordem de teoria de perturbação.

Impor que $p = 1 - q = 0$ na equação de fluxo (4.20) nos retira da bacia de atração do ponto fixo de desordem infinita eq. (4.21), ou seja, o sistema não é mais governado por um ponto fixo de desordem infinita. O leitor pode protestar no sentido de que a eq. (4.20) é uma aproximação da verdadeira equação de fluxo onde desprezamos os fatores numéricos de renormalização agora descritos nas eqs. (4.35) e (4.36). Recuperando esses fatores, recuperamos aproximadamente o fluxo de renormalização das cadeias de spins-1/2 com acoplamentos FM's e AF's. Como a distribuição de ponto fixo dessas cadeias possui desordem *finita*, esperamos que a desordem das cadeias de spins $SU(N)$ permaneça finita no limite em questão. Analisando a equação de fluxo (D.7), nota-se que é essencialmente o termo de convolução (proporcional à probabilidade de ocorrência de uma dizimação em segunda ordem de teoria de perturbação) que permite que a solução (D.8) seja universal. Impondo que $p = 1 - q = 0$, encontra-se que $R = R_0/(1 + \eta)^{1+R_0}$, que é dependente da desordem inicial. Concluimos dessa forma que, são as dizimação de segunda ordem que levam o sistema para o ponto fixo universal de desordem infinita.

Está bem evidente agora que as regras de aglomeração se spin da cadeias de spins com acoplamentos FM's e AF's e a da cadeia de spins $SU(N)$ AF são as mesmas no limite $N \rightarrow \infty$. Perto do ponto fixo, os spins se tornarão fortemente correlacionados em enormes aglomerados. Dessa maneira, podemos esperar que a correlação média (ver eq. (4.30)) descreva a correlação média das cadeias de spins $SU(2)$ com acoplamentos FM's e AF's. Fazendo uma expansão em $1/N$, encontramos que

$$C(|i-j|) \sim \frac{1}{\ln|i-j|}, \text{ no limite de } N \rightarrow \infty,$$

que é o comportamento encontrado numericamente para essas cadeias [Hikihara 1999]. Devemos ainda salientar o fato de que nas cadeias de spins $SU(2)$ AF's e FM's a função de correlação típica é muito próxima da função de correlação média. Entretanto, uma expansão em $1/N$ da função de correlação típica (4.29) não deve fornecer um resultado confiável porque o seu cálculo está diretamente vinculado à hipótese de que a

distribuição de constantes de acoplamentos no ponto fixo (4.21) é extremamente larga. Já a função correlação média está vinculada à regra de aglomeração, e portanto esperamos que o seu resultado permaneça válido. Concluimos portanto que, apesar da física do sistema, no limite $N \rightarrow \infty$, não ser capturada pelos resultados aqui propostos, o progressivo aumento de N nos permite um cálculo analítico para a função de correlação spin-spin média e típica da cadeia de spins SU(2) com acoplamentos FM's e AF's.

4.7 Conclusões

Generalizamos, neste capítulo, o método do GRDF para as cadeias de spins SU(N) AF's desordenadas cujas RI's são totalmente anti-simétricas.

O ingrediente adicional que difere o fluxo de renormalização das cadeias SU(N) com $N > 2$ do fluxo de renormalização da cadeia SU(2) é a inserção de dizimações em primeira ordem de teoria de perturbação. Por outro lado, esses procedimentos de dizimação estão presentes nas cadeias de spins SU(2) com acoplamentos AF's e FM's (ver seção 2.3). Entretanto, a probabilidade de ocorrência de uma dizimação em segunda ordem de teoria de perturbação vai a zero perto do ponto fixo destas últimas, enquanto tal probabilidade permanece finita perto do ponto fixo das cadeias SU(N). Somente no limite $N \rightarrow \infty$ encontramos alguma semelhança entre os dois sistemas, o que nos permitiu calcular analiticamente a função de correlação destes.

A equação de fluxo foi resolvida analiticamente e encontramos que a introdução de qualquer quantidade de desordem desestabiliza a fase pura levando o sistema para uma fase de singletos aleatórios governada por um ponto fixo *universal de desordem infinita*. Nesta fase, inúmeras quantidades são universais, ou seja, independentes da desordem inicial do sistema. A correlação spin-spin típica é de curto alcance em contraposição à correlação média que decai como lei de potência com expoente que depende somente do grupo de simetria dos spins. Esta última é dominada por raros pares de spins arbitrariamente afastados que desenvolvem fortes correlações entre si em um estado de singlete. As propriedades termodinâmicas também foram calculadas. Em particular, a susceptibilidade magnética apresenta um comportamento singular com a temperatura que é uma forte característica da fase de singletos aleatórios. A relação entre as escalas de energia e comprimento também é analiticamente obtida. Encontramos uma lei de escalonamento dinâmico ativado com expoente de tunelamento que depende somente da simetria do grupo envolvida. Este tipo de lei é também uma forte característica de fases infinitamente desordenadas e é diferente

do escalamento dinâmico usual em sistemas críticos quânticos.

No limite $N \rightarrow \infty$, entretanto, o esquema de renormalização aqui apresentado falha. A probabilidade de ocorrência de uma dizimação em segunda ordem de teoria de perturbação vai a zero e o sistema não mais renormaliza para um ponto fixo de desordem infinita (ver eq. (4.22)). Este fato nos leva à conclusão de que são as dizimações em segunda ordem de teoria de perturbação que levam o sistema para uma fase de desordem infinita. Ou seja, na sua ausência, o sistema renormalizado não é infinitamente desordenado e os resultados aqui apresentados não são mais válidos. Note que, *neste problema*, a física relacionada ao limite $N \rightarrow \infty$ não captura a física do limite N pequeno. Este é um exemplo em que a técnica de N infinito, muito usada na literatura na esperança de capturar a física de N pequeno[Sachdev 1999], falha.

Capítulo 5

A cadeia anisotrópica de spins SU(4)

Neste capítulo relatamos o nosso estudo sobre a cadeia de spins SU(4) antiferromagnética anisotrópica. Para tal, dividimos o capítulo da seguinte maneira. Na seção 5.1, nós damos a motivação do estudo e a dedução do hamiltoniano de interesse, na seção 5.2 nós generalizamos o grupo de renormalização para dizimar os spins SU(4) na presença de anisotropia, na seção 5.3 estudamos o fluxo de renormalização combinando técnicas analíticas e numéricas, e finalmente na seção 5.4 resumimos nossas conclusões.

5.1 O hamiltoniano

Considere o hamiltoniano de Hubbard unidimensional com dupla degenerescência orbital,

$$\begin{aligned} H_{\text{Hubb}} &= H_t + H_U, \\ &= -t \sum_{i,\alpha,\sigma} \left(c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i+1,\alpha,\sigma} + \text{h.c.} \right) \\ &\quad + U \sum_i \sum_{\alpha,\beta,\sigma,\tau} n_{i,\alpha,\sigma} n_{i,\beta,\tau} (1 - \delta_{\alpha,\beta} \delta_{\sigma,\tau}), \end{aligned} \quad (5.1)$$

onde $c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger$ ($c_{i,\alpha,\sigma}$) denota os operadores usuais de criação (aniquilação) de elétrons no sítio i e no orbital α ($= 1, 2$) com projeção de spin no eixo z igual a σ ($= \pm$). O operador $n_{i,\alpha,\sigma} = c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i,\alpha,\sigma}$ é o operador número usual e os hamiltonianos H_t e H_U denotam os termos usuais de “hopping” e de repulsão Coulombiana ($U > 0$). Note que estamos considerando processos de “hopping” que conservam tanto a projeção de spin quanto a ocupação orbital.

No limite fortemente correlacionado ($U \gg t$) e no preencimento $\langle n_{i,\alpha,\sigma} \rangle = 1/4$ (com

$\langle \dots \rangle$ denotando o valor esperado no estado fundamental),¹ os graus de liberdade de carga são suprimidos, ou seja, o sistema torna-se um isolante de Mott com um elétron em cada sítio. Neste caso, o hamiltoniano efetivo é obtido tratando H_t como uma perturbação de H_U . Em segunda ordem de teoria de perturbação (para maiores detalhes, ver apêndice G), obtemos que

$$H^{ef} = \frac{2t^2}{U} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1} + 4(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1}), \quad (5.2)$$

onde

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,a,b} c_{i,\alpha,a}^\dagger \vec{\sigma}_{a,b} c_{i,\alpha,b}, \quad \text{e} \quad \mathbf{T}_i = \frac{1}{2} \sum_{a,b,\beta} c_{i,a,\beta}^\dagger \vec{\sigma}_{a,b} c_{i,b,\beta}, \quad (5.3)$$

com $\vec{\sigma}$ sendo as matrizes de Pauli, e \mathbf{S}_i e \mathbf{T}_i são os operadores de spin e isospin que descrevem os graus de liberdade de spin e orbital, respectivamente. Como veremos no final desta seção, o hamiltoniano efetivo (5.2) possui simetria SU(4). Por ora, ele serve de motivação para estudarmos o hamiltoniano

$$H = \sum_i (a\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1} + b)(c\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + d), \quad (5.4)$$

$$= 4 \sum_i J^1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J^2 \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1} + 4K (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1}). \quad (5.5)$$

Note que este é o modelo antiferromagnético unidimensional mais simples que possui dupla degenerescência orbital e é invariante por rotações tanto no espaço de spin quanto no espaço orbital, ou seja, esse hamiltoniano possui simetria SU(2)(spin) \otimes SU(2)(isospin). Na forma (5.4), o hamiltoniano claramente descreve uma cadeia de spins-1/2 onde tanto a magnitude quanto o tipo de interação spin-spin depende da ocupação orbital. Na forma (5.5), dizemos que o hamiltoniano descreve duas cadeias de spins-1/2 AF's acopladas via um interação do tipo 4 corpos. Além disso, no ponto $J^1 = J^2 = K$, o hamiltoniano descreve o modelo de Hubbard de duas bandas no limite fortemente interagente e no preenchimento 1/4. Outra motivação para o estudo deste hamiltoniano é o seguinte. No ponto $K = 0$, o sistema é exatamente solúvel e possui dois modos bosônicos sem massa. Na linguagem de teoria de campos conforme, o sistema tem carga central $c = 2$. Já no ponto $J^1 = J^2 = K$, o sistema possui simetria SU(4) (como veremos mais adiante), é exatamente solúvel via “Ansatz” de Bethe [Sutherland 1975] e possui 3 modos bosônicos sem massa, ou seja, carga

¹Somando-se sobre os graus de liberdade orbital e de spin, o preenchimento é 1, ou seja, em média há 1 elétron por sítio.

central $c = 3$. Como foi apontado por Azaria *et al.* [Azaria 1999], do ponto de vista teórico essa situação é extremamente interessante porque, pelo teorema c de Zamolodchikov,² não podemos fluir do ponto de carga central $c = 2$ para o ponto de carga central maior $c = 3$. Ou seja, a física perto do ponto de simetria SU(4) não pode ser entendida em termos das cadeias de Heisenberg fracamente acopladas. Uma transição de fase deve ocorrer se sairmos do ponto $K = 0$ e continuamente o aumentamos até $K = J^1 = J^2$.

É nesse contexto que desejamos estudar o papel da desordem no hamiltoniano (5.5). Iremos considerar o caso AF em que $J^1 = J^2 = J$. Portanto, nosso ponto de partida é o hamiltoniano desordenado

$$H = 4 \sum_i J_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1}) + 4K_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) (\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1}), \quad (5.6)$$

onde J_i e K_i são variáveis aleatórias independentes e positivas. Uma escolha conveniente para representar as matrizes da representação fundamental do grupo SU(4) em termos dos operadores de spin-1/2 é $A^\gamma = 4s^\alpha t^\beta$, $2s^\alpha$, $2t^\alpha$, com $\alpha, \beta = x, y, z$ (ver apêndice H [Arovas 1995]). Dessa forma, reescrevemos o hamiltoniano (5.6) como

$$H = \sum_i \left\{ K_i \sum_{\gamma=1}^9 A_i^\gamma A_{i+1}^\gamma + J_i \sum_{\gamma=10}^{15} A_i^\gamma A_{i+1}^\gamma \right\}, \quad (5.7)$$

onde agora se torna evidente que o ponto $K_i = J_i$ é invariante por transformações do grupo SU(4).

Na próxima seção generalizaremos o grupo de renormalização para desordem forte para tratar o hamiltoniano (5.7).

5.2 O grupo de renormalização

Para tratar o hamiltoniano (5.7), aplicamos a técnica do grupo de renormalização para desordem forte introduzida no cap. 4. A idéia principal desse método é integrar graus de liberdade muito energéticos, que não devem ser importantes para a física de baixas energias, renormalizando os graus de liberdades restantes. Isto é feito da seguinte maneira: Escolhe-se o par de spins que possui a maior energia de excitação (onde definimos como energia de excitação a diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado

²O teorema de Zamolodchikov diz que não se pode fluir via transformações de grupo de renormalização de um ponto fixo de carga central c_1 para um outro de carga central $c_2 > c_1$ [Zamolodchikov 1987].

fundamental devido ao acoplamento local desses spins), em seguida "congela-se" o par no estado fundamental e trata-se perturbativamente o hamiltoniano que os acopla com o resto da cadeia. O objetivo desta seção é desenvolver os procedimentos de dizimação para o estudo do hamiltoniano (5.7). Mas antes de darmos início, faz-se necessário especificar com mais detalhes a notação aqui utilizada. Como será visto ao longo desta seção, após alguns procedimentos de dizimação, o hamiltoniano renormalizado terá spins que pertencem às três representações irredutíveis totalmente anti-simétricas do grupo SU(4), cujas matrizes geradoras denotaremos de A , B e C caso os spins pertençam às representações fundamental, auto-conjugada e antifundamental, respectivamente. Tais matrizes estão descritas no apêndice H.

Como é o procedimento usual desse grupo de renormalização, devemos considerar o par de spins que possui maior energia de excitação, "congelá-lo" no estado de mais baixa energia, e tratar o resto do hamiltoniano perturbativamente, ou seja, devemos tratar H_1 como uma perturbação de H_0 onde

$$H_0 = K_2 \sum_{\gamma=1}^9 D_2^\gamma D_3^\gamma + J_2 \sum_{\gamma=10}^{15} D_2^\gamma D_3^\gamma, \quad (5.8)$$

$$H_1 = K_1 \sum_{\gamma=1}^9 D_1^\gamma D_2^\gamma + J_1 \sum_{\gamma=10}^{15} D_1^\gamma D_2^\gamma + K_3 \sum_{\gamma=1}^9 D_3^\gamma D_4^\gamma + J_3 \sum_{\gamma=10}^{15} D_3^\gamma D_4^\gamma, \quad (5.9)$$

supondo que o par de spins mais energeticamente acoplados são aqueles dos sítios 2 e 3, e D_i^γ denota as matrizes do i – ésimo spin que pode pertencer a qualquer uma das três RI's totalmente anti-simétricas.

Para tratar H_0 , devemos analisar caso a caso as mais diversas possíveis combinações das matrizes D_2 e D_3 . Há muitas peculiaridades em cada caso, entretanto, podemos resumir o resultado principal da seguinte maneira. Se o estado fundamental de H_0 possui degenerescência 4 ou 6, então o hamiltoniano efetivo é dado por

$$H^{ef} = \tilde{K}_1 \sum_{\gamma=1}^9 D_1^\gamma \tilde{D}^\gamma + \tilde{J}_1 \sum_{\gamma=10}^{15} D_1^\gamma \tilde{D}^\gamma + \tilde{K}_3 \sum_{\gamma=1}^9 \tilde{D}^\gamma D_4^\gamma + \tilde{J}_3 \sum_{\gamma=10}^{15} \tilde{D}^\gamma D_4^\gamma, \quad (5.10)$$

obtido quando tratamos H_1 em primeira ordem de teoria de perturbação. Neste caso, o resultado líquido é a dizimação de um grau de liberdade de spin. As constantes de acoplamentos renormalizadas \tilde{K}_i e \tilde{J}_i , $i = 1$ e 3 , dependem do caso em questão e serão dadas mais tarde. O operador de spin efetivo \tilde{D} se refere à RI fundamental ou antifundamental

no caso do estado fundamental ter degenerescência 4, caso contrário, se refere à RI auto-conjugada. Por outro lado, se o estado fundamental é não degenerado (estado de singleto), o tratamento em segunda ordem de teoria de perturbação nos leva a uma total dizimação do par de spins. Encontramos também que surge uma nova interação entre os spins vizinhos a esse par dada por

$$H^{ef} = \tilde{K} \sum_{\gamma=1}^9 D_1^\gamma D_4^\gamma + \tilde{J} \sum_{\gamma=10}^{15} D_1^\gamma D_4^\gamma + c, \quad (5.11)$$

onde as constantes de acoplamento renormalizadas \tilde{K} e \tilde{J} serão dadas no momento oportuno, e c é uma constante que para os nossos propósitos será negligenciada. Isto resume brevemente o resultado principal dessa seção. A similiaridade com os processos de dizimação no caso isotrópico (ver cap. 4) é evidente.

Vamos agora nos concentrar nos possíveis casos de dizimação.

5.2.1 Primeiro caso

Nesta sub-seção, analisamos o caso em que os spins 2 e 3 pertencem à RI fundamental.

Diagonalizando H_0 (ver eq. (5.8)) com $\mathbf{D}_2 = \mathbf{A}_2$ e $\mathbf{D}_3 = \mathbf{A}_3$ encontramos os seguintes níveis de energia:

- $E_1 = -3K_2 - 2J_2$, com degenerescência $g_1 = 6$,
- $E_2 = 9K_2 - 6J_2$, com degenerescência $g_2 = 1$,
- $E_3 = K_2 + 2J_2$, com degenerescência $g_3 = 9$.

Como $K_2, J_2 > 0$, temos duas possibilidades para o estado fundamental. Se $J_2 > 3K_2$, o estado fundamental é não degenerado e com auto-estado igual a (negligenciando o fator numérico de normalização)

$$\begin{aligned} |0\rangle_{nd} &= |1, 4\rangle_f + |4, 1\rangle_f - |2, 3\rangle_f - |3, 2\rangle_f, \\ &= |s_2, s_3\rangle_s \otimes |t_2, t_3\rangle_s, \end{aligned}$$

onde $|\alpha_2, \alpha_3\rangle_s = |+, -\rangle - |-, +\rangle$, $\alpha = s, t$ denota o estado singleto formado entre os spins ou isospins α_2 e α_3 .³ Se $J_2 < 3K_2$ (que é o caso de maior interesse se estamos interessados em pequenas anisotropias perto do ponto com simetria SU(4)), o estado

³A notação dos auto-estados de spins SU(4) está dada no apêndice H.

fundamental tem degenerescência $g = 6$ e os auto-estados são os vetores correspondentes à representação auto-conjugada $\{|j\rangle_{ac}\}$, $j = 1, \dots, 6$ (ver apêndice H).

No caso em que $J_2 < 3K_2$, tratando o hamiltoniano H_1 (ver eq. (5.9)) em primeira ordem de teoria de perturbação, achamos que o hamiltoniano efetivo é aquele dado pela eq. (5.10), onde

$$\tilde{K}_{1,3} = \frac{1}{2}K_{1,3}, \text{ e } \tilde{J}_{1,3} = \frac{1}{2}J_{1,3}, \quad (5.12)$$

e $\tilde{D}^\gamma = B^\gamma$ são as matrizes da representação auto-conjugada (ver apêndice H). A interpretação desse resultado é substituir o par de spins 2 e 3 por um novo spin cuja RI é a auto-conjugada. Na notação de tabelas de Young, o procedimento pode ser entendido como retirar da cadeia o par de spins 2 e 3, representados por uma única caixa cada um, e substituir por um novo spin com duas caixas empilhadas verticalmente como ilustrado na fig. 5.1.

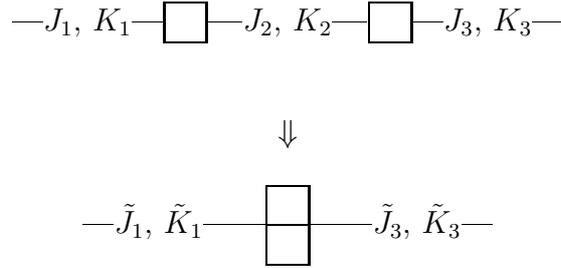


Figura 5.1: Dizimação de um par de spins pertencentes à representação fundamental no caso $J_2 < 3K_2$.

No caso em que $J_2 > 3K_2$, os spins \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 (do hamiltoniano original, ver eq. (5.6)) estão congelados em um singlete (tal como os isospins \mathbf{T}_2 e \mathbf{T}_3), e em segunda ordem de teoria de perturbação, encontramos que o hamiltoniano efetivo é aquele dado pela eq. (5.11), onde

$$\tilde{J} = \frac{J_1 J_3}{2(J_2 - 3K_2)}, \quad \tilde{K} = -\frac{K_1 K_3}{4(J_2 - K_2)}. \quad (5.13)$$

e $c = c_1$, com

$$c_1 = - \sum_{i=1,4} \left\{ \frac{K_i^2}{8(J_2 - K_2)} \sum_{\gamma=1}^9 (D_i^\gamma)^2 + \frac{J_i^2}{4(J_2 - 3K_2)} \sum_{\gamma=10}^{15} (D_i^\gamma)^2 \right\}.$$

Note que no ponto $K = 0$, recupera-se o resultado esperado (ver eq. (2.3)), uma vez que as duas cadeias de spin estão desacopladas.

É interessante notar que, apesar de se tratar de um caso anisotrópico, os termos proporcionais ao quadrado de D_1^γ e D_4^γ são constantes. Esta afirmação é evidente no caso em que D^γ são as matrizes das RI's fundamentais ou anti-fundamentais, porque $(A^\gamma)^2 = (C^\gamma)^2 = 1$, $\forall \gamma$, mas isso não é verdade para as matrizes da RI auto-conjugada. Porém, *surpreendentemente*, as seguintes somas $\sum_{\gamma=1}^9 (B_i^\gamma)^2 = 12$ e $\sum_{\gamma=10}^{15} (B_i^\gamma)^2 = 8$ são, e portanto, os termos quadráticos são meramente constantes, e sendo assim, podem ser negligenciados. Note que o mesmo acontece para o modelo de spin-1/2 anisotrópico tratado por Fisher (ver ref. [Fisher 1994]): os termos quadráticos são constantes porque $(S^{x,y,z})^2 = 1/4$, embora isso só seja verdade no caso em que $S = 1/2$. Para os casos em que $S > 1/2$, este esquema de dizimação falha. Por isso não há uma generalização trivial do método de Westerberg *et al.* (ver seção 2.3) para as cadeias de spins superiores anisotrópicas.

Para concluir essa seção, sabemos dizimar o par em questão caso E_1 ou E_2 sejam a energia do estado fundamental. Somente para o caso em que $J_2, K_2 < 0$, não estamos munidos de um procedimento de renormalização.

5.2.2 Segundo caso

Analisamos agora o caso em que os spins 2 e 3 pertencem às RI's fundamental e auto-conjugada, respectivamente.

Diagonalizando H_0 (ver eq. (5.8)) com $\mathbf{D}_2 = \mathbf{A}_2$ e $\mathbf{D}_3 = \mathbf{B}_3$ encontramos os seguintes níveis energéticos:

- $E_1 = -6K_2 - 4J_2$, com degenerescência $g_1 = 4$,
- $E_2 = 6K_2 - 4J_2$, com degenerescência $g_2 = 4$,
- $E_3 = 2J_2$, com degenerescência $g_3 = 16$.

Para os casos de interesse, $J_2, K_2 > 0$, E_1 é a energia do estado fundamental cujos auto-vetores são aqueles correspondentes à representação antifundamental $\{|j\rangle_{af}\}$, $j = 1, \dots, 4$ (ver apêndice H). Tratando H_1 em primeira ordem de teoria de perturbação, encontramos que o hamiltoniano efetivo é aquele dado pela eq. (5.10), onde

$$\tilde{L}_1 = \frac{1}{3}L_1, \text{ e } \tilde{L}_3 = \frac{2}{3}L_3, \quad (5.14)$$

com $L = J, K$, e $\tilde{D}^\gamma = C^\gamma$ são as matrizes da representação antifundamental. Na notação de tabelas de Young, substitui-se o par de spins 2 e 3, representados por uma e duas

caixas, respectivamente, por um spin representado por 3 caixas empilhadas verticalmente (ver fig. 5.2).

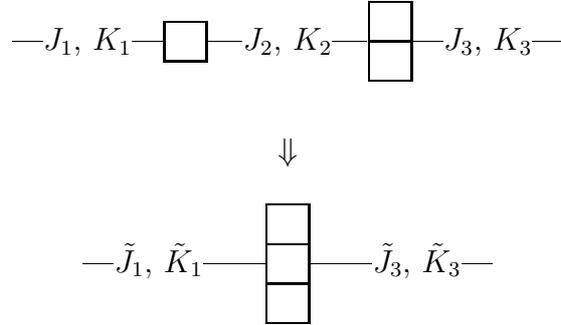


Figura 5.2: Dizimação de um par de spins pertencentes às representações fundamental e auto-conjugada no caso $E_1 < E_2$.

Estudar o caso em que o segundo multipletto é o fundamental também é de interesse (caso $K_2 < 0$ e $J_2 \gg -K_2$, como veremos na seção 5.3). Supreendentemente, ao projetarmos H_1 neste sub-espço encontramos que o hamiltoniano efetivo é aquele descrito na eq. (5.10), onde $\tilde{D}^\gamma = A^\gamma$ são as matrizes da representação fundamental (ver esquema representativo fig. 5.3), e

$$\tilde{K}_1 = -\frac{1}{3}K_1, \quad \tilde{J}_1 = \frac{1}{3}J_1, \quad (5.15)$$

$$\tilde{K}_3 = \frac{2}{3}K_3, \quad \tilde{J}_3 = \frac{2}{3}J_3. \quad (5.16)$$

Note que os novos acoplamentos $\tilde{J}_{1,3}$ e $\tilde{K}_{1,3}$ são renormalizados da mesma forma que no caso em que $K_2 > 0$, com apenas a diferença do sinal na renormalização de \tilde{K}_1 .

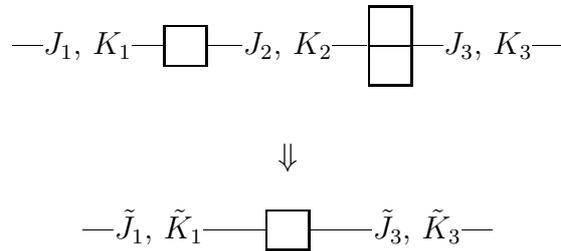


Figura 5.3: Dizimação de um par de spins pertencentes às representações fundamental e auto-conjugada no caso $E_1 > E_2$.

Concluimos então que, não sabemos dizimar tal par de spins somente no caso em que

E_3 é a energia do estado fundamental. Como veremos mais adiante, isso não será um problema no caso AF aqui em estudo.

5.2.3 Terceiro caso

Analisamos aqui o caso em que os spins 2 e 3 pertencem às RI's fundamental e antifundamental, respectivamente.

Diagonalizando H_0 (ver eq. (5.8)) com $\mathbf{D}_2 = \mathbf{A}_2$ e $\mathbf{D}_3 = \mathbf{C}_3$ encontramos os seguintes níveis:

- $E_1 = -9K_2 - 6J_2$, com degenerescência $g_1 = 1$,
- $E_2 = -K_2 + 2J_2$, com degenerescência $g_2 = 9$,
- $E_3 = 3K_2 - 2J_2$, com degenerescência $g_3 = 6$.

Para os casos de interesse, $J_2, K_2 > 0$, o estado fundamental é sempre não degenerado com auto-vetor correspondente à completa anti-simetrização dos 4 possíveis números quânticos da RI fundamental, ou seja, além do fator de normalização, o estado fundamental é

$$|0\rangle = \mathcal{A}_{1,2,3,4} |1\rangle_f \otimes |2\rangle_f \otimes |3\rangle_f \otimes |4\rangle_f,$$

onde $\mathcal{A}_{1,2,3,4}$ é o operador anti-simetrizador dos índices 1, 2, 3 e 4. Tratando H_1 em segunda ordem de teoria de perturbação, encontramos que o hamiltoniano efetivo é aquele descrito pela eq. (5.11), onde

$$\tilde{J} = \frac{J_1 J_3}{2J_2 + 6K_2}, \quad \tilde{K} = \frac{K_1 K_3}{4(J_2 + K_2)}, \quad (5.17)$$

e $c = c_2$, sendo

$$c_2 = - \sum_{i=1,4} \left\{ \frac{K_i^2}{8(J_2 + K_2)} \sum_{\gamma=1}^9 (D_i^\gamma)^2 + \frac{J_i^2}{4(J_2 + 3K_2)} \sum_{\gamma=10}^{15} (D_i^\gamma)^2 \right\}.$$

A fig. 5.4 ilustra pictoricamente o procedimento em questão. Retira-se o par de spins 2 e 3 (representados por 1 e 3 caixas, respectivamente) e surge uma nova interação entre o par de spins vizinhos.

Note que o multipletto 3 possui degenerescência $g_3 = 6$. Isso sugere que este é equivalente a um spin pertencente à RI auto-conjugada. Realmente essa hipótese é confirmada

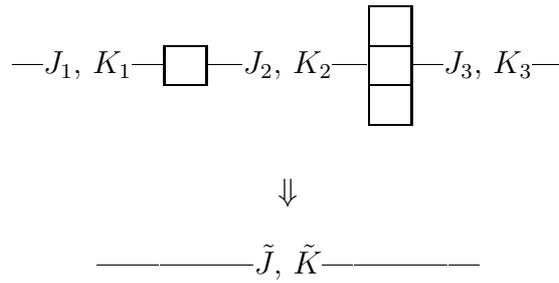


Figura 5.4: Dizimação de um par de spins pertencentes às representações fundamental e antifundamental quando $E_1 < E_3$.

projetando H_1 neste sub-espço. Encontramos que o hamiltoniano efetivo é aquele dado pela eq. (5.10), com

$$\tilde{K}_1 = \frac{1}{2}K_1, \quad \tilde{K}_3 = -\frac{1}{2}K_3, \quad (5.18)$$

$$\tilde{J}_1 = \frac{1}{2}J_1, \quad \tilde{J}_3 = \frac{1}{2}J_3. \quad (5.19)$$

Logo, se o multiplete 3 for o fundamental, o procedimento diz que se deve substituir o par de spins 2 e 3 por um spin auto-conjugado, como ilustrado na fig. 5.5.

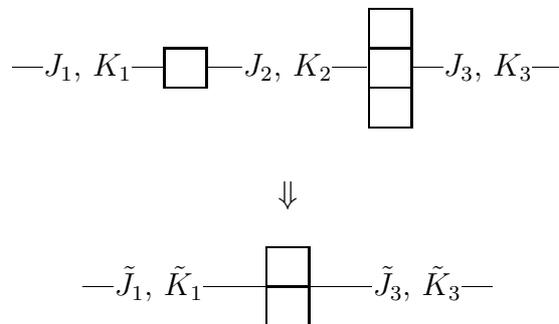


Figura 5.5: Dizimação de um par de spins pertencentes às representações fundamental e antifundamental quando $E_3 < E_1$.

Por ora, concluímos que sabemos dizimar tal par de spins, caso E_1 ou E_3 sejam a energia do estado fundamental.

5.2.4 Quarto caso

Considere agora o caso em que os spins 2 e 3 pertencem à RI auto-conjugada.

Diagonalizando H_0 (ver eq. (5.8)) com $\mathbf{D}_2 = \mathbf{B}_2$ e $\mathbf{D}_3 = \mathbf{B}_3$ encontramos os seguintes níveis de energia:

- $E_1 = -12K_2 - 8J_2$, com degenerescência $g_1 = 1$,
- $E_2 = -4J_2$, com degenerescência $g_2 = 6$,
- $E_3 = -4K_2$, com degenerescência $g_3 = 9$,
- $E_4 = 12K_2 - 8J_2$, com degenerescência $g_4 = 1$,
- $E_5 = 4J_2$, com degenerescência $g_5 = 10$,
- $E_6 = 4K_2$, com degenerescência $g_6 = 9$,

Para os casos de interesse, $J_2, K_2 > 0$, o estado fundamental é sempre não degenerado (correspondente ao nível 1) com auto-vetor correspondente à completa anti-simetrização dos 4 possíveis números quânticos da representação fundamental, ou seja, além do fator de normalização, o estado fundamental é

$$|0\rangle = \mathcal{A}_{1,2,3,4} |1\rangle_f \otimes |2\rangle_f \otimes |3\rangle_f \otimes |4\rangle_f.$$

Tratando H_1 em segunda ordem de teoria de perturbação, encontramos que o hamiltoniano efetivo é dado pela eq. (5.11), onde

$$\tilde{J} = \frac{2J_1J_3}{3J_2 + 9K_2}, \quad \tilde{K} = \frac{K_1K_3}{3(J_2 + K_2)}, \quad (5.20)$$

e $c = c_3$, sendo

$$c_3 = - \sum_{i=1,4} \left\{ \frac{K_i^2}{6(J_2 + K_2)} \sum_{\gamma=1}^9 (D_i^\gamma)^2 + \frac{J_i^2}{3J_2 + 9K_2} \sum_{\gamma=10}^{15} (D_i^\gamma)^2 \right\}.$$

A fig. 5.6 ilustra pictoricamente o procedimento em questão. Retira-se o par de spins 2 e 3 (ambos representados por 2 caixas) e surge uma nova interação entre o par de spins vizinhos.

Um outro aspecto interessante aparece no caso em que E_4 é a energia do estado fundamental. Isto ocorre quando $K_2 < 0$ e $J_2 \gg |K_2|$. Esta região se torna de interesse quando estamos analisando o limite de acoplamento fraco entre as duas cadeias de spins, que será

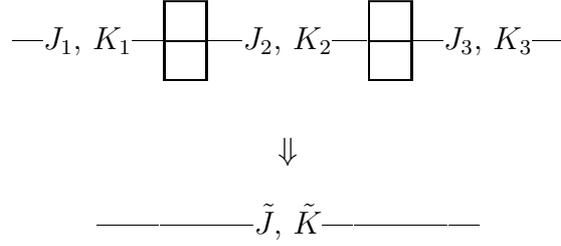


Figura 5.6: Dizimação de um par de spins pertencentes à representação auto-conjugada quando E_1 ou E_4 é a energia do estado fundamental.

discutido posteriormente. O estado fundamental é não degenerado e o procedimento de renormalização se dá em segunda ordem de teoria de perturbação como ilustrado na fig. 5.6, mas com os seguintes acoplamentos renormalizados,

$$\tilde{J} = \frac{2J_1J_3}{3J_2 - 9K_2}, \quad \tilde{K} = -\frac{K_1K_3}{3(J_2 - K_2)}, \quad (5.21)$$

e $c = c_4$, sendo

$$c_4 = - \sum_{i=1,4} \left\{ \frac{K_i^2}{6(J_2 - K_2)} \sum_{\gamma=1}^9 (D_i^\gamma)^2 + \frac{J_i^2}{3J_2 - 9K_2} \sum_{\gamma=10}^{15} (D_i^\gamma)^2 \right\}.$$

Note que o valor absoluto das constantes de acoplamento renormalizadas (ver eq. (5.21)) não varia em relação ao caso em que E_1 é a energia do estado fundamental (uma vez que K_2 é negativo, compare com a eq. (5.20)). A única diferença se dá no sinal de \tilde{K} e, como veremos adiante (seção 5.3), isso é irrelevante no limite em que $J \gg |K|$.

Note que o estado 2 possui degenerescência 6. Isso sugere que, caso este seja o estado fundamental, em primeira ordem de teoria de perturbação teríamos um multipletto fundamental representado por um spin auto-conjugado. Isso, no entanto, *não é verdade*, e portanto concluímos que temos um procedimento de dizimação somente para os casos em que ou estado 1 ou o estado 4 são o fundamental.

5.2.5 Demais casos

As duas dizimações restantes, dizimação de um par de spins pertencentes à RI antifundamental e a dizimação de dois spins pertencentes às RI's auto-conjugada e antifundamental, são análogas às dizimações descritas nas sub-seções 5.2.1 e 5.2.2, respectivamente. Isso é

reflexo do fato de que o sistema apresenta simetria “partícula-buraco”.⁴ No primeiro caso (ver esquema ilustrativo descrito na fig. 5.7), substitui-se o par de spins a ser dizimado por um único spin pertencente à RI auto-conjugada, e as constantes de acoplamento são renormalizadas da mesma forma como descrita da seção 5.2.1 (ver eq. (5.12)). Lembre-se ainda que há a possibilidade do procedimento de dizimação ocorrer em segunda ordem de teoria de perturbação caso $J_2 > 3K_2$.

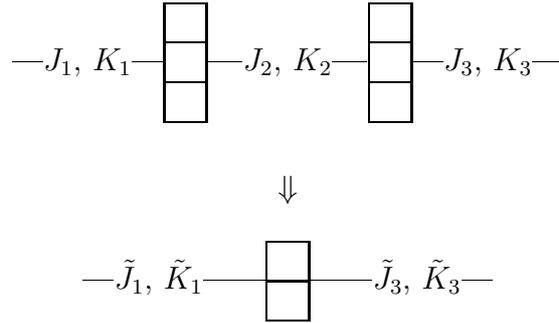


Figura 5.7: Dizimação de um par de spins pertencentes à representação antifundamental no caso em que $J_2 < 3K_2$.

No segundo caso, se $K_2 > 0$, o par de spins a ser dizimado é substituído por um único spin pertencente à RI fundamental (ver fig. 5.8) e as constantes de acoplamento são renormalizadas conforme a eq. (5.14), caso contrário ($K_2 < 0$), o par de spins dizimado deve ser substituído por um spin da RI antifundamental, e as constantes de acoplamento devem ser renormalizadas de acordo com a eq. (5.15) e (5.16).

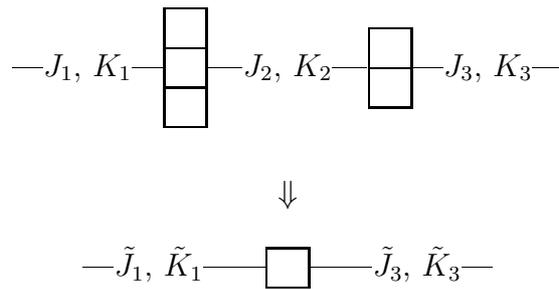


Figura 5.8: Dizimação de um par de spins pertencentes às representações antifundamental e auto-conjugada no caso em que $K_2 > 0$.

⁴Referimo-nos à simetria “partícula-buraco” que vem do fato de que o espectro de qualquer hamiltoniano de spin apresentado aqui neste trabalho é invariante se trocamos os spins pelos spins conjugados correspondentes, como mencionamos na seção 4.2.

5.2.6 Resumo dos procedimentos de dizimação

Nesta seção, resumimos os procedimentos de renormalização que ditam as relações de recorrência que formam as transformações do grupo de renormalização.

Primeiramente, procuramos o par de spins que possui maior energia de excitação, i. e., o par de spins cuja diferença de energia entre o primeiro estado excitado e o estado fundamental é maior. Em seguida, dizimamos esse par conforme os casos tratados nas seções 5.2.1 a 5.2.5. Se o estado fundamental for degenerado, então a regra de dizimação é substituir o par de spins em questão (\mathbf{D}_i e \mathbf{D}_{i+1}) por um único spin com \tilde{Q} caixas, onde \tilde{Q} depende do caso em questão. Em todos esses, o novo spin efetivo se acopla com os spins \mathbf{D}_{i-1} e \mathbf{D}_{i+2} através das constantes de acoplamento \tilde{L}_{i-1} e \tilde{L}_{i+1} , respectivamente, sendo

$$\tilde{L}_{i-1} = \xi_L L_{i-1}, \text{ e } \tilde{L}_{i+1} = \xi'_L L_{i+1}, \quad (5.22)$$

com $L = K, J$, e ξ_L e ξ'_L diferentes caso a caso (ver eqs. (5.12), (5.14), (5.15), (5.16), (5.18) e (5.19)).

Quando o estado fundamental é não degenerado, a regra de dizimação é retirar os spins \mathbf{D}_i e \mathbf{D}_{i+1} do sistema acoplando-se o par de spins vizinhos através das constantes \tilde{K} e \tilde{J} iguais a

$$\tilde{K} = \frac{K_{i-1}K_{i+1}}{aK_i + bJ_i}, \text{ e } \tilde{J} = \frac{J_{i-1}J_{i+1}}{cK_i + dJ_i}, \quad (5.23)$$

onde a, b, c e d dependem do caso em questão (ver eqs. (5.13), (5.17), (5.20) e (5.21)).

É importante notar que os acoplamentos renormalizados *nem sempre* são menores que os originais, e portanto os procedimentos de dizimação podem ser inconsistentes no sentido de nem sempre abaixar a escala de energia durante o fluxo de renormalização.

Uma vez determinada todas as regras de dizimação, devemos agora estudar o fluxo do GR. Esta tarefa é feita na seção a seguir.

5.3 O fluxo de renormalização

Nesta seção, estudamos o comportamento da anisotropia do sistema ao longo do fluxo de renormalização, bem como caracterizamos os pontos fixos encontrados.

Resumimos, inicialmente, o resultado obtido no capítulo anterior para a cadeia isotrópica. Em seguida, estudamos o hamiltoniano (5.7) nos limites de anisotropia adequados monitorando a média e a variância da mesma ao longo do fluxo de renormalização. Tal

estudo, cujos cálculos estão mostrados no apêndice D.4, se baseia na possibilidade de escrever um par de relações de recorrência que descrevem o procedimento de renormalização para a variável de energia Δ (que depende da magnitude das constantes de acoplamento), e outra para a variável de anisotropia (chamada de variável auxiliar no referido apêndice) que depende da razão entre as constantes de acoplamento. Entretanto, nem sempre conseguimos resolver as equações de fluxo analiticamente. Nesses casos, valemo-nos de simulações numéricas para obter a física do ponto fixo em questão.

5.3.1 Cadeia isotrópica

Resumimos, por completeza, muito brevemente nesta sub-seção o resultado obtido através do método em questão para a cadeia isotrópica (caso em que $J_i = K_i$) como mostrado no capítulo 4.

Se inicialmente a cadeia é populada somente por spins que pertencem à representação irredutível fundamental, logo nos primeiros estágios do método de renormalização spins de outras representações são gerados, e como na dizimação de um par de spins o novo spin efetivo gerado não é igual a nenhum dos spins originais, esperamos que, na vizinhança do ponto fixo, a probabilidade de achar um spin pertencente a uma dada RI seja independente da mesma, ou seja, esperamos que a cadeia seja igualmente populada por spins de qualquer representação, independentemente da magnitude da constante de acoplamento compartilhada por este. Essa expectativa é confirmada numericamente.

Como não há correlação entre a magnitude da constante de acoplamento e as RI's dos spins, e como todas as RI's são equiprováveis, podemos reescrever o fluxo de renormalização da seguinte maneira. Escolhemos o par de spins com maior energia de excitação. A probabilidade de que esse par forme um singlete no estado fundamental é igual a $p = (N - 1)^{-1} = 1/3$ e, portanto, com chance igual a $1/3$, dizimâmo-lo e “conectamos” os spins vizinhos através da constante de acoplamento $\tilde{J} = \beta J_{i-1} J_{i+1} / J_i$, onde β é uma constante entre 0 e 1 (ver eq. (4.13)). Com chance igual a $q = 1 - p = 2/3$, substituímos o par de spins por um novo spin que interage com os spins vizinhos através das constantes de acoplamento $\tilde{J}_{i-1} = \xi J_{i-1}$ e $\tilde{J}_{i+1} = (1 - \xi) J_{i+1}$, onde ξ é uma constante entre 0 e 1 (ver eqs. (4.10) e (4.11)).

Este procedimento nos permite escrever a seguinte equação de fluxo para a distribuição

de acoplamentos $P(J; \Omega)$,

$$-\frac{\partial}{\partial \Omega} P = qP(\Omega)P(J) + pP(\Omega) \int dJ_1 dJ_3 P(J_1)P(J_3) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right),$$

onde $\Omega = \max\{J_i\}$ é o “cut-off” da distribuição $P(J; \Omega)$ e negligenciamos os fatores numéricos ξ , $(1 - \xi)$ e β , o que é válido no limite de desordem forte (como discutimos no cap. 4). Para resolver a equação de fluxo acima, é conveniente reescrevê-la em função das variáveis logarítmicas $\Gamma = -\ln \Omega$, $\zeta = \ln(\Omega/J)$, para $\Omega_0 = 1$. Logo,

$$\frac{\partial}{\partial \Gamma} \rho(\zeta; \Gamma) = \frac{\partial}{\partial \zeta} \rho + q\rho(\zeta)\rho(0) + p\rho(0) \int d\zeta_1 d\zeta_3 \rho(\zeta_1)\rho(\zeta_3) \delta(\zeta - \zeta_1 - \zeta_3), \quad (5.24)$$

onde $\rho(\zeta; \Gamma) d\zeta = P(J; \Omega) dJ$.

Como mostrado no apêndice D, a equação de fluxo (5.24) possui um único ponto fixo universal e estável,

$$\begin{aligned} \rho^*(\zeta; \Gamma) &= \frac{\theta(\zeta)}{p\Gamma} \exp\{-\zeta/p\Gamma\}, \\ P^*(J; \Omega) &= \frac{\alpha}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\alpha} \theta(\Omega - J), \quad \alpha = -\frac{3}{\ln \Omega}. \end{aligned}$$

A relação entre as escalas de energia Γ , e de comprimento L_Γ , pode ser calculada através da relação entre a fração de aglomerados de spins ativos n_Γ , e Γ , dada pela equação de taxa $dn_\Gamma = (2p + q)\rho(0)n_\Gamma d\Gamma$,

$$L_\Gamma \sim n_\Gamma^{-1} \sim \Gamma^{1/\psi} = [\ln(1/\Omega)]^{1/\psi}, \quad (5.25)$$

com $\psi = 1/4$. A equação (5.25) é útil por nos permitir calcular quantidades físicas importantes como a entropia específica $\sigma \sim n_\Gamma \sim (-\ln T)^{1/\psi}$, o calor específico $c \sim (-\ln T)^{-(\psi+1)/\psi}$, e a susceptibilidade magnética $\chi \sim n_\Gamma/T \sim [T(-\ln T)^{1/\psi}]^{-1}$.⁵

Além disso, podemos calcular o valor típico e médio da função de correlação $C_{ij} = \langle \mathbf{A}_i \cdot \mathbf{A}_j \rangle$, onde $\langle \dots \rangle$ denota a média no quântica no estado fundamental. O valor médio de C_{ij} (estamos nos referindo à média na desordem) será dominado por raros singletos de spins formados a distâncias arbitrariamente longas que desenvolvem correlações da $\mathcal{O}(1)$. Sendo \mathcal{P}_{ij} a probabilidade de que os spins A_i e A_j se tornem extremamente correlacionados,

⁵Lembre-se que devemos usar a aproximação de que os aglomerados de spins ativos são essencialmente livres, uma vez que $P^*(J; \Omega = T)$ é extremamente singular e larga no limite de baixas temperaturas.

i. e., a probabilidade de serem dizimados em um mesmo aglomerado de spins, a correlação média se comportará como

$$\overline{C}_{ij} \sim \mathcal{P}_{ij} \sim \frac{1}{|i-j|^\eta}, \text{ com } \eta = \frac{4}{N} = 1, \quad (5.26)$$

com $\overline{\dots}$ denotando a média na desordem, como calculado explicitamente na seção 4.5. Entretanto, tipicamente dois spins muito separados não irão desenvolver fortes correlações. O comportamento de escala da correlação típica será dominado pelo fraco acoplamento \tilde{J} que surge entre o par, e portanto

$$\ln |C_{ij}|_{tip} \sim \overline{\ln \tilde{J}/\Omega} = -p\Gamma \sim -|i-j|^\psi. \quad (5.27)$$

Isto resume brevemente a física do ponto fixo isotrópico. A cadeia se encontra na fase de singleto aleatório universal onde qualquer quantidade de desordem é renormalizada universalmente para o infinito, desestabilizando a fase ordenada. Como veremos mais tarde, este ponto fixo é instável contra a introdução de anisotropia.

5.3.2 Acoplamento intra-cadeias $J = 0$

Nesta seção, estudamos o hamiltoniano (5.6) no caso em que o acoplamento $J_i = 0$, e $K_i > 0$, $\forall i$.

Neste caso, conforme visto na seção 5.2, a energia de excitação de um par de spins acoplados é sempre proporcional a K_i , portanto é natural definirmos as seguintes variáveis de energia $\zeta_i = \ln(\Omega/K_i)$ e $\Gamma = -\ln \Omega$, onde $\Omega = \max\{K_i\}$ e $\Omega_0 = 1$. Analisando os possíveis procedimentos de dizimação descritos na seção 5.2, concluímos que a distribuição de ζ renormaliza da mesma maneira como no caso isotrópico descrito na sub-seção anterior, desde que os fatores numéricos sejam desprezados. Portanto, a equação de renormalização desta distribuição é aquela dada pela eq. (5.24). Além disso, todas as quantidades físicas se comportam da mesma maneira que na cadeia isotrópica e a anisotropia permanece a mesma durante todo o fluxo de renormalização.

Dessa maneira, concluímos que no caso $J = 0$ o sistema, apesar de *não* ser invariante por rotações do grupo SU(4), flui para ponto fixo que possui as mesmas propriedades físicas da cadeia isotrópica de spins SU(4).

5.3.3 Acoplamento intra-cadeias J fraco

Estudamos aqui o hamiltoniano (5.6) no limite em que o valor absoluto do acoplamento J_i é muito menor que $K_i > 0, \forall i$. Analisando as regras de dizimação descritas na seção 5.2, concluí-se que os possíveis procedimentos de dizimação são os mesmos da cadeia SU(4) isotrópica.

Definindo

$$\Delta_i = \frac{J_i}{K_i},$$

como uma medida da anisotropia do sistema, esta quantidade se renormaliza da seguinte maneira ao longo do fluxo,

$$\tilde{\Delta}_i = \begin{cases} \Delta_i, & \text{se a dizimação é em 1ª ordem,} \\ 2\Delta_{i-1}\Delta_{i+1} \left(\frac{1+\Delta_i}{3+\Delta_i} \right), & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.28)$$

Note que a relação de recorrência é a mesma para os dois possíveis casos em que a dizimação se dá em segunda ordem de teoria de perturbação ($Q_i Q_{i+1} = 3$ ou 4), mesmo sendo as equações de dizimação para \tilde{J} e \tilde{K} diferentes em cada caso (ver eqs. (5.17) e (5.20)).

Como estamos interessados no caso em que $|\Delta_i| \ll 1, \forall i$, a equação de recorrência (5.28), para o caso de uma dizimação em segunda ordem, se torna uma simples relação aditiva em escala logarítmica,

$$\ln |\tilde{\Delta}_i| = \ln |\Delta_{i-1}| + \ln |\Delta_{i+1}|, \quad (5.29)$$

além de uma constante que pode ser negligenciada para as distribuições em questão onde $-\ln |\Delta| \gg 1$.

Definindo $\zeta = \ln(\Omega/K)$ e $\Gamma = -\ln \Omega$, onde $\Omega = \max\{K_i\}$ e $\Omega_0 = 1$, a relação de recorrência para ζ é aproximadamente igual à relação de recorrência para o caso isotrópico, o que nos permite aplicar os métodos descritos no apêndice D.4.

Se inicialmente a distribuição de Δ não é simétrica (por exemplo $J_i > 0, \forall i$), esperamos que o valor típico de $\tilde{\Delta}$ vá a zero com $\exp\{-\Gamma^{\gamma_{ass}}\}$ (ver apêndice D.4.1), com $\gamma_{ass} = (1 + \sqrt{13})/2$. O mesmo raciocínio vale se a distribuição inicial de Δ é simétrica. Como a relação de recorrência dos valores absolutos dos Δ 's obedece à equação (5.29), a dispersão de $\ln |\tilde{\Delta}|$ crescerá com $\Gamma^{\gamma_{ass}}$, implicando em valores típicos dos módulos dos $\tilde{\Delta}$'s indo a zero com $\exp\{-c\Gamma^{\gamma_{ass}}\}$ (com c da ordem de 1).

Então concluímos que acoplamento J fraco é irrelevante independentemente de seu

sinal, e o sistema flui para um ponto fixo com $J = 0$ descrito na sub-seção anterior que mimetiza a física do ponto fixo isotrópico descrito na sub-seção 5.3.1. Uma pergunta natural surge neste momento: até que valores negativos de J , este é irrelevante? A resposta é que para $-1 < \bar{\Delta} < 0$, o acoplamento J é irrelevante. Esta conclusão se baseia nos métodos utilizados na sub-seção 5.3.6, onde deve-se substituir $J \rightarrow -J$. Mas note que no ponto em que $-J_i = K_i$, diferentemente do ponto isotrópico, $J_i = K_i$, os procedimentos de renormalização não podem mais ser aplicados. Isto porque os multipletos 1 e 3 se degeneram no caso da dizimação de um par de spins pertencentes à RI fundamental (ver seção 5.2.1).

5.3.4 Acoplamento inter-cadeia $K = 0$

Considere o caso em que $K_i = 0, \forall i$.

Conforme as regras de dizimação descritas na seção 5.2, somente dizimações em segunda ordem devem ocorrer. Isto é reflexo do fato de que nesse ponto as cadeias estão desacopladas e o procedimento de renormalização é aquele originalmente descrito por Ma, Dasgupta e Hu (ver seção 2.1).

Concluimos portanto que, o sistema flui para o ponto fixo de desordem infinita característico do grupo SU(2). Como veremos a seguir, esse ponto fixo é robusto contra a introdução de pequeno acoplamento inter-cadeia.

5.3.5 Acoplamento inter-cadeia K fraco

Analisamos, nesta sub-seção, como a anisotropia é renormalizada perto do ponto fixo $K = 0$. Como no caso $K = 0$, os possíveis procedimentos de renormalização são aqueles da cadeia SU(2) isotrópica.

Definindo

$$\varphi_i = \frac{K_i}{J_i}, \quad (5.30)$$

como uma medida da anisotropia local, esta é renormalizada conforme

$$\tilde{\varphi}_i = -\varphi_{i-1}\varphi_{i+1} \frac{1 - 3\varphi_i}{2(1 - \varphi_i)} \approx -\frac{\varphi_{i-1}\varphi_{i+1}}{2}, \quad (5.31)$$

para φ pequeno. A eq. (5.31) é obtida a partir das relações de recorrência (5.13).

Como no caso de pequeno acoplamento intra-cadeia, o valor típico da distribuição do módulo de φ vai a zero como $\exp\{-\Gamma^{\lambda_{ass}}\}$, com $\lambda_{ass} = (1 + \sqrt{5})/2$ (neste caso, $p = 1$ e

$\Upsilon = 0$; ver apêndice D.4.1) independentemente da distribuição inicial. Concluimos então que o sistema flui para o ponto fixo de desordem infinita do grupo $SU(2)$.

Note, entretanto, que a relação de recorrência (5.13) deixa a possibilidade de uma constante de acoplamento renormalizada ser maior que as originais (que a partir de agora denominaremos de dizimações inconvenientes) e, portanto, o resultado de que pequena desordem é relevante deve ser re-examinado. Como no caso de cadeias de Heisenberg AF's desordenadas de spins- S $SU(2)$ com $S > 1/2$, os procedimentos do GR deixam a possibilidade de ocorrência de dizimações inconvenientes (ver eq. (2.19)) e, somente para desordem inicial suficientemente grande, o sistema flui para o ponto fixo de desordem infinita. Nestas cadeias, desordem fraca é irrelevante [Boechat 1996, Hyman 1997, Monthus 1997, Saguia 2002, Saguia 2003, Carlon 2004]. Conjecturamos, porém, que este *não* é o caso verificado aqui. Nossas simulações indicam que qualquer quantidade de desordem é suficiente para levar o sistema para o PFDI correspondente. É verdade que algumas dizimações inconvenientes ocorrem. Entretanto, a concentração dessas cai rapidamente e vai a zero perto do ponto fixo. O motivo para tal é de simples entendimento. Um acoplamento renormalizado tem a forma

$$\tilde{J} = f(\varphi_2) \frac{J_1 J_3}{J_2},$$

com

$$f(\varphi_i) = \left(\frac{2 - 2\varphi_i + 3\varphi_{i-1}\varphi_{i+1} - 9\varphi_{i-1}\varphi_i\varphi_{i+1}}{4(1 - 3\varphi_i)^2(1 - \varphi_i)} \right).$$

Como a magnitude dos φ 's rapidamente renormaliza para zero, a função $f(\varphi)$ rapidamente converge para $1/2$, e assim o sistema flui para o PFDI independentemente da desordem inicial. Somente nos estágios iniciais do fluxo de renormalização é que $f(\varphi)$ eventualmente pode assumir valores maiores que 1 e, se a desordem for inicialmente pequena, existe a chance de \tilde{J} ser maior que J_2 . Porém a probabilidade de ocorrência de tais eventos vai a zero rapidamente, diferentemente das cadeias de spins $SU(2)$ maiores que $1/2$. Nestas, o prefator numérico (aqui denotado por $f(\varphi)$) independe do fluxo de renormalização e é maior que 1. Por essa razão, se a desordem é inicialmente pequena, em todos os estágios do fluxo de renormalização haverá a ocorrência de dizimações inconvenientes e, por tal motivo, a desordem não cresce, comprometendo o método perturbativo de dizimação. Quando isso acontece, dizemos que as dizimações deixam de ser inconvenientes e passam a ser inconsistentes.

Por fim, se a anisotropia média inicial, φ_0 , for menor que $1/3$, o sistema flui para o PFDI característico do grupo $SU(2)$. Para $\varphi_0 \geq 1/3$, o procedimento de renormalização não mais

se dá em segunda ordem (ver sub-seção 5.2.1). Isso desestabiliza o fluxo de renormalização e o sistema se dirige para outro ponto fixo como veremos mais adiante.

5.3.6 Pequena anisotropia em torno do ponto $J = K$

Devemos analisar agora o caso de pequena anisotropia em torno do ponto isotrópico.

Definindo como medida da mesma

$$\delta_i = \frac{J_i - K_i}{K_i}, \quad (5.32)$$

obtém-se a seguinte relação de recorrência,

$$\tilde{\delta}_i = \begin{cases} \delta_i, & \text{se a dizimação é em 1ª ordem,} \\ 2 \frac{(1+\delta_{i-1})(1+\delta_{i+1})(2+\delta_i)}{4+\delta_i} - 1, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.33)$$

Esta é obtida a partir dos possíveis procedimentos de renormalização que são aqueles da cadeia SU(4) isotrópica. Como estamos interessados no caso em que $|\delta_i| \ll 1, \forall i$, a relação de recorrência quando de uma dizimação em segunda ordem é aproximadamente igual a

$$\tilde{\delta}_i \approx \delta_{i-1} + \delta_{i+1} + \frac{1}{4}\delta_i. \quad (5.34)$$

Definindo $\mathcal{J}_i = \sqrt{J_i K_i}$ como variável de energia, encontra-se a seguinte relação de recorrência,

$$\tilde{\mathcal{J}}_i \approx \begin{cases} \mathcal{J}_i, & \text{se a dizimação é em 1ª ordem,} \\ \frac{\mathcal{J}_{i-1}\mathcal{J}_{i+1}}{g\mathcal{J}_i}, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

com $g = 6$ ou 4 se $Q_i Q_{i+1} = 4$ ou 3 , respectivamente. Dessa forma, definindo $\zeta = \ln \Omega / \mathcal{J}$ e $\Gamma = -\ln \Omega$, onde $\Omega = \max \{\mathcal{J}_i\}$ e $\Omega_0 = 1$, podemos aplicar os métodos do apêndice D.4.

Se a anisotropia inicial é uniforme, i. e., todos ou a maioria dos δ 's sendo ou positivos ou negativos, então a média de δ cresce com

$$\bar{\delta} \sim \Gamma^{\gamma_u} \bar{\delta}_0, \quad \text{com } \gamma_u = \frac{5}{2},$$

e $\bar{\delta}_0$ sendo a média da distribuição inicial de anisotropia (ver apêndice D.4.1). Na escala $\Gamma_u \sim |\bar{\delta}_0|^{-1/\gamma_u}$, a anisotropia se torna da ordem de 1, e portanto o esquema de renormalização não é mais válido. Além dessa escala, a anisotropia pode ser positiva (onde tipicamente $J_i > K_i$) ou negativa (tipicamente $K_i > J_i$).

No caso em que a anisotropia é negativa, a relação de recorrência (5.28) se torna (5.29), uma vez que para $\Gamma \gg \Gamma_u$, Δ é pequeno. Então concluímos que toda a linha entre o ponto isotrópico ($J = K$) e o ponto de alta anisotropia negativa ($J = 0$) *flui para* este último na presença de desordem. Note que a mesma conclusão se aplica caso o sinal de J seja trocado. Portanto, toda a linha em que $-2 < \bar{\delta}_0 < 0$ se colapsa no ponto $J = 0$ na presença de desordem (como argumentado no final da sub-seção 5.3.3).

Por outro lado, para anisotropia positiva, J ganha força em relação a K e isto leva a uma mudança qualitativa nos processos de dizimação como será discutido a seguir.

Nos casos discutidos anteriormente, ou K era sempre maior que $|J|$ (ver sub-seções 5.3.2 e 5.3.3), ou J era sempre maior que $|K|$ com a cadeia populada somente por spins cuja RI é a fundamental (ver sub-seções 5.3.4 e 5.3.5). No primeiro caso por exemplo, a equiprobabilidade dos procedimentos de renormalização era mantida porque a energia de excitação devido ao acoplamento entre dois spins é sempre proporcional a K , independente das RI's dos mesmos (ver sub-seções 5.2.1 a 5.2.4) e, portanto, a probabilidade de ocorrência de uma dizimação em segunda ordem de teoria de perturbação continuava igual a $p = 1/3$. A diferença que se verifica no caso em que a maioria dos δ 's é maior que zero é que tais processos de dizimação não são mais equiprováveis. Denotando (Q_i, Q_{i+1}) o par de spins a serem dizimados, notamos que os processos envolvendo os pares (1,2), (2,1), (2,3), (3,2) e (2,2) (descritos nas sub-seções 5.2.2 e 5.2.4) são suprimidos porque a energia de excitação destes não é proporcional a J . Os procedimentos mais favorecidos são aqueles denotados por (1,1), (3,3), (1,3) e (3,1), que no limite em questão, são todos de segunda ordem em teoria de perturbação. Lembre-se de que se $J > 3K$, há uma inversão no estado fundamental (com relação aos procedimentos (1,1) e (3,3)), este torna-se um singleto e o procedimento de renormalização se dá em segunda ordem de teoria de perturbação (ver sub-seção 5.2.1). O cenário que encontramos agora é parecido com aquele das sub-seções 5.3.4 e 5.3.5, porém com spins pertencentes a outras RI's além da RI fundamental gerados nos primeiros estágios do fluxo do GR quando este era dominado pelo PFDI do grupo SU(4). Esta complicação adicional não nos permite escrever uma equação de fluxo que possamos resolver analiticamente. Para contornar tal problema, valemo-nos de simulações numéricas para encontrar o ponto fixo correspondente. Deixamos esse estudo para a sub-seção 5.3.7.

Queremos agora analisar o caso em que a anisotropia é simétrica, ou seja, δ tem sinal aleatório e média nula. Neste caso, conforme a relação de recorrência (5.34), o fluxo de renormalização deve preservar essa característica, e portanto, procurando soluções simétricas, encontramos pelos métodos descritos no apêndice D.4.2 que a dispersão da distribuição

de δ deve escalar como

$$\tilde{\sigma}_\delta^2 \sim \Gamma^{\gamma_R} \sigma_{\delta 0}^2, \text{ com } \gamma_R = \frac{1 + \sqrt{13,75}}{4},$$

onde $\sigma_{\delta 0}$ é o desvio padrão da distribuição inicial de δ . Portanto, a anisotropia aleatória é uma perturbação relevante no ponto isotrópico. Quando $\tilde{\sigma}_\delta$ se torna da ordem de 1, a aproximação de anisotropia pequena não é mais válida, e isso ocorre na escala de energia $\Gamma_R \sim \sigma_{\delta 0}^{-2/\gamma_R}$. Além desta, os processos de renormalização ora serão como aqueles descritos no caso em que o fluxo é dominado por grandes K 's, ora serão como aqueles em que J é muito maior que K . Como não há uma simetria em trocar $K \rightleftharpoons J$, isso implica que o valor médio de δ não mais deve ser igual a zero. Toda essa complicação adicional dificulta enormemente uma análise quantitativa do fluxo de renormalização do ponto de vista analítico. Entretanto, análises numéricas podem ser realizadas sem maiores complicações.

Por ora, concluímos que deve haver um ponto fixo instável que separa as duas fases aqui propostas. Além disso, queremos apontar a semelhança do fluxo de renormalização aqui apresentado com aquele proposto para o modelo SU(2) XXZ anisotrópico [Fisher 1994]. Neste último, Fisher mostrou que toda a linha que conecta os pontos XX e XXX flui, na presença de desordem, para o ponto XX, do mesmo modo como aqui, toda a linha $0 \leq J/K \leq 1$ flui para o ponto $J = 0$. Para $J/K > 1$ o sistema flui para um ponto dominado por J 's muito maiores que os K 's. Da mesma maneira como no caso SU(2), para acoplamento na direção z maior que o acoplamento planar, o sistema flui para um ponto fixo onde este último é irrelevante. Associando o acoplamento J com o acoplamento na direção z e o acoplamento K com o acoplamento planar, aqui listamos as semelhanças entre os dois fluxos. As diferenças serão apontadas mais tarde no momento oportuno.

5.3.7 Simulações numéricas

As simulações aqui apresentadas tem como objetivo explorar o fluxo de renormalização em função da anisotropia média $\bar{\delta}$ e de sua variância $\tilde{\sigma}_\delta$ (a anisotropia local δ_i é dada pela eq. (5.32)). Para tal, dizimamos inúmeras cadeias em diversas condições iniciais diferentes ($\bar{\delta}_0, \sigma_{\delta 0}$) e acompanhamos o evolução de $(\bar{\delta}, \tilde{\sigma}_\delta)$ ao longo do fluxo de renormalização.

Utilizamos cadeias que possuem inicialmente $2 \cdot 10^5$ spins, todos pertencentes à RI fundamental. Os valores iniciais dos K 's e dos J 's são gerados da seguinte forma. Primeiramente geramos os valores dos K 's uniformemente distribuídos entre K_0 e $K_{max} = 1$. Em seguida, geramos os valores dos J 's de tal maneira que a anisotropia δ esteja uniformemente distri-

buída com média δ_0 e variância σ_δ desejadas. Construída a cadeia, esta é dizimada até que restem somente 50 spins efetivos. Os dados gerados são uma média sobre um total de 10 realizações de desordem. Por clareza, mostraremos somente as simulações em que $K_0 = 0$, mas também usamos os valores de $K_0 = 0,5$ e $0,9$. Antecipamos que não encontramos nenhuma diferença qualitativa na escolha de K_0 . (Uma pequena diferença quantitativa é verificada somente no início do fluxo de renormalização enquanto ainda há transiente.) Note que, nas regiões $-2 < \bar{\delta} < -1$ e $\bar{\delta} > 1$, podem ocorrer processos onde os acoplamentos renormalizados são maiores que os originais e, portanto, pode-se argumentar que o método de dizimação é inconsistente. Como argumentamos anteriormente, entretanto, isso só ocorre para valores de anisotropia intermediária. Quando $\bar{\delta}$ está próximo dos pontos fixos $\bar{\delta} = -1, 0$ ou $\bar{\delta} \rightarrow \infty$, os acoplamentos renormalizados nunca serão maiores que os originais, e como a anisotropia do sistema sempre flui rapidamente para esses pontos, o fluxo é pouco perturbado pelas dizimações inconvenientes, garantindo a universalidade do mesmo.

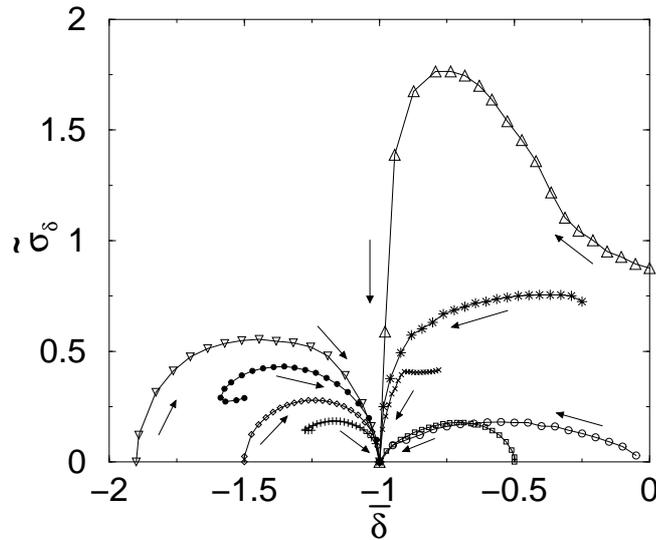


Figura 5.9: Fluxo de renormalização para o modelo $SU(4)$ anisotrópico desordenado como função da média do parâmetro de anisotropia $\bar{\delta}$ e de sua dispersão $\tilde{\sigma}_\delta$, onde a anisotropia local é $\delta_i = J_i/K_i - 1$, para condições iniciais de $-2 < \bar{\delta}_0 < 0$. Cada símbolo diferente representa uma condição inicial diferente e o erro do dado é igual ao tamanho dos mesmos. As linhas conectando os dados numéricos são meramente guias para os olhos que, com o auxílio das setas, indicam a direção do fluxo de renormalização. Todas as curvas indicam que o ponto $\bar{\delta} = -1, \tilde{\sigma}_\delta = 0$ é um ponto fixo estável.

As regras de dizimação são aquelas descritas na seção 5.2. Procuramos o par que possui a maior energia de excitação. Isto é feito determinando a energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado. Caso o estado fundamental tenha a simetria tal que podemos aplicar as regras de dizimação descritas na referida seção, dizemos que o procedimento de dizimação é consistente (seja este dado em primeira ou em segunda ordem de teoria de perturbação). Caso o multiplete fundamental não seja um daqueles propostos para uma dizimação consistente, dizemos que ocorreu uma dizimação inconsistente, e procedemos da seguinte maneira. Retiramos o par de spins em questão (D_i e D_{i+1} , por exemplo) e ligamos o par de spins vizinhos escolhendo aleatoriamente o par de constantes de acoplamento, (K_{i-1}, J_{i-1}) ou (K_{i+1}, J_{i+1}) . Antecipamos que esse tipo de dizimação só ocorre na região $\bar{\delta} < -2$ (que está fora dos nossos interesses).

Os primeiros dados que queremos mostrar estão na fig. 5.9. Esta mostra o fluxo de renormalização para as cadeias cujas condições iniciais são tais que $-2 < \bar{\delta}_0 < 0$. Para todas as curvas estudadas, o fluxo de renormalização leva para o ponto $\bar{\delta} = -1$, $\tilde{\sigma}_\delta = 0$. Neste, a cadeia renormalizada é igualmente populada por spins pertencentes às três RI's totalmente anti-simétricas e os expoentes característicos são aqueles correspondentes aos da cadeia SU(4) isotrópica. Além disso, queremos frisar que todos os procedimentos de dizimação foram do tipo consistente. Para cadeias em que $\bar{\delta}_0 \leq -2$, o grupo de renormalização aqui descrito se mostrou inadequado. Durante o fluxo, a maioria dos procedimentos de dizimação se tornou do tipo inconsistente, uma vez que os J 's cresceram em módulo mais que os K 's, mas estes eram negativos. Argumentamos, neste caso, que o sistema flui para uma fase ferromagnética.

Mudemos agora nossa atenção para a região em que $\bar{\delta}_0 > 2$. Para investigá-la numericamente redefinimos φ (ver eq. (5.30)) para

$$\varphi_i = \frac{|K_i|}{J_i},$$

como medida da anisotropia. A fig. 5.10(a) mostra as simulações numéricas para três cadeias com diferentes condições iniciais na região em que $\bar{\delta}_0 > 2$. Perto do ponto fixo, a constante de acoplamento K se torna irrelevante e de sinal aleatório (daí a escolha de φ). Além disso, *não há* surgimento de spins pertencentes nem à RI auto-conjugada e nem à RI antifundamental. Todos os processos de dizimação são de segunda ordem em teoria de perturbação, e a fase é governada por um ponto fixo de desordem infinita com os expoentes característicos do grupo SU(2). Este resultado já era esperado, uma vez que

sendo K irrelevante, as duas cadeias se desacoplam.

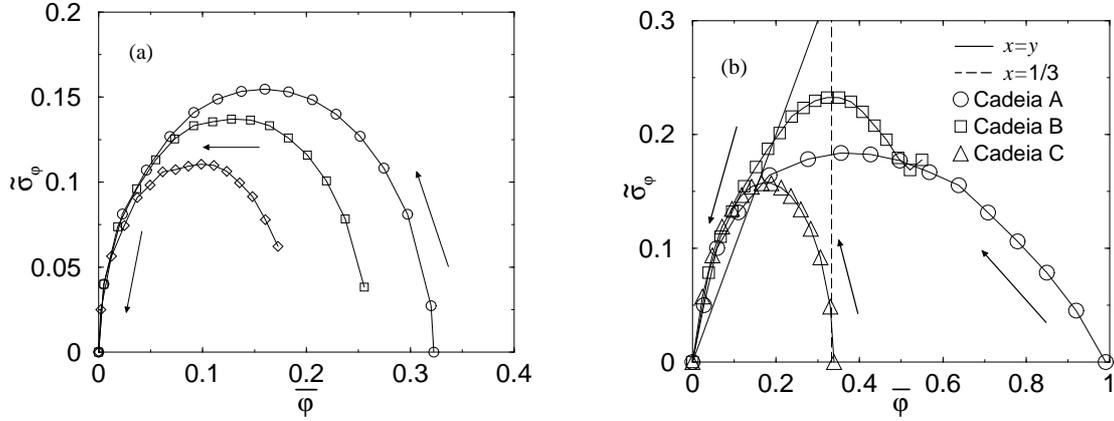


Figura 5.10: Fluxo de renormalização para o modelo SU(4) anisotrópico desordenado como função da média do parâmetro de anisotropia $\bar{\varphi}$ e de sua dispersão $\tilde{\sigma}_\varphi$, onde a anisotropia local é $\varphi_i = |K_i|/J_i$, para condições iniciais de (a) $\bar{\varphi}_0 < 1/3$ e (b) $1/3 < \bar{\varphi}_0 < 1$. Cada símbolo diferente representa uma condição inicial diferente e o erro dos dados é igual ao tamanho dos mesmos. As linhas conectando os dados numéricos são meramente guias para os olhos que, com o auxílio das setas, indicam a direção do fluxo de renormalização. Todas as curvas indicam que o ponto $\bar{\varphi} = 0, \tilde{\sigma}_\varphi = 0$ é um ponto fixo estável. A linha contínua (pontilhada) é a curva onde $\tilde{\sigma}_\varphi = \bar{\varphi}$ ($\bar{\varphi} = 1/3$).

Finalmente, devemos agora investigar a região em que $0 < \bar{\delta}_0 < 2$. Para tal monitoramos $\bar{\varphi}$ e $\tilde{\sigma}_\varphi$ ao longo do fluxo de renormalização (ver fig. 5.10(b)). Ao mesmo tempo, monitoramos também a probabilidade de ocorrência de um processo de dizimação em primeira ordem de teoria de perturbação q e a população de spins pertencentes às três RI's em questão, tudo isso em função da escala de energia Ω (ver figs. 5.11. a e b, respectivamente). As cadeias têm as seguintes condições iniciais: cadeia A: $\bar{\varphi}_0 = 1,01$ e $\sigma_\varphi = 0$, cadeia B: $\bar{\varphi}_0 = \sigma_\varphi = 2/3$, e cadeia C: $\bar{\varphi}_0 = 1/2,95$ e $\sigma_\varphi = 0$, cujos dados serão denotados pelos símbolos de círculo, quadrado e triângulo, respectivamente. Já adiantamos que durante a iteração do método de renormalização, todos os processos de dizimação foram consistentes, i. e., todas as vezes que dizimamos um par, o multipletto fundamental era um daqueles considerados por nós na seção 5.2.

Como argumentamos na sub-seção 5.3.6 e é verificado nos dados numéricos mostrados na fig. 5.10(b), o sistema flui para o ponto fixo onde o acoplamento K é irrelevante. Mas, diferentemente do caso anterior (onde $\bar{\delta}_0 > 2$), a cadeia é populada por spins pertencentes à todas RI's totalmente anti-simétricas (ver fig 5.11(b)). Além disso, a probabilidade de

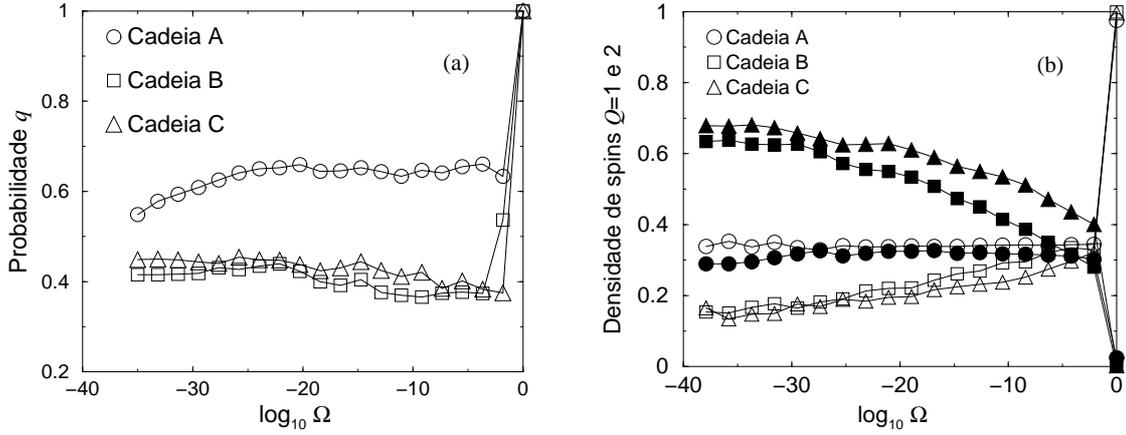


Figura 5.11: (a) Fração de processos de dizimação em primeira ordem de teoria de perturbação q , e (b) fração dos spins pertencentes às representações fundamental ($Q = 1$) e auto-conjugada ($Q = 2$), em símbolos vazios e cheios, respectivamente. Todas estas frações em função da escala de energia Ω . As densidades de spins pertencentes às RI's fundamental e antifundamental (não mostradas aqui por motivo de clareza) são iguais.

ocorrência de uma dizimação em primeira ordem de teoria de perturbação não é nula (ver fig. 5.11(a)). Veja também que as 3 cadeias não apresentam o mesmo comportamento perto do ponto fixo. A fim de descobrir a característica dinâmica desses pontos fixos, monitoramos a fração de aglomerados de spins n_Γ em função da escala de energia $\Gamma = -\ln \Omega$, mostrada na fig. 5.12. Para essa simulação, usamos cadeias de tamanho inicial $L_0 = 10^6$. Como nas anteriores, os dados numéricos aqui são gerados a partir de uma média em 10 realizações de desordem. Utilizamos distribuições iniciais uniformes ($J_0 < J < 1$) para $J_0 = 0,9, 0,5$, e 0, e os acoplamentos K 's distribuídos de tal maneira que as condições iniciais de $\bar{\varphi}_0$ e σ_φ fossem satisfeitas. Em todas as simulações o expoente de tunelamento permaneceu inalterado independente da desordem inicial. A cadeia D tem a seguinte condição inicial: $\varphi_0 = 0,07$ e $\sigma_0 = 0$, porém, diferentemente das demais, é inicialmente populada por spins pertencentes às 3 possíveis RI's totalmente anti-simétricas.

O comportamento dinâmico encontrado nessas cadeias é compatível com o escalonamento dinâmico ativado (ver eq. 4.23), porém o expoente de tunelamento, ψ , não é universal: apesar de não depender da desordem inicial, depende da anisotropia inicial. No detalhe da fig. 5.12, mostramos ψ em função da anisotropia média inicial $\bar{\varphi}_0$ para as cadeias com anisotropia uniforme ($\sigma_\varphi = 0$). Este varia com a anisotropia média inicial se $\varphi_c < \varphi_0 < 1$, onde $\varphi_c \approx 0,5$. Caso $1/3 < \varphi_0 < \varphi_c$, o expoente crítico satura em $\psi^* \approx 1,6^{-1} = 5/8$. De modo interessante, o expoente de tunelamento da cadeia D é igual a ψ^* . Note que

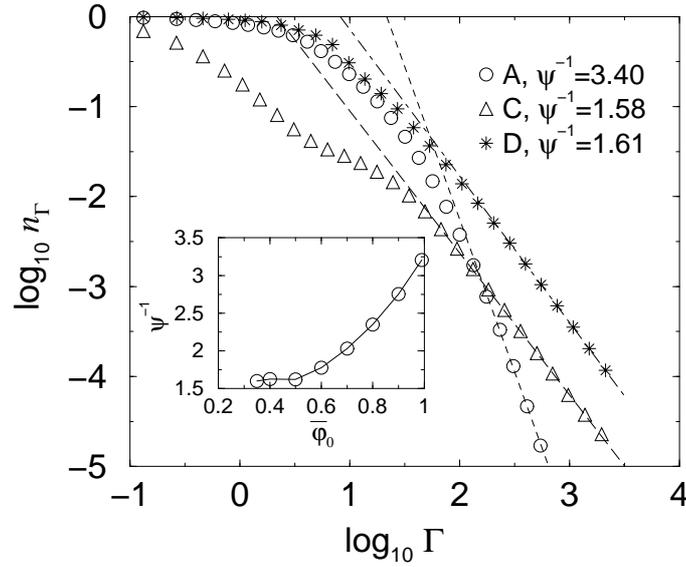


Figura 5.12: Fração de aglomerados de spin ativos n_Γ em função da escala de energia Γ . Conforme a eq. (5.25), o expoente de tunelamento ψ é calculado a partir de uma regressão linear mostrada pelas linhas. No detalhe mostramos a dependência de ψ com a anisotropia média para as cadeias cuja dispersão da anisotropia é inicialmente zero, i. e., $\sigma_0 = 0$.

esta cadeia, se fosse inicialmente populada somente por spins da RI fundamental, teria o expoente de tunelamento igual a $1/2$. Isto sugere fortemente que a presença de outros spins não pertencentes à RI fundamental desestabiliza o PFDI do grupo $SU(2)$.

É interessante notar que esse novo ponto fixo, com expoente de tunelamento ψ^* , possui um tempo de relaxação τ muito maior que o da cadeia de spin $SU(2)$. Lembre-se que

$$\tau \sim \exp \{L^\psi\}.$$

Nas cadeias de spins $SU(N)$ isotrópicas, o tempo de relaxação diminui com N , ($\psi = 1/N$, ver eq. (4.23)). Contrariamente, a introdução de anisotropia aumenta o seu valor. Fato semelhante foi observado nas cadeias de spins- $1/2$ desordenadas com correlação de longo alcance entre os acoplamentos [Rieger 1999]. Porém, no problema em questão, a anisotropia naturalmente correlaciona a probabilidade de uma conexão ser dizimada com as RI's dos respectivos spins.⁶

Qual o máximo valor que ψ pode ter? O expoente de tunelamento ψ deve ter o valor

⁶Lembre-se de que somente na região em questão o "gap" de excitação de um par de spins depende das RI's dos mesmos.

máximo igual a dimensão do sistema D , no caso $D = 1$. Isso vem da interpretação da probabilidade de tunelar todo um volume L^D . Como o sistema é interagente e sujeito à flutuações quânticas (maximizadas em 1 dimensão) novos expoentes de tunelamento surgem, diminuindo o tempo de relaxação. Pode-se então interpretar ψ como a dimensão fractal do aglomerado tunelante.

5.4 Considerações finais e conclusões

Devemos agora resumir os nossos principais resultados sobre o estudo da cadeia de spins SU(4) anisotrópica.

Aplicando o método do GR para desordem forte, acompanhamos ao longo do fluxo de renormalização a distribuição dos acoplamentos K e J bem como a média e a dispersão da anisotropia, $\bar{\delta}$ e $\tilde{\sigma}_\delta$, respectivamente (ver eq. (5.32)). Dessa maneira, propomos um diagrama de fluxo de renormalização em função de $\bar{\delta}$ e $\tilde{\sigma}_\delta$ ilustrado na fig. 5.13.

Na presença de desordem, toda a linha $-2 < \delta_0 < 0$ flui para o ponto fixo $\delta = -1$ ($J = 0$) (com δ_0 sendo a média da anisotropia inicial). Este ponto fixo estável mimetiza a física da cadeia isotrópica, ou seja, possui os mesmos expoentes característicos da cadeia SU(4) desordenada, por exemplo, $\psi = 1/4$. Para $\delta_0 > 2$, o acoplamento intercadeia K é irrelevante e as cadeias se desacoplam. Logo, o sistema é governado pelo ponto fixo de desordem infinita característico do grupo SU(2), cujo expoente de tunelamento é igual a $\psi = 1/2$. No caso intermediário, $0 < \delta_0 < 2$, o acoplamento K também vai a zero, entretanto, as cadeias não se desacoplam inteiramente. Nos primeiros estágios do grupo de renormalização, spins efetivos que pertencem às outras RI's além da RI fundamental foram gerados. Estes conectam as duas cadeias e persistem em todo o fluxo de renormalização. Impressionantemente, o sistema flui para um ponto fixo de desordem infinita com expoente de tunelamento dependente da anisotropia inicial atingindo um valor máximo $\psi^* \approx 5/8$. Controlando a transição de fase entre os pontos $J = 0$ e este último $K = 0$ está, no caso de anisotropia uniforme $\sigma_{\delta_0} = 0$, o ponto crítico isotrópico SU(4). No caso de anisotropia desordenada, o ponto crítico KJC deve controlar tal transição. Enfatizamos que os expoentes característicos desse ponto são de difícil obtenção porque requerem que o fluxo se mantenha sobre a linha crítica por bastante tempo. Simulações numéricas sempre estão sujeitas a flutuações pelo fato do sistema ser finito e ao final o sistema ou flui para o ponto fixo $J = 0$ ou $K = 0$. No ponto $(\delta_0 = 2, \sigma_{\delta_0} = 0)$, o grupo de renormalização é inválido devido a uma degenerescência acidental (ver sub-seção 5.2.1) e para $\delta \leq -2$, argumenta-

mos que o sistema flui para uma fase ferromagnética que está além do tratamento aqui proposto.

Devemos agora apontar a validade dos resultados obtidos. Apesar do fato de que, em algumas regiões do diagrama de fluxo, os procedimentos de renormalização geram acoplamentos renormalizados maiores que os originais, estes são poucos e rapidamente são suprimidos perto dos pontos fixos e, além disso, não desviam o fluxo de renormalização dos mesmos. Como todos os pontos fixos encontrados são de desordem infinita, argumentamos que os resultados aqui apresentados são assintoticamente exatos uma vez que o esquema perturbativo se torna cada vez melhor.

Por fim, devemos comparar os nossos resultados com a física conhecida do sistema

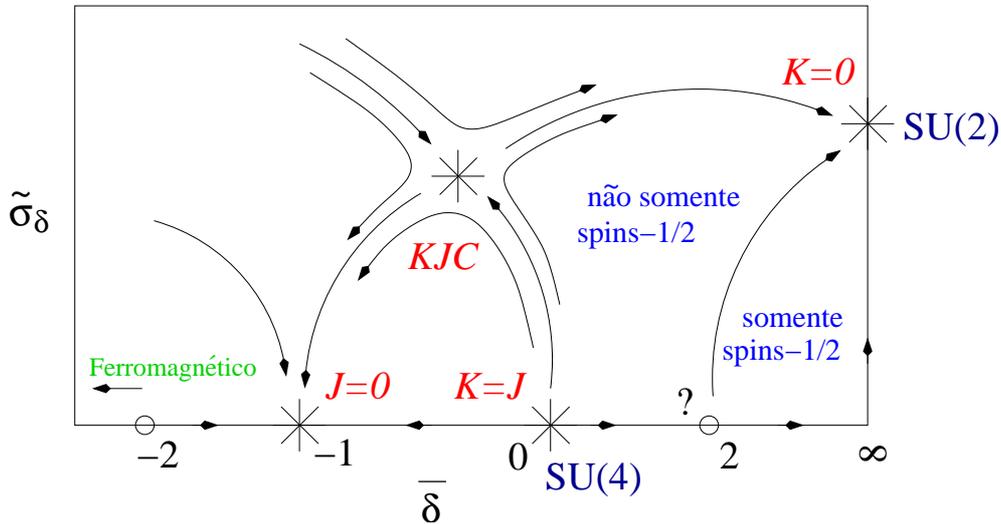


Figura 5.13: Fluxo de renormalização em função da anisotropia média $\bar{\delta}$ e de sua dispersão $\tilde{\sigma}_\delta$, onde a anisotropia local é dada por $\delta_i = J_i/K_i - 1$. O ponto fixo estável $\delta = -1$ ($J = 0$) tem a mesma física que o ponto fixo isotrópico da cadeia $SU(4)$, onde o expoente de tunelamento é igual a $\psi = 1/4$ e controla toda a física da região $-2 < \bar{\delta} < 0$. Para $\bar{\delta} > 0$, o sistema flui para o ponto fixo $K = 0$. Se $\bar{\delta} > 2$, as cadeias se desacoplam e o sistema é governado pelo ponto fixo característico da cadeia de spins $SU(2)$, com $\psi = 1/2$. Entretanto, se $0 < \bar{\delta} < 2$, as cadeias não se desacoplam inteiramente uma vez que o sistema é populado por spins de outras RI's além da fundamental. Neste caso, ψ varia continuamente com as condições iniciais de anisotropia e tem um máximo de $\psi \approx 5/8$. O ponto isotrópico $K = J$ controla a transição de fase entre os pontos $J = 0$ e $K = 0$ caso a anisotropia seja uniforme ($\sigma_{\delta 0} = 0$), caso contrário, a transição é controlada pelo ponto crítico KJC . No ponto ($\bar{\delta} = 2, \tilde{\sigma}_\delta = 0$), o grupo de renormalização é inválido e para $\delta \leq -2$, o sistema flui para uma fase ferromagnética.

limpo. O hamiltoniano (5.5) foi estudado pela ref. [Pati 1998] onde o diagrama de fases J^1/K vs. J^2/K foi determinado. Na linha em que $J^1 = J^2 = J$, o sistema é ferromagnético para $\delta = J/K \leq -2$. A região $-2 < \delta \leq 0$ é crítica onde o ponto $\delta = 0$ possui simetria SU(4) e é exatamente solúvel via “Ansatz” de Bethe e possui 3 modos bosônicos sem massa [Sutherland 1975]. A região $\delta > 0$ é espontaneamente dimerizada (há um “gap” no espectro de excitações de spin). O estado fundamental do ponto $\delta = 2$ é exatamente obtido sendo duplamente degenerado e semelhante ao estado fundamental de Majumdar-Gosh da cadeia de spins-1/2 AF com interação entre primeiros e segundos vizinhos [Kolezhuk 1998]. Como discutimos na seção 3.3, este estado é instável contra a introdução de desordem [Yang 1996]. No caso em questão, o GR aqui apresentado fortemente sugere que o sistema na região $\delta > 0$, apesar de apresentar um “gap”, é instável contra a introdução de desordem. Da mesma maneira, a linha crítica é desestabilizada pela desordem. A ref. [Pati 1998] mostra que a pequena anisotropia ($J^1/J^2 \approx 1$) não muda a fase do sistema. Conjecturamos que este resultado permanece válido no caso desordenado. Isto é evidente para um sistema cuja condição inicial é $\bar{\delta} > 2$. As cadeias de spins-1/2 se desacoplam pois o acoplamento K renormaliza para zero e, portanto, são governadas pelo PFDI do grupo SU(2), independentemente da anisotropia entre J_i^1 e J_i^2 . Próximo ao ponto fixo $J = 0$, argumentamos que pequena anisotropia entre J_i^1 e J_i^2 deve ser irrelevante uma vez que estes acoplamentos renormalizam para zero. Apesar dessa pequena anisotropia levantar a degenerescência de alguns dos estados fundamentais mencionados nos procedimentos de dizimação da seção 5.2, essa quebra de degenerescência é pequena. Conjecturamos que o seu efeito líquido é uma modificação *irrelevante* nos fatores numéricos das relações de recorrência das constantes de acoplamento renormalizadas. O mesmo argumento vale para um sistema cuja condição inicial é $0 < \bar{\delta} < 2$.

Capítulo 6

Revisitando a cadeia de Heisenberg

Neste capítulo, revisitamos a cadeia de Heisenberg XXZ antiferromagnética desordenada de spins-1/2 para calcular a função de correlação spin-spin média.

A conjectura aceita hoje é de que esta função segue uma lei de potência cujo expoente de decaimento é universal e igual a $\eta = 2$ (ver seção 2.1), porém, a amplitude é não universal, como usual em sistemas críticos. No intuito de analisar a fonte de não universalidade da mesma, deduzimos a função correlação de maneira dependente da estrutura do estado fundamental da fase de singletos aleatórios em que esse sistema se encontra. Mostramos que o fluxo de renormalização, por si só, não é capaz de produzir uma amplitude não universal. Entretanto, há outras fontes de não universalidade. O método do grupo de renormalização não é exato, e portanto, flutuações dos singletos devem ser esperadas. Tais flutuações são responsáveis pela não universalidade da amplitude.

Apesar da não universalidade da mesma, descobrimos certas peculiaridades nestas flutuações que nos apontam características interessantes da função de correlação. Além disso, associamos a função de correlação com a entropia de emaranhamento do sistema. Recentemente foi calculado que a entropia escala com o logaritmo do comprimento do sub-sistema e com uma amplitude que é universal. Tal amplitude está numericamente em perfeito acordo com a nossa proposta sobre a amplitude da função de correlação.

Dividimos esse capítulo da seguinte maneira. Na seção 6.1 calculamos a função de correlação e discutimos a possível universalidade de sua amplitude. Em seguida, na seção 6.2, relacionamos a entropia de emaranhamento com a função de correlação spin-spin e discutimos a universalidade da amplitude destas duas funções. Por fim, na seção 6.3, resumimos nossos resultados.

6.1 A função de correlação

Nesta seção, derivamos a função de correlação spin-spin média para a cadeia de Heisenberg XXZ antiferromagnética de spins-1/2 desordenada. Primeiramente, introduzimos o problema em questão rededuzindo a função correlação média como é aceita na literatura para em seguida derivá-la de maneira inédita.

O hamiltoniano de interesse é dado por

$$H = \sum J_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta_i S_i^z S_{i+1}^z), \quad (6.1)$$

onde \mathbf{S}_i são operadores de spins-1/2 usuais referentes ao sítio i , os J_i 's são variáveis aleatórias positivas e independentes distribuídas de acordo com $P(J)$, e Δ_i é a medida da anisotropia local. Sabe-se que para $-1/2 < \Delta_i < 1$, o sistema renormaliza para a cadeia XX (ou seja, $\tilde{\Delta}_i \rightarrow 0, \forall i$) que é governada por um ponto fixo universal de desordem infinita [Doty 1992, Fisher 1994]. Neste, a distribuição de ponto fixo dos acoplamentos é dada por

$$P^*(J; \Omega) = \frac{\vartheta(\Omega)}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J} \right)^{1-\vartheta(\Omega)}, \quad (6.2)$$

com $\vartheta(\Omega) = -1/\ln \Omega$, sendo $\Omega = \max \{J_i\}$ a escala de energia do problema. Note que esta é a mesma distribuição de ponto fixo para a cadeia isotrópica ($\Delta_i = 1, \forall i$) como mostrado na seção 2.1. Na verdade, no cenário aproximado do método do grupo de renormalização, não há diferenças entre esses sistemas quando $-1/2 < \Delta_i \leq 1$.

6.1.1 Lei de escala da função de correlação média

A primeira derivação da função correlação spin-spin média,

$$C(l) = \overline{\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+l} \rangle},$$

onde $\overline{\langle \dots \rangle}$ denota a média quântica no estado fundamental e na desordem, segundo o nosso conhecimento, foi dada por Fisher na ref. [Fisher 1994]. O comportamento de escala desta foi discutido na seção 2.1 e é obtido da seguinte maneira. Ao se eliminar sucessivamente pares de spins de acordo com o procedimento de renormalização de Ma, Dasgupta e Hu, estes se tornam fortemente acoplados. Como raramente pares de spins extremamente afastados se correlacionam em singletos, tipicamente eles desenvolveram fracas correlações. Por esse motivo, a correlação média deve ser dominada pelos raros pares de spins que se

acoplam em singletos no limite de longas distâncias. A probabilidade de um dado par de spins afastados de uma distância l entre si se acoplar em um singlete é igual a probabilidade do mesmo estar “ativo” (ou seja, os spins que o compõem não terem sido dizimados) na escala de comprimento l . Dessa maneira,

$$C(l) \sim n_{\Omega}^2, \Rightarrow C(l) = \frac{(-1)^l c}{l^{\eta}}, \quad (6.3)$$

onde n_{Ω} é a densidade de spins ativos na escala de energia Ω correspondente, $\eta = 2$ é o expoente de decaimento e c é a amplitude “não-universal” da função de correlação. Esta é a conjectura de Fisher e tem sido confirmada numericamente ao longo dos anos [Henelius 1998, Lafflorencie 2003, Lafflorencie 2004].

6.1.2 Cálculo da correlação média

Devemos agora calcular a função de correlação média de uma maneira mais formal que os argumentos probabilísticos de Fisher.

A idéia por trás desse cálculo é a seguinte. Suponha que possamos acompanhar exatamente a distribuição $P(J, l; \Omega)$ ao longo do fluxo de renormalização, onde $P(J, l; \Omega) dJ dl$ é a probabilidade de encontrarmos uma constante de acoplamento entre J e $J + dJ$ cujos spins que a compartilham estão separados de uma distância entre l e $l + dl$. Se tal possibilidade for alcançada, podemos calcular a quantidade de singletos de tamanho entre l e $l + dl$ quando uma cadeia inteira é dizimada,

$$N_{sing}(l) dl = \int_0^{\Omega_0} N_{\Omega} P(J = \Omega, l; \Omega) d\Omega dl,$$

onde $N_{\Omega} = L_0 n_{\Omega}$ é o número total de spins ativos na escala de energia Ω , L_0 é o número total de spins na cadeia, e Ω_0 é a escala de energia inicial. Felizmente, podemos acompanhar exatamente a distribuição $P(J, l; \Omega) dJ dl$ para uma determinada família de P 's. Esta família é constituída por distribuições que tem as mesmas características funcionais que a distribuição de ponto fixo (6.2), ou seja, são distribuições onde $0 < J < \Omega_0$ e proporcionais a J^{α} , com $\alpha > -1$. No limite $l \rightarrow \infty$, o resultado obtido para essa família de condições iniciais se torna universal, uma vez que todas as distribuições bem comportadas fluem para o mesmo ponto fixo [Fisher 1994]. Iremos agora, seguindo os passos da ref. [Iglói 2001], derivar n_{Ω} e $P(J = \Omega, l; \Omega)$ exatamente ao longo do fluxo de renormalização. Naturalmente o cálculo exato da função de correlação média deve ir além da aproximação descrita por

esse grupo de renormalização, onde os spins dizimados se acoplam em singletos. Considerar perturbações no estado de singlete resulta em contribuições adicionais para a amplitude da função de correlação no limite $l \rightarrow \infty$. Discutiremos sobre tais contribuições na seção 6.3. Por ora, o leitor deve ter em mente que estamos resolvendo exatamente um problema aproximado.

Primeiramente, devemos calcular a distribuição de ponto fixo dos acoplamentos J 's, $P_J(J; \Omega) = \int P(J, l; \Omega) dl$. A equação de fluxo é dada por

$$-\frac{\partial}{\partial \Omega} P_J = q P_J P_\Omega + p P_\Omega \int dJ_1 dJ_3 P_J(J_1) P_J(J_3) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right), \quad (6.4)$$

onde $P_\Omega = P_J(J = \Omega; \Omega)$, $p = 1/(N-1)$ e $q = 1-p$ são as probabilidades de ocorrência de uma dizimação em segunda e primeira ordem de teoria de perturbação, respectivamente (ver eq. 4.20). Note que estamos considerando agora o caso $SU(N)$, uma vez que desejamos futuramente generalizar o resultado da cadeia $SU(2)$.

Substituindo o “Ansatz”

$$P_J(J; \Omega) dJ = \frac{\vartheta(\Omega)}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\vartheta(\Omega)} dJ, \quad (6.5)$$

e as seguinte igualdades,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Omega} P_J &= \left[-\frac{\vartheta}{\Omega^2} + \frac{\vartheta'}{\Omega} + \frac{\vartheta}{\Omega} \left(\frac{1-\vartheta}{\Omega} - \vartheta' \ln \frac{\Omega}{J} \right) \right] \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\vartheta}, \\ &= \frac{1}{\Omega} \left(\vartheta' - \frac{\vartheta^2}{\Omega} + \vartheta \vartheta' \ln \frac{\Omega}{J} \right) \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\vartheta}, \\ q P_J P_\Omega &= \frac{q}{\Omega} \left(\frac{\vartheta^2}{\Omega}\right) \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\vartheta}, \\ p P_\Omega P^J \otimes P &\equiv p \frac{\vartheta^3}{\Omega^3} \int_J^\Omega dJ \frac{\Omega}{J_1} \left(\frac{\Omega}{J_1}\right)^{1-\vartheta} \left(\frac{J_1}{J}\right)^{1-\vartheta} = p \frac{\vartheta^3}{\Omega^2} \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\vartheta} \ln \frac{\Omega}{J}, \end{aligned}$$

na equação de fluxo (6.4), encontramos que

$$-\vartheta' + \frac{\vartheta^2}{\Omega} + \vartheta \vartheta' \ln \frac{\Omega}{J} = \frac{q\vartheta^2}{\Omega} + \frac{p\vartheta^3}{\Omega} \ln \frac{\Omega}{J},$$

onde $\vartheta' = d\vartheta/d\Omega$. Dessa maneira,

$$\frac{d\vartheta}{d\Gamma} = -p\vartheta^2, \Rightarrow \vartheta(\Omega) = \frac{\vartheta_0}{1 + p\vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0)},$$

com $\Gamma = -\ln \Omega$ e $\vartheta_0 = \vartheta(\Omega_0)$.

A fração de aglomerados de spins ativos, n_Ω , é obtida a partir da equação de taxa (ver seção 4.5),

$$dn_\Omega = (2p + q) n_\Omega P_J(J = \Omega) d\Omega = -(1 + p) n_\Omega \vartheta(\Omega) d\Gamma,$$

e portanto,

$$\frac{dn_\Omega}{n_\Omega} = -(1 + p) \frac{\vartheta_0 d\Gamma}{1 + p\vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0)}, \Rightarrow \ln n_\Omega = -\frac{1 + p}{p} \ln(1 + p\vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0)),$$

onde usamos a condição inicial $n_{\Omega_0} = 1$. Logo,

$$n_\Omega = \frac{1}{(1 + p\vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0))^N}. \quad (6.6)$$

(Note que no limite $\Gamma \rightarrow \infty$, a eq. (6.6) recupera a eq. (4.23).)

Desejamos agora obter a distribuição conjunta de constantes de acoplamento e distâncias entre os spins não dizimados $P(J, l; \Omega) dJ dl$. A equação de fluxo correspondente é (ver eq. (4.33))

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \Omega} P &= -q P_\Omega P + 2q \int dl_1 dl_2 P(J, l_1) P(\Omega, l_2) \delta\left(l - l_1 - \frac{1}{2}l_2\right) \\ &+ p \int dl_1 dl_2 dl_3 dJ_1 dJ_3 P(\Omega, l_2) P(J_1, l_1) P(J_3, l_3) \\ &\times \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right) \delta(l - l_1 - l_2 - l_3), \end{aligned}$$

onde a relação de recorrência para a variável l é

$$\tilde{l}_1 = l_1 + \frac{1}{2}l_2, \text{ e } \tilde{l}_3 = l_3 + \frac{1}{2}l_2,$$

se a dizimação se dá em primeira ordem de teoria de perturbação, e

$$\tilde{l} = l_1 + l_2 + l_3,$$

se a dizimação se dá em segunda ordem de teoria de perturbação. Note que podemos usar uma relação mais conveniente para a dizimação em primeira ordem

$$\tilde{l}_1 = l_1, \text{ e } \tilde{l}_3 = l_3 + l_2.$$

Esta relação é equivalente à anterior no limite de $l \gg 1$. Entretanto, a equação de fluxo torna-se

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \Omega} P &= q \int dl_1 dl_2 P(J, l_1) P(\Omega, l_2) \delta(l - l_1 - l_2) \\ &+ p \int dl_1 dl_2 dl_3 dJ_1 dJ_3 P(\Omega, l_2) P(J_1, l_1) P(J_3, l_3) \\ &\times \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right) \delta(l - l_1 - l_2 - l_3). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Vamos nos concentrar na equação de fluxo (6.7). Fazendo uma transformada de Laplace na variável l ,

$$\tilde{P}(J, \lambda) = \int_0^\infty e^{-l\lambda} P(J, l) dl,$$

a equação de fluxo torna-se

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \Omega} \tilde{P} &= q \tilde{P}(\Omega, \lambda) \tilde{P}(J, \lambda) \\ &+ p \tilde{P}(\Omega, \lambda) \int dJ_1 dJ_3 \tilde{P}(J_1, \lambda) \tilde{P}(J_3, \lambda) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right). \end{aligned} \quad (6.8)$$

Como na resolução da eq. (6.4), usaremos o “Ansatz”

$$\tilde{P}(J, \lambda; \Omega) = \frac{\alpha(\lambda, \Omega)}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\beta(\lambda, \Omega)}, \quad (6.9)$$

com a condição de contorno

$$\alpha(\lambda = 0, \Omega) = \beta(\lambda = 0, \Omega) = \vartheta(\Omega).$$

Substituindo o “Ansatz” (6.9) na equação de fluxo (6.8), encontramos que

$$\frac{d}{d\Gamma} \alpha = -\alpha\beta + q\alpha^2, \quad (6.10)$$

$$\frac{d}{d\Gamma} \beta = -p\alpha^2. \quad (6.11)$$

Antes de resolvermos as equações acima, podemos calcular a distância média entre os aglomerados de spins,

$$\begin{aligned}
\bar{l} &= \int_0^\infty l \int_0^\Omega P(J, l) dJ dl = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \int_0^\Omega \int_0^\infty l e^{-l\lambda} P(J, l) dJ dl, \\
&= \lim_{\lambda \rightarrow 0} -\frac{d}{d\lambda} \int_0^\Omega \int_0^\infty e^{-l\lambda} P(J, l) dl dJ, \\
&= \lim_{\lambda \rightarrow 0} -\frac{d}{d\lambda} \int_0^\Omega \tilde{P}(J, \lambda) dJ = \lim_{\lambda \rightarrow 0} -\frac{d}{d\lambda} \left(\frac{\alpha(\lambda, \Omega)}{\beta(\lambda, \Omega)} \right), \\
&= -\lim_{\lambda \rightarrow 0} \lim_{\Delta\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\lambda} \left(\frac{\alpha(\lambda + \Delta\lambda, \Omega)}{\beta(\lambda + \Delta\lambda, \Omega)} - \frac{\alpha(\lambda, \Omega)}{\beta(\lambda, \Omega)} \right), \\
&= \lim_{\Delta\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\lambda} \left(1 - \frac{\alpha(\Delta\lambda, \Omega)}{\beta(\Delta\lambda, \Omega)} \right), \\
&= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\lambda} \left(1 - \frac{\alpha(\lambda, \Omega)}{\beta(\lambda, \Omega)} \right). \tag{6.12}
\end{aligned}$$

Portanto, como $\bar{l} > 0$, $\beta > \alpha$ quando $\lambda \rightarrow 0$.

Vamos considerar a partir de agora o caso em que $N = 2$, ou seja, $p = 1 - q = 1$. Neste caso, as eqs. (6.10) e (6.11), tornam-se

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\Gamma} \alpha &= -\alpha\beta, \\
\frac{d}{d\Gamma} \beta &= -\alpha^2,
\end{aligned}$$

respectivamente. Logo,

$$\frac{d}{d\Gamma} (\beta^2 - \alpha^2) = 0, \Rightarrow \beta^2 - \alpha^2 = c^2(\lambda), \tag{6.13}$$

o que nos leva a

$$\frac{d}{d\Gamma} \beta + \beta^2 = c^2, \Rightarrow \left(\frac{1}{c + \beta} + \frac{1}{c - \beta} \right) d\beta = 2cd\Gamma,$$

que é de relativamente simples solução,

$$\beta(\lambda, \Omega) = \frac{\beta_0 c + c^2 \tanh(c(\Gamma - \Gamma_0))}{c + \beta_0 \tanh(c(\Gamma - \Gamma_0))}, \tag{6.14}$$

onde $\beta_0 = \beta(\lambda, \Gamma_0)$. Da eq. (6.13), facilmente chegamos a

$$\alpha(\lambda, \Omega) = \frac{c\sqrt{\beta_0^2 - c^2}}{c \cosh(c(\Gamma - \Gamma_0)) + \beta_0 \sinh(c(\Gamma - \Gamma_0))}. \quad (6.15)$$

Devemos agora descobrir como $c(\lambda)$ se comporta para $\lambda \ll 1$. Primeiramente devemos calcular o limite de α e β quando $\lambda \rightarrow 0$.

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \beta = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{\vartheta_0 c + c^3(\Gamma - \Gamma_0)}{c + \vartheta_0 c(\Gamma - \Gamma_0)},$$

onde estamos usando a hipótese de que $c(\lambda \rightarrow 0) \ll 1$. Logo,

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \beta = \frac{\vartheta_0}{1 + \vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0)} = \vartheta(\Omega),$$

que é o comportamento esperado, o que confirma a hipótese de que $c(\lambda = 0) = 0$. Análogamente,

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \alpha = \frac{\vartheta_0}{1 + \vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0)} = \vartheta(\Omega).$$

Calculando agora a distância média entre os spins (ver eq. (6.12)),

$$\begin{aligned} \bar{l} &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\lambda} \left(1 - \frac{\alpha(\lambda, \Omega)}{\beta(\lambda, \Omega)} \right) = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\lambda} \left(1 - \frac{\beta\sqrt{1 - c^2/\beta^2}}{\beta} \right), \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\lambda} \left(1 - \left(1 - \frac{c^2}{2\beta^2} \right) \right), \\ &= \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\lambda} \frac{c^2}{2\beta^2} = \frac{a^2}{2\vartheta_0^2} (1 + \vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0))^2, \\ &= \bar{l}_0 (1 + \vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0))^2, \end{aligned} \quad (6.16)$$

onde usamos que, *para obter uma solução bem comportada*, $c^2 = a^2\lambda + \mathcal{O}(\lambda^2)$, e

$$\bar{l}_0 = \bar{l}(\Omega_0) = \frac{a^2}{2\vartheta_0^2},$$

é o parâmetro de rede que usualmente definimos como 1. Note ainda que a equação (6.16) é perfeitamente condizente com (ver eq. (6.6))

$$\bar{l}(\Omega) = \bar{l}_0/n_\Omega.$$

Para obter a distribuição de $P(J, l)$ devemos fazer a transformada inversa de Laplace na solução $\tilde{P}(J, \lambda)$ da eq. (6.9). Tal tarefa é de difícil realização. Por isso, iremos nos concentrar somente no comportamento perto do ponto fixo onde $\lambda \rightarrow 0$, $\Gamma - \Gamma_0 \rightarrow \infty$, mas $a\lambda^{1/2}(\Gamma - \Gamma_0) \approx \mathcal{O}(1)$. Com esse *comportamento de escala apropriado*, as eqs. (6.14) e (6.15) tornam-se,

$$\begin{aligned}\beta(\lambda, \Omega) &= a\sqrt{\lambda} \coth\left(a\sqrt{\lambda}(\Gamma - \Gamma_0)\right), \\ \alpha(\lambda, \Omega) &= a\sqrt{\lambda} \operatorname{cosech}\left(a\sqrt{\lambda}(\Gamma - \Gamma_0)\right),\end{aligned}$$

respectivamente.

Como estamos interessados na probabilidade de dizimar uma conexão de comprimento l , não precisamos saber completamente $P(J, l)$, basta

$$\begin{aligned}P(J = \Omega, l) &= \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \frac{d\lambda}{2\pi i} \frac{\alpha(\lambda, \Omega)}{\Omega} e^{\lambda l}, \\ &= \text{Soma de todos os res\u00edduos de } \left(\frac{\alpha(\lambda, \Omega)}{\Omega} e^{\lambda l}\right), \\ &= \frac{4\pi^2}{\Omega a^2 (\Gamma - \Gamma_0)^3} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} n^2 \exp\left\{-\left(\frac{n\pi}{a(\Gamma - \Gamma_0)}\right)^2 l\right\}.\end{aligned}$$

Finalmente, podemos calcular a distribuição de singletos no estado fundamental. Quando $\Omega \rightarrow \Omega - d\Omega$, o n\u00famero de singletos de tamanho entre l e $l + dl$ que s\u00e3o formados \u00e9 igual a

$$dN_s(\Omega) dl = N_\Omega P(J = \Omega, l) d\Omega dl$$

(note que, integrando em l e Ω , $\int dN_s dl = L_0/2$), ou seja,

$$dN_s(\Omega) dl = L_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} 4\pi^2 n^2 \exp\{-n^2 \pi^2 l / (a(\Gamma - \Gamma_0))^2\}}{a^2 (1 + \vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0))^2 (\Gamma - \Gamma_0)^3} d\Gamma dl.$$

Integrando sobre todas as escalas de energia, o n\u00famero total de singletos de tamanho entre l e $l + dl$, $N_{sing}(l) = \int dN_s$, formados no estado fundamental \u00e9

$$\begin{aligned}
N_{sing}(l) &= L_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} 4\pi^2 n^2}{a^2} \int_{\Gamma_0}^{\infty} \frac{\exp\{-n^2 \pi^2 l / (a(\Gamma - \Gamma_0))^2\}}{(1 + \vartheta_0(\Gamma - \Gamma_0))^2 (\Gamma - \Gamma_0)^3} d\Gamma, \\
&= L_0 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} 4\pi^2 n^2}{a^2} \times \frac{a^4}{2\vartheta_0^2 n^4 \pi^4 l} \times f(l, n), \\
&\approx L_0 \frac{2a^2}{\vartheta_0^2 l^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{\pi^2 n^2}, \\
&= L_0 \frac{a^2}{6\vartheta_0^2 l^2},
\end{aligned} \tag{6.17}$$

onde

$$f(l, n) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\epsilon}}{\left(\frac{a}{\vartheta_0 n \pi} + \sqrt{\frac{l}{\epsilon}}\right)^2} d\epsilon = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\epsilon}}{\left(\frac{\sqrt{2\bar{l}_0}}{n\pi} + \sqrt{\frac{l}{\epsilon}}\right)^2} d\epsilon,$$

obtida a partir da mudança de variável $\epsilon = n^2 l / (a(\Gamma - \Gamma_0))^2$, e entre a segunda e a terceira igualdades, usamos que

$$\lim_{l \rightarrow \infty} f(l, n) = \frac{1}{l} \int_0^{\infty} \epsilon e^{-\epsilon} d\epsilon = \frac{1}{l}.$$

Dividindo N_{sing} pelo número total de singletos, $L_0/2$, e usando que $2\vartheta_0^2 \bar{l}_0 = a^2$, encontramos que a probabilidade de encontrar um singlete de tamanho entre l e $l + dl$ é, para l grande, igual a

$$Pr(l) dl = \frac{2\bar{l}_0}{3l^2} dl, \tag{6.18}$$

que é *universal*, ou seja, *não depende da desordem inicial*.

A função de correlação média é então dada pelo número total de singletos formados na distância l , $N_{sing}(l)$, multiplicado por $-3/4$ e dividido pelo número total de spins L_0 , ou seja,

$$C^{univ}(l) = \begin{cases} -(2l/\bar{l}_0)^{-2}, & \text{se } l/\bar{l}_0 \text{ for ímpar,} \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \tag{6.19}$$

onde devemos identificar $dl = \bar{l}_0$ e, como os singletos só se formam a distâncias múltiplos ímpares de \bar{l}_0 , i. e., $\bar{l}_0, 3\bar{l}_0, 5\bar{l}_0, \dots$, a correlação a distâncias pares *deve ser zero*.

Note que $N_{sing}(l)$ (ver eq. (6.17)) é independente da desordem inicial *em todas as escalas de comprimento* (lembre-se que $a/\vartheta_0 = \sqrt{2}$, uma vez que $\bar{l}_0 = 1$ é o parâmetro de rede), ou seja, em sistemas cuja distribuição de acoplamentos inicial é do tipo lei de potência ou polinomial (ver eq. (6.9)) a função correlação será independente da desordem

inicial. Como todas as distribuições renormalizam para a mesma distribuição universal de ponto fixo, o limite $l \rightarrow \infty$ de $C(l)$, eq. (6.19), *deve ser universal*.

6.1.3 Simulações numéricas

Devemos agora calcular a função de correlação média numericamente e confrontar com o resultado da eq. (6.19). Para tal, calculamos a função de correlação média exatamente. Consideramos a cadeia XX, dada pelo hamiltoniano (6.1), com $\Delta_i = 0, \forall i$. Neste caso, podemos através de uma transformação de Wigner-Jordan (ver refs. [LSM 1961, Henelius 1998]) mapear o sistema em um problema de férmions sem spin não interagentes. Este problema é de simples solução numérica, pois deve-se diagonalizar uma matriz tridiagonal cíclica (se consideramos condições periódicas de contorno), e para determinar as funções de correlação, deve-se calcular o determinante de uma matriz. Tal tarefa é realizada com o auxílio de sub-rotinas padrão de álgebra linear. Para o nosso estudo numérico, consideramos cadeias de tamanho $L_0 = 4 \times 10^3$, com condições periódicas de contorno e as seguintes características de desordem. Todos os spins estão inicialmente ordenados na cadeia com parâmetro de rede igual a $l_0 = 1$. A distribuição de acoplamentos é tal que estes estão distribuídos de acordo com $J^{-\alpha}$, com $\alpha < 1$, e entre J_{min} e $J_{max} = 1$ (dessa forma $\Omega_0 = 1$). As cadeias estudadas são: Cadeia A: $J_{min} = 0,5$ e $\alpha = 0$. Cadeia B: $J_{min} = 0$ e $\alpha = -2$. Cadeia C: $J_{min} = 0$ e $\alpha = 0$. Cadeia D: $J_{min} = 0$ e $\alpha = 0,3$. As cadeias A e B são inicialmente pouco desordenadas, e as demais bastante desordenadas. Os dados foram gerados através da média de 100 realizações de desordem. A barra de erro estatístico é obtida da seguinte maneira. Para cada realização de desordem, calcula-se a função de correlação média para uma dada distância tomando a média sobre os L_0 pares de spins existentes separados por essa distância. A barra de erro é finalmente obtida calculando-se o desvio padrão desse valor sobre as 100 realizações de desordem.

A fig. 6.1(a), mostra a função de correlação média longitudinal para as 4 cadeias em questão. Note que os dados, dentro do erro estatístico, se colapsam em acordo com a nossa proposta de universalidade. Na fig. 6.1(b), mostramos os dados das cadeias A e B (por apresentarem as menores flutuações estatísticas) na região onde podemos ver o “crossover” do regime limpo para o regime desordenado. De maneira inequívoca, mostramos que a nossa previsão da função de correlação, eq. (6.1), fita muito bem os dados exatos. Note que, em torno de $r = 10^{1,5}$, a barra de erro estatístico exclui completamente a previsão do

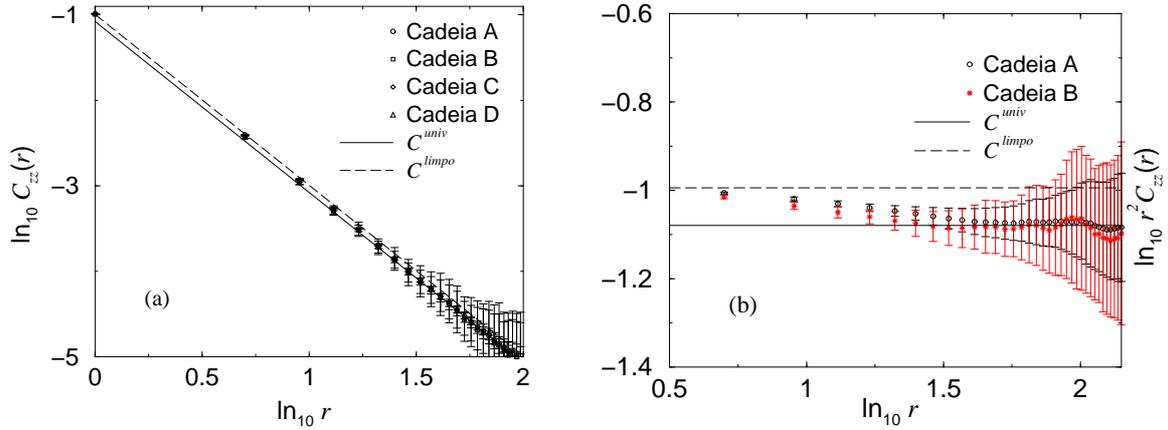


Figura 6.1: (a) Função de correlação média longitudinal, C_{zz} , em função da distância r . (b) Amplificação da figura (a) para os dados das cadeias A e B. A curva contínua C^{univ} é $1/3$ da correlação média universal proposta na eq. (6.19), e a curva pontilhada C^{limpo} é a previsão teórica, eq. (6.20), para o sistema limpo.

sistema limpo. Esta é dada na ref. [LSM 1961], e é igual a

$$C^{limpo}(r) = \langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle = \begin{cases} -(\pi r)^{-2}, & \text{se } r \text{ for ímpar,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.20)$$

Na literatura, ver ref. [Henelius 1998], aceita-se a correlação média longitudinal permanece inalterada tanto na fase limpa quanto na fase dos singletos aleatórios, uma vez que em ambas as fases o expoente de decaimento é igual a 2. Aqui, testemunhamos um “crossover” entre os dois regimes determinado pela diferença de amplitude existente entre eles. É interessante notar que tal “crossover” implica que, em uma determinada região, o expoente de decaimento da função correlação tem de ser maior que 2. Talvez esse seja o motivo pelo qual o consenso geral entre os pesquisadores é aquele citado na ref. [Henelius 1998]. Voltaremos a esse ponto mais tarde.

Agora iremos relacionar a função de correlação aqui calculada com a entropia de emaranhamento do sistema.

6.2 A função de correlação e a entropia de emaranhamento

Nesta seção, relacionamos a entropia de emaranhamento com a função de correlação média spin-spin calculada na seção anterior.

O emaranhamento de um estado quântico puro $|\phi\rangle$ com respeito à partição em 2 sub-sistemas A e B distintos e complementares é igual à entropia da matriz densidade reduzida de um dos sub-sistemas,

$$S = -\text{tr}\rho_A \log_2 \rho_A = -\text{tr}\rho_B \log_2 \rho_B,$$

onde a matriz densidade reduzida ρ_A para o sub-sistema A é obtida traçando, na matriz densidade $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$, os graus de liberdade referentes ao sub-sistema B ,

$$\rho_A = \sum_i \langle\phi_B^i|\rho|\phi_B^i\rangle,$$

onde $\{|\phi_B^i\rangle\}$ é uma base completa do sub-espço de Hilbert dos graus de liberdade do sub-sistema B .

Primeiramente, considere uma cadeia de spins-1/2 antiferromagnética desordenada. No limite de longas distâncias, o grupo de renormalização para desordem grande é assintoticamente exato e neste regime o estado fundamental desta cadeia é uma coleção de singletos de spins independentes e aleatórios. Tais singletos são pares de spins formados em distâncias arbitrariamente grandes, como ilustrado na fig. 6.2. Dessa forma, podemos escrever o estado fundamental da seguinte maneira:

$$|\phi\rangle = \bigotimes_{i=1}^{L_0/2} |s_i\rangle, \quad (6.21)$$

onde $L_0/2$ é o número de singletos existentes no estado fundamental e $|s_i\rangle$ é o estado que representa o i -ésimo singlete.

Note que o emaranhamento de um spin-1/2 em um singlete com outro spin-1/2 é igual a $s = 1$, que é a entropia dos dois estados de spin com o seu par traçado (ver apêndice I). Como o estado fundamental da cadeia é formado por uma coleção de singletos independentes, o emaranhamento de um sub-sistema de tamanho L (a caixa indicada na fig. 6.2) com o resto da cadeia será igual ao número de singletos que cruzam a fronteira do

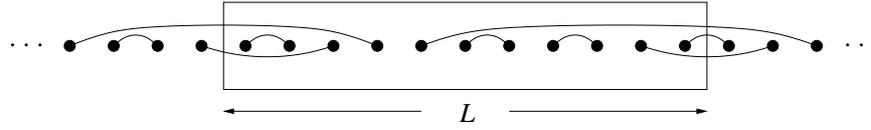


Figura 6.2: Estado fundamental da cadeia desordenada de spins-1/2. Os singletos estão indicados pelas linhas que os conectam. No caso, o emaranhamento do sub-sistema indicado pela caixa de tamanho L é igual a 5, devido aos 2 acoplamentos que cruzam o lado esquerdo da caixa e aos 3 que cruzam o direito (ver texto).

sub-sistema, i. e., um dos spins do par está dentro da região delimitada pela fronteira do sub-sistema enquanto o outro está fora. No exemplo ilustrado na fig. 6.2, o emaranhamento bi-partite da região delimitada pela caixa com o resto da cadeia é igual a 5. Dois pares de spins cruzam a fronteira esquerda da mesma enquanto três pares de spins cruzam a fronteira direita.

Na estrutura do grupo de renormalização, baseada nos procedimentos de dizimação, calcular o número de singletos que se formam sobre um determinado ponto é equivalente a calcular quantas dizimações ocorreram sobre aquele acoplamento. Com base neste raciocínio, Refael e Moore calcularam a entropia de emaranhamento de um sub-sistema de tamanho L [Refael 2004]. Por completeza das idéias para o leitor, refaremos a seguir esse cálculo para logo após reeduzir a entropia de acordo com a nossa proposta onde a relacionamos com a função de correlação.

6.2.1 Cálculo da entropia de um sub-sistema segundo Refael e Moore

Segundo Refael e Moore [Refael 2004], o número de dizimações que ocorreram sobre um determinado ponto é igual ao número de vezes que um determinado acoplamento é dizimado. Deixe-nos explicar melhor tal afirmação. Suponha que um acoplamento J_i é dizimado sobre um determinado ponto (por exemplo, o ponto é a fronteira direita da caixa na fig. 6.2 e o acoplamento é aquele de menor comprimento que a cruza), sendo assim, surge um novo acoplamento

$$\tilde{J} = \frac{J_{i-1}J_{i+1}}{2J_i},$$

no lugar de J_i que foi dizimado (aquele de comprimento igual a 3 com a “barriga” voltada para baixo). Se este novo acoplamento \tilde{J} for novamente dizimado, dizemos que o mesmo acoplamento foi dizimado 2 vezes, e assim por diante. No caso da fig. 6.2, o acoplamento em

questão foi dizimado 3 vezes. Com base nesse raciocínio, o número médio de dizimações, \bar{N} , ocorridas sobre um determinado ponto é proporcional à probabilidade do mesmo ser dizimado, logo,

$$d\bar{N} = d\Gamma \rho(\zeta = 0; \Gamma) = \frac{d\Gamma}{\Gamma}, \quad (6.22)$$

o que nos leva a $\bar{N} = \ln \Gamma$, onde $\zeta = \ln(\Omega/J)$ e $\Gamma = -\ln \Omega$ são as variáveis de acoplamento e energia usuais em escala logarítmica, e

$$\rho(\zeta; \Gamma) = \frac{1}{\Gamma} \exp\{-\zeta/\Gamma\},$$

é a distribuição de ponto fixo de ζ na escala de energia Γ (ver seção 2.1 e apêndice D).

Portanto a entropia de emaranhamento de um sistema de tamanho L deve escalar com

$$S \sim 2\bar{N} = 2 \ln \sqrt{L} + \text{cte} = \ln L + \text{cte}, \quad (6.23)$$

onde o fator 2 vem do fato de que o sistema possui duas fronteiras. O fato de que os acoplamentos que contribuem para o emaranhamento são aqueles menores que o tamanho L do sistema é implementado através da relação entre as escalas de energia e de comprimento (ver seção 2.1),

$$\Gamma \sim L^\psi,$$

com $\psi = 1/2$. O termo constante na eq. (6.23) depende da desordem inicial do sistema.

Refael e Moore argumentaram que a eq. (6.23) só indica como a entropia escala com o tamanho do sub-sistema. Para calcular o fator numérico correto que deve multiplicar $\ln L$ deve-se levar em conta a história do acoplamento, ou seja, um acoplamento que acabou de ser dizimado tem poucas chances de ser dizimado logo em seguida. E tal consideração não é levada em conta na eq (6.22).

Para levar em conta a história do acoplamento em questão, Refael e Moore acompanharam como a distribuição deste varia ao longo do procedimento de renormalização.

Seja $Q_{\Gamma_0}(\zeta)$ a distribuição do acoplamento em questão assim que este foi dizimado na escala de energia Γ_0 . Então,

$$Q_{\Gamma_0}(\zeta) = \int d\zeta_1 d\zeta_3 \rho(\zeta_1) \rho(\zeta_3) \delta(\zeta - \zeta_1 - \zeta_3) = \frac{\zeta}{\Gamma_0^2} e^{-\zeta/\Gamma_0} = \frac{\zeta}{\Gamma_0} \rho(\zeta; \Gamma_0). \quad (6.24)$$

Em seguida devemos interpretar que $\int Q_\Gamma(\zeta) d\zeta = p_\Gamma$ é a probabilidade do acoplamento ζ não ser dizimado até a escala de energia Γ . Desse modo a equação de fluxo de Q_Γ será

dada por [Refael 2004]

$$\frac{d}{d\Gamma} Q_\Gamma = \frac{\partial}{\partial \zeta} Q_\Gamma - 2Q_\Gamma \rho_0 + 2\rho_0 Q_\Gamma \overset{\zeta}{\otimes} \rho, \quad (6.25)$$

onde $\rho_0 = \rho(0; \Gamma)$ e $Q \overset{\zeta}{\otimes} P = \int d\zeta_1 d\zeta_3 Q(\zeta_1; \Gamma) \rho(\zeta_3; \Gamma) \delta(\zeta - \zeta_1 - \zeta_3)$. O primeiro termo do lado direito da eq (6.25) é devido à mudança de ζ quando Γ muda, o segundo e o terceiro levam em conta a renormalização de ζ quando um de seus acoplamentos vizinhos é dizimado. Note que esta equação não leva em conta o fato de ζ ser dizimado. E por isso deve-se interpretar p_Γ como a probabilidade de tal acoplamento não ser dizimado até a escala de energia Γ . Note que inicialmente Q vai a zero quando $\zeta \rightarrow 0$ (ver eq. (6.24)). Isto reflete o fato de que a probabilidade de um acoplamento ser dizimado logo após uma dizimação é nula. Assim que o procedimento do grupo de renormalização é iterado, este deve ganhar força em magnitude, e portando, Q deve se aproximar de ρ , por isso Refael e Moore usaram o “Ansatz”

$$Q(\zeta) = \left(a_\Gamma + b_\Gamma \frac{\zeta}{\Gamma} \right) \rho(\zeta), \quad (6.26)$$

como solução da eq. (6.25). Substituindo a eq (6.26) na eq. (6.25), encontramos que a_Γ e b_Γ devem satisfazer às seguintes equações,

$$\frac{d}{dl} a_\Gamma = b_\Gamma - 2a_\Gamma, \quad (6.27)$$

$$\frac{d}{dl} b_\Gamma = -b_\Gamma + a_\Gamma, \quad (6.28)$$

onde $l = \ln(\Gamma/\Gamma_0)$, sujeitas as condições iniciais de $a_{\Gamma_0} = 0$ e $b_{\Gamma_0} = 1$.

Em seguida, devemos calcular o “tempo” médio de formação de singletos sobre a fronteira do sub-sistema, i. e., devemos calcular o “tempo” médio entre duas dizimações consecutivas $\langle l \rangle$ do acoplamento em questão [Refael 2004],

$$\langle l \rangle = \int dp_\Gamma l = \int_0^\infty dl a_\Gamma l = 3.,$$

onde usa-se a solução das eqs (6.27) e (6.28), $a_\Gamma = (e^{-r-l} - e^{-r+l})/\sqrt{5}$, com $r_\pm = (3 \pm \sqrt{5})/2$.

Dessa maneira,

$$\bar{N} = \frac{\ln \Gamma}{\langle l \rangle} = \frac{1}{3} \ln L,$$

o que implica

$$S = \frac{\ln 2}{3} \log_2 L + \text{cte.} \quad (6.29)$$

Refael e Moore então compararam a entropia descrita na eq. (6.29) com a entropia de um sistema crítico invariante conforme derivada por Holzhey *et al.* [Holzhey 1994],

$$S = \frac{c + \bar{c}}{6} \log_2 L + \text{cte.},$$

onde, em teoria de campos conforme, c e \bar{c} são as cargas centrais holomórfica e anti-holomórfica, respectivamente. Dessa forma, calcularam a carga central efetiva da cadeia de spins-1/2 antiferromagnética desordenada. No caso $c = \bar{c}$, o que implica em

$$c_{\text{Heisenberg}} = \ln 2. \quad (6.30)$$

Refael e Moore ainda repetiram o mesmo cálculo para a cadeia de Ising no campo transversal no ponto crítico e encontraram que

$$c_{\text{Ising}} = \frac{1}{2} \ln 2. \quad (6.31)$$

As cargas centrais “efetivas” dos sistemas desordenados em questão, eqs. (6.30) e (6.31), são iguais às cargas centrais dos respectivos sistemas limpos multiplicadas por $\ln 2$. Refael e Moore então conjecturaram que a carga central efetiva de todo sistema crítico desordenado unidimensional deve ser igual a carga central do sistema limpo multiplicada por um número determinado pelo fluxo do GR que leva o sistema do ponto fixo do sistema limpo para o desordenado.

Isto resume brevemente os resultados descritos na ref. [Refael 2002]. A seguir, mostraremos um modo alternativo de calcular a entropia para tais sistemas.

6.2.2 Cálculo alternativo da entropia de emaranhamento

A nossa idéia de como calcular a entropia de emaranhamento é a seguinte. A função de correlação média (ver eq. (6.19)) nos diz exatamente como é a distribuição de comprimento dos singletos formados no estado fundamental. Dessa forma, podemos calcular o número médio de acoplamentos que cruzam a fronteira de um determinado sub-sistema de tamanho L . Isto é feito da seguinte maneira. A Fig. 6.2 ilustra o estado fundamental da cadeia de Heisenberg desordenada com um sub-sistema, digamos A_1 , de tamanho $L_{A_1} = 11$. No caso,

a entropia de A_1 é igual a $S_{A_1} = 5$. Considere agora um sub-sistema A_2 de mesmo tamanho, porém transladado de um parâmetro de rede para a direita. A entropia deste sistema é igual a $S_{A_2} = 5$. Da mesma maneira, um sub-sistema A_3 transladado de um parâmetro de rede à direita de A_2 apresenta $S_{A_3} = 3$, e assim sucessivamente. Dessa maneira, a entropia média de um sub-sistema de tamanho L_A será dada por

$$S_A = \frac{1}{L_0} \sum_{i=1}^{L_0} S_{A_i}, \quad (6.32)$$

onde existem L_0 sub-sistemas diferentes e de mesmo tamanho se supomos condições periódicas de contorno.

A quantidade $\sum S_{A_i}$ na eq. (6.32) pode ser calculada de outra maneira. Primeiramente, vamos nos concentrar em como apenas um singleto formado a uma distância L_{sing} contribui para a entropia média de um sub-sistema de tamanho L . Se $L < L_{sing}$, existem L sub-sistemas diferentes de tamanho L que têm uma de suas fronteiras cruzadas pelo acoplamento do singleto (ver fig. 6.3(a)). Como o sub-sistema possui duas fronteiras, então concluimos que um singleto de tamanho L_{sing} contribui com $2s \times L$ para a entropia média de um sub-sistema de tamanho $L < L_{sing}$, onde $s = 1$, é a entropia de um par de singletos sendo que um deles foi traçado (ver apêndice I). No caso oposto, $L \geq L_{sing}$, existem $2 \times L_{sing}$ sistemas diferentes de tamanho L que ganham a contribuição de s para a entropia média (ver fig. 6.3(b)).

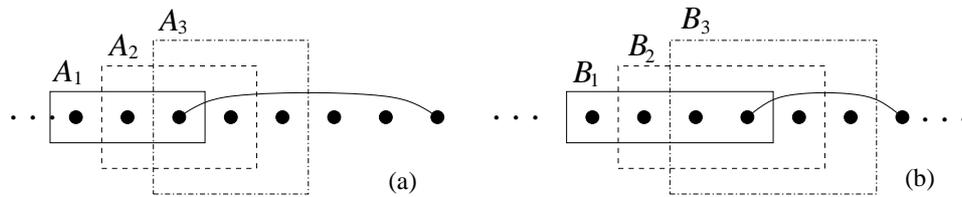


Figura 6.3: Esquema de contagem de entropia. (a) Quando o tamanho do singleto, no caso $L_{sing} = 5$, é maior que o do sub-sistema, no caso $L_A = 3$, existem L_A sub-sistemas diferentes cujas fronteiras direitas são cruzadas pelo singleto. (b) Quando $L_{sing} \leq L_B$, no caso $L_{sing} = 3$ e $L_B = 4$, existem L_{sing} sub-sistemas distintos de tamanho L_B que têm uma de suas fronteiras cruzadas pelo singleto.

Dessa forma, a contribuição de um singleto para a entropia média se resume a

$$S_{sing} = 2s \times \begin{cases} L, & \text{se } L \leq L_{sing}, \\ L_{sing}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.33)$$

Uma vez conhecido o número de singletos de tamanho L_{sing} , $N_s(L_{sing})$, podemos calcular a quantidade

$$\sum_{i=1}^{L_0} S_{A_i} = 2s \left(\sum_{i=1}^L N_s(i) i + L \sum_{i=L+1}^{L_0/2} N_s(i) \right), \quad (6.34)$$

onde, como estamos usando condições periódicas de contorno, o maior singlete formado tem tamanho $L_0/2$.

A distribuição de singletos $N_s(i)$ está dada pela eq. (6.17), que possui comportamento assintótico universal igual a

$$N_s(i) = -\frac{4L_0}{3} C^{univ}(i),$$

com $C^{univ}(i) = c/i^2$ e $c = 1/4$, como discutimos anteriormente (ver eq. (6.19)).¹

Sendo assim, o número de singletos de tamanho L_{sing} , $N_s(L_{sing})$, deve ser dado por

$$N_s(i) = \frac{4L_0}{3} \times \begin{cases} f(i), & \text{se } i < L_c, \\ ci^{-2}, & \text{se } i \geq L_c, \end{cases} \quad (6.35)$$

onde $f(i)$ é uma função não universal que dá a dependência do número de singletos formados até uma escala de comprimento L_c , sendo L_c a escala de comprimento além da qual o transiente do fluxo de renormalização (que desvia a função correlação de sua dependência $\sim r^{-2}$) vai a zero. Note ainda que $f(i)$ e L_c devem satisfazer a condição de normalização

$$\frac{1}{2} = \frac{4}{3} \left[\sum_{i=1}^{L_c} f(i) + \sum_{i=\frac{L_c+1}{2}}^{\infty} \frac{c}{(2i-1)^2} \right]^{-1}. \quad (6.36)$$

Logo, para escalas de comprimento muito maiores que L_c , substituindo a eq. (6.35) em (6.34), a entropia torna-se

$$S(L) = \frac{8sc}{3} \left(\sum_{i=\frac{L_c+1}{2}}^{\frac{L+1}{2}} \frac{1}{2i-1} + L \sum_{i=\frac{L+3}{2}}^{\infty} \frac{1}{(2i-1)^2} \right) + \text{cte},$$

onde

$$\text{cte} = \frac{8s}{3} \sum_{i=1}^{L_c} if(i),$$

¹Note que estamos usando que $\bar{l}_0 = 1$.

é uma constante não universal. No limite L grande,

$$S(L) = \frac{\tilde{c}}{3} \log_2 L + \text{cte}', \quad (6.37)$$

onde usamos a aproximação $\sum_i \approx \int di$, o que nos leva a um carga central efetiva

$$\tilde{c} = 4sc \times \ln 2,$$

e cte' é uma constante não universal.

A entropia calculada em (6.37) tem a mesma dependência que aquela calculada por Refael e Moore (ver eq. (6.29)), porém relacionamos a entropia com a função correlação. Se \tilde{c} é uma quantidade universal, como alegam Refael e Moore, então, se vale a hipótese usada pelos autores de que $s = 1$, c também deve ser universal. Note que o valor $c = 1/4$ implica em uma carga central efetiva igual a $\ln 2$, em perfeito acordo com os cálculos de Refael e Moore.

6.3 Discussões pertinentes e conclusões

Iremos, nesta seção, discutir possíveis fontes de não universalidade nas amplitudes da função de correlação e da entropia de emaranhamento e em seguida encerrar esse capítulo resumindo nossas conclusões preliminares.

Um problema ainda a ser entendido se refere à função de correlação transversal no modelo XX. Esta, em uma primeira vista como estudado nas refs. [Henelius 1998, Lafflorencie 2003, Lafflorencie 2004], não têm amplitude universal e este resultado está em desacordo com a previsão do grupo de renormalização, eq. (6.19). A primeira atitude que devemos tomar é procurar por erros na dedução de $C^{univ}(l)$ relacionados ao fluxo de $P(J, l; \Omega)$. Para tal calculamos a diferença relativa entre a função de correlação calculada numericamente pelo método do grupo de renormalização e a função de correlação proposta na eq. (6.19),

$$D(r) = \frac{C^{num}(r) - C^{univ}(r)}{C^{univ}(r)}. \quad (6.38)$$

A função correlação $C^{num}(r)$ é calculada da seguinte maneira. Ao dizimar completamente uma cadeia de spins-1/2 (ver seção 2.1), contamos o número total de pares de singletos formados a uma dada distância r , dividindo esse número por L_0 e multiplicando por 3/4, encontramos $C^{num}(r)$.

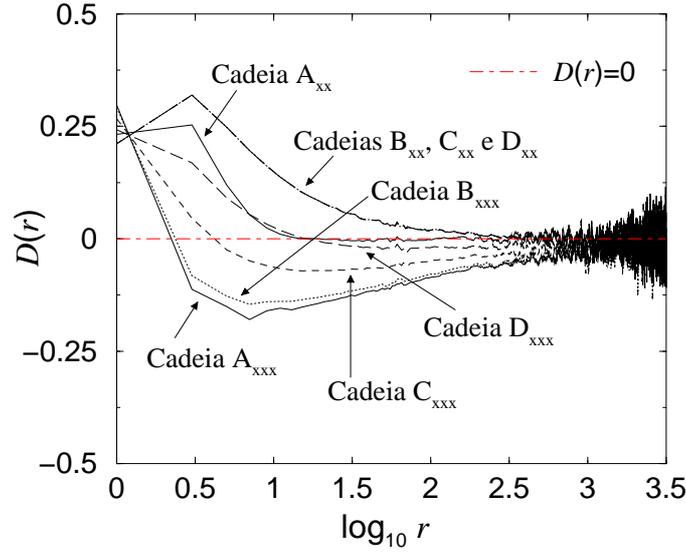


Figura 6.4: Diferença relativa entre a função correlação calculada numericamente e a função correlação universal (ver eq. (6.38)). Todas as curvas tendem a zero no limite $r \rightarrow \infty$. O sub-índice que denota a cadeia diz respeito ao modelo em consideração, ou o XX ou o isotrópico XXX.

A fig. 6.4 mostra a diferença relativa $D(r)$ em função da distância r para as cadeias em estudo (ver sub-seção 6.1.3). Porém agora consideramos cadeias de tamanho $L_0 = 10^7$, e os dados numéricos são obtidos a partir da média sobre 150 realizações de desordem. Além do modelo XX em questão, consideramos a cadeia isotrópica (denotados pelos sub-índices XX e XXX, respectivamente). A diferença se dá por um fator de $1/2$ na relação de recorrência para o acoplamento renormalizado (ver ref. [Fisher 1994]). Como havíamos previsto, no limite $r \rightarrow \infty$ a função correlação se torna universal. Isto exclui a possibilidade de uma derivação equivocada dentro da estrutura do grupo de renormalização. Devemos então procurar por possíveis hipóteses inválidas na dedução da função correlação. Mas antes de entrarmos em tal discussão, queremos discutir um pouco mais esses resultados. Note que há um incrível colapso da função de correlação para as cadeias B, C e D no modelo XX. Como era previsto pela eq. (6.17), para distribuições iniciais pertencentes à família da distribuição de ponto fixo (ver “Ansatz” (6.5)), a função correlação não depende da desordem inicial em nenhuma escala de comprimento, só do fluxo de renormalização em si. Note que as mesmas cadeias no modelo XXX convergem mais lentamente. Na verdade, devido às grandes flutuações estatísticas, os dados aqui só indicam que elas convergem para a função correlação universal. Esta convergência mais lenta deve-se ao pré-fator $1/2$ na

relação de recorrência de renormalização dos acoplamentos. Este provoca um transiente no fluxo de renormalização que irá a zero somente no limite $\Gamma \rightarrow \infty$, ou seja, o transiente decai logarithmicamente com Ω . Surpreendentemente, a cadeia A no modelo XX converge rapidamente para a função de correlação universal. Voltemos agora nossa atenção para procurar possíveis hipóteses inválidas na dedução de $C^{univ}(l)$, eq. (6.19).

A única hipótese que deve ser questionada é a de que o estado fundamental é constituído por uma coleção de singletos independentes

$$|\phi\rangle = \bigotimes_{i=1}^{L_0/2} |s_i\rangle, \quad (6.39)$$

onde $|s_i\rangle$ é o i -ésimo singleto formado no estado fundamental. Este resultado é obtido em ordem zero de teoria de perturbação. Como para longas distâncias a correlação típica,

$$C_{tip}(r) \sim \exp\{-\sqrt{r}\},$$

cai rapidamente (ver seção 2.1), não devemos esperar flutuações nos singletos devido à presença de spins distantes. As flutuações devem ser originadas por spins próximos aos spins do par que foram dizimados nos primeiros estágios do fluxo de renormalização quando a desordem ainda era pequena. Como Henelius e Girvin apontaram, as amplitudes das correlações transversais e longitudinais são diferentes devido às flutuações residuais das ligações de valência (“valence bonds” no original) [Henelius 1998]. Este argumento não só poria em cheque a proposta de universalidade da função correlação (6.19), mas também a universalidade da carga central “efetiva”, eq. (6.29), uma vez que a dedução de Refael e Moore usa a hipótese (6.39) de um estado fundamental composto por singletos desacoplados [Refael 2004]. Recentemente, Laflorencie calculou numericamente a entropia de emaranhamento para as cadeias XX e confirmou o resultado universal de Refael e Moore [Laflorencie, 2005].

Supor então que os spins vizinhos são os responsáveis pela flutuação dos singletos é de grande coerência do ponto de vista intuitivo. Em pequenas escalas de comprimento seria como se o sistema fosse limpo, e as correlações seriam mediadas pelo mecanismo de ondas de spin. Entretanto, esse cenário não é compatível, pelo menos à primeira vista, com o resultado de Laflorencie [Laflorencie, 2005], e nem com o resultado apresentado por nós na fig. 6.1. Note que se aceitamos flutuações no singleto, a entropia desses pares s não seria mais igual a 1. Seria não universal e, conforme a eq. (6.37), a “carga efetiva” não seria

universal. O mesmo raciocínio vale para a função de correlação.

Outra característica que devemos apontar da função de correlação transversal, C^{xx} , é que esta não é nula para spins separados por distâncias pares. Isto é reflexo de que o singleto sofre flutuações. Entretanto, há uma notável diferença, no limite de r grande, entre a C^{xx} calculada em distâncias ímpares e pares (ver fig. 6.5). Como pode-se notar, a função correlação transversal para distâncias ímpares é maior que aquela para distâncias pares. Mais interessantemente, a diferença é universal, ou seja, a diferença de amplitudes entre elas é igual à amplitude universal proposta na eq. (6.19). Aqui torna-se claro que a questão de universalidade da função de correlação transversal está relacionada com a característica das correlações entre spins separados por distâncias pares serem nulas ou não.

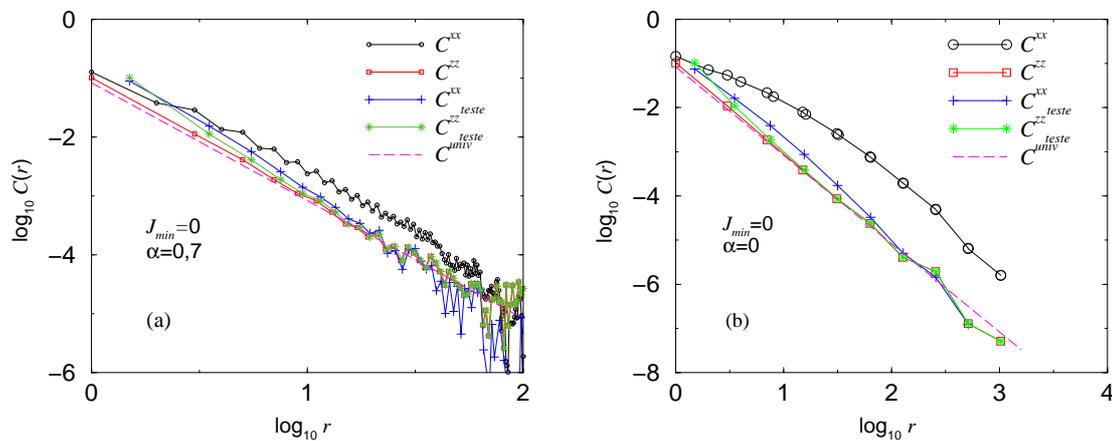


Figura 6.5: Função de correlação, transversal e longitudinal, usual e a proposta teste (ver texto). A linha tracejada é a função de correlação universal calculada na eq. (6.19). Os dados foram gerados por diagonalização exata do modelo XX com a média sobre 100 realizações de desordem para uma cadeia de tamanho (a) $L_0 = 300$, com $J_{min} = 0$ e $\alpha = 0,7$ e (b) $L_0 = 3.000$, com $J_{min} = 0$ e $\alpha = 0$. As linhas que conectam os dados são meramente guia para os olhos.

Descreveremos agora outras características interessantes da função de correlação que são observadas. Suponha que os spins S_1 e S_{1000} são dois spins distantes que se correlacionam em um estado de singleto na estrutura de dizimações do GR. Calculando exatamente a correlação longitudinal, C^{zz} , entre esses spins, verificamos que esta não é igual a $-1/4$ como prevê a hipótese (6.39), entretanto é próxima deste valor. Calculando C^{zz} entre os spin S_1 e os primeiros vizinhos de S_{1000} , S_{999} e S_{1001} , verifica-se que esta é identicamente

nula.² Calculando ainda a C^{zz} entre S_1 e os segundos vizinhos de S_{1000} , S_{998} e S_{1002} , verificamos que estas são muito próximas entre si e pequenas. Além disso, somando-as com a C^{zz} referente aos spins S_1 e S_{1000} , o valor fica muito mais próximo de $-1/4$. Somando as correlações longitudinais entre S_1 e os vizinhos próximos de S_{1000} obtemos metade da diferença entre $-1/4$ e a C^{zz} entre os spins S_1 e S_{1000} . A outra metade é obtida quando somamos a C^{zz} entre S_{1000} e os spins vizinhos de S_1 .

Estes resultados nos levam então a conjecturar que, apesar do singleto ser perturbado, o aglomerado de spins próximos ao spin S_1 se comporta como um spin-1/2 efetivo acoplado em um singleto com o aglomerado de spins formados pelos spins próximos a S_{1000} .³ Como a C^{zz} para distâncias pares é sempre nula, na média a correlação transversal deve seguir a proposta universal da eq. (6.19). O mesmo não acontece para a C^{xx} . Conjecturando que a correlação se “distribui” entre os poucos spins que formam os aglomerados, e como a C^{xx} entre spins que distam entre si por distâncias pares é *positiva*, para que a correlação total entre os aglomerados de spins seja igual a $-1/4$, a soma das correlações entre os spins dos aglomerados que distam entre si por distâncias ímpares deve ser, necessariamente, maior que $1/4$ (em módulo), daí a amplitude da mesma ser não-universal.

Para testar nossa conjectura de “distribuição” da correlação, propomos uma função de correlação teste igual a

$$C_{teste}(2r + \frac{1}{2}) = C(2r + 1) + C(2r). \quad (6.40)$$

Note que a correlação teste longitudinal, $C_{teste}^{zz}(r) = C^{zz}(r + 1/2)$, tende a $C^{zz}(r)$ no limite $r \rightarrow \infty$, uma vez que $C^{zz}(2r) = 0$. Esta função correlação teste (6.40) é uma tentativa de medir a correlação que se distribui em um aglomerado de spin. Para curtas distâncias ela não deve ser uma boa medida da função de correlação, entretanto, se esse aglomerado for finito e os raros pares de singletos forem realmente responsáveis pela função de correlação média, C_{teste} deve ser uma boa medida da correlação para longas distâncias. Ela ainda tem a vantagem de comparar a correlação somente entre primeiros vizinhos, excluindo assim uma possível interpretação de reescalonamento global da escala de comprimento.

Na fig. 6.5(a), calculamos exatamente as funções de correlação transversais e longitudinais, usual e teste, para uma cadeia XX de tamanho $L_0 = 300$ cuja distribuição de

²Por alguma simetria do modelo XX, $C^{zz}(l) = 0$, para l par, tanto no sistema limpo quanto no desordenado (ver ref. [LSM 1961]).

³Este aglomerado é geralmente constituído pelos 5 primeiros vizinhos dos spins em questão, mas este número varia conforme a desordem inicial da cadeia. Quanto maior for a desordem inicial do sistema, menor é o tamanho do aglomerado.

acoplamentos é extremamente desordenada. Esta é do tipo lei de potência, $\sim J^{-\alpha}$, com $\alpha = 0,7$, e os acoplamentos assumem valores entre $J_{min} = 0$ e 1. Os dados são gerados com a média sobre 100 realizações de desordem e, apesar da grande flutuação estatística, a nossa conjectura é verificada. O mesmo vale para a fig. 6.5(b), onde a cadeia é maior, $L_0 = 3.000$, e a desordem inicial é moderada, $J_{min} = 0$ e $\alpha = 0$. A C_{teste} (tanto a transversal quanto a logitudinal) seguem a correlação universal proposta na eq. (6.19).

Iremos agora relacionar esse cenário de “correlação distribuída” com a entropia de emaranhamento. Sendo as flutuações nos singletos localizadas, podemos considerar os aglomerados de spins como dois spins efetivos acoplados em um estado de singleto (agora não perturbado). Supondo que um dos aglomerados esteja totalmente dentro do sub-sistema a ser traçado enquanto o outro está totalmente fora, a entropia que devemos esperar é a entropia de dois spins-1/2 em um estado de Bell quando um deles é traçado, ou seja, $s = 1$. Dessa maneira, a operação de traçar um sub-sistema de tamanho L grande não leva em conta as flutuações do singleto provocadas em pequenas escalas de comprimento, e ao fazer a soma (6.34), os aglomerados que cruzam a fronteira do sub-sistema contribuem somente com efeitos de borda e, portanto, devem ser desprezíveis no limite $L \rightarrow \infty$, em acordo com o resultado de Refael e Moore e os cálculos de Laflorencie [Refael 2004, Laflorencie, 2005].

Capítulo 7

Conclusões

Neste trabalho, estudamos diversos sistemas interagentes de spins em baixa dimensionalidade na presença de desordem temperada. O método utilizado foi o método do grupo de renormalização para desordem forte introduzido por Ma, Dasgupta e Hu e extensamente utilizado para a obtenção da física de baixas energias em diversos sistemas de spins desordenados.

O primeiro sistema estudado foram as cadeias de spins-1/2 AF's de duas pernas e zig-zag (ver cap. 3). Devido à grande complexidade do fluxo de renormalização, o estudo foi conduzido essencialmente por simulações numéricas. Concentramos nossa atenção na estrutura topológica do sistema e a principal conclusão pode ser resumida de maneira simples. Perto do ponto fixo, as escadas de spins renormalizam para uma cadeia de spins. Esta conclusão está bem ilustrada nas figs. 3.3 e 3.7. Nos primeiros estágios do fluxo de renormalização diversos acoplamentos de longo alcance são gerados, mas à medida que nos aproximamos do ponto fixo, somente os acoplamentos entre primeiros vizinhos permanecem.

No caso da escada de duas pernas, a cadeia correspondente é uma cadeia de spins-1/2 AF dimerizada, ou seja, a distribuição dos acoplamentos ímpares é diferente da distribuição dos acoplamentos pares (ver seção 2.2). Esse sistema suporta duas fases como mostrado na fig. 3.4. Na região em que o expoente dinâmico é menor do que 1, o sistema se encontra na fase de Haldane desordenada caracterizada por um pseudo-"gap" de spin. Caso contrário, o sistema se encontra na fase de Griffiths. Em ambas as fases o sistema é dimerizado e o expoente dinâmico é não universal e dependente da desordem inicial.

No caso das escadas zig-zag, o sistema *geralmente* renormaliza para uma cadeia de spins com acoplamentos FM's e AF's descritas na seção 2.3 e o sistema se encontra na fase

dos grandes spins, caracterizada por um expoente dinâmico que, para desordem pequena e grande frustração, é universal. Nos demais casos ele é não universal (ver fig. 3.11). Somente para desordem e frustração suficientemente pequenas é que a escada renormaliza para uma cadeia de spins-1/2 AF desordenada. Neste caso, o sistema se encontra na fase universal dos singletos aleatórios (como descrito na seção 2.1).

O segundo sistema a ser estudado foram as cadeias isotrópicas AF's desordenadas de spins $SU(N)$, com $N \geq 2$. Generalizamos o método do grupo de renormalização para levar em conta dizimações de spins cuja simetria é a do grupo $SU(N)$ e a representação irredutível do operador de spin é totalmente anti-simétrica. Resolvemos analiticamente as equações de fluxo e descobrimos que tais sistemas são instáveis contra a introdução de desordem e são governados por um ponto fixo universal de desordem infinita. A fase em questão é um tipo de fase de singletos aleatórios cujos expoentes característicos só dependem do grupo de simetria envolvido.

Estudamos também a cadeia AF desordenada de spins $SU(4)$ anisotrópica. Acompanhando a anisotropia ao longo do fluxo de renormalização, caracterizamos o diagrama de fases em função de sua média e de sua desordem (ver fig. 5.13). Para discutir o diagrama de fluxo, devemos relembrar o que definimos como anisotropia. O modelo em questão pode ser visto como duas cadeias de spins-1/2 conectadas via um termo de quatro corpos com simetria $SU(2) \otimes SU(2)$ (ver eq. (5.6)). A anisotropia, Δ_i , é a razão entre o acoplamento intra-cadeia, J_i , e o acoplamento inter-cadeia, K_i . Vamos analisar o caso em que a anisotropia é uniforme, i. e., $\Delta_i = \Delta$ (conclusões análogas descrevem o caso mais geral). Se o acoplamento intra-cadeia é fraco ($\Delta < 1$), este renormaliza para zero e o sistema é governado por um ponto fixo de desordem infinita cujos expoentes característicos são os mesmos do ponto fixo isotrópico. Se $\Delta > 1$, o acoplamento inter-cadeia renormaliza para zero. Entretanto, há duas possibilidades de fluxo. Se $\Delta > 3$, as duas cadeias se desacoplam por completo e o ponto fixo de desordem infinita é aquele característico do grupo $SU(2)$. Se $1 < \Delta < 3$, apesar de $K_i \rightarrow 0$, as cadeias não se desacoplam porque aglomerados de spins com simetria $SU(4)$ são gerados nos primeiros estágios do fluxo de renormalização (enquanto Δ ainda era finito). Tais aglomerados mudam o valor dos expoentes característicos, que são dependentes da anisotropia inicial. O ponto fixo isotrópico é instável contra a introdução de anisotropia e separa os dois pontos fixos descritos acima. Todos os pontos fixos encontrados são de desordem infinita e, portanto, universais, ou seja, os expoentes característicos são independentes da desordem inicial do sistema e somente no caso em que $1 < \Delta < 3$ dependem da anisotropia.

Finalmente, estudamos a amplitude da função de correlação média da cadeia de Heisenberg AF desordenada, cujo hamiltoniano é dado pela eq. (6.1). Supondo que o estado fundamental seja uma coleção de singletos aleatórios não perturbados (ver seção 2.1), calculamos que a amplitude deve ser universal e igual a $1/4$. Além disso, ela está relacionada com a amplitude da entropia de emaranhamento (ver eq. (6.29)), que, na linguagem de teoria de campos conforme, desempenharia o papel de carga central “efetiva”. Entretanto, os singletos flutuam. Tais flutuações são responsáveis por correlações adicionais confinadas em pequenas escalas de comprimento que tornam a amplitude da função de correlação média não universal. Porém, diagonalizações exatas do modelo XX mostram que a função de correlação longitudinal tem amplitude universal e está de acordo com a nossa previsão de $1/12$. Mas a função correlação transversal continua sendo não universal. Um outro aspecto interessante que se fez presente foi o fato desta função de correlação apresentar (em módulo) magnitudes diferentes para spins afastados por distâncias ímpares e pares. Propondo uma função de correlação teste (ver eq. (6.40)) no intuito de medir tal diferença, verificamos que esta é universal e está de acordo com a nossa previsão. Isto sugere que as correlações são “compartilhadas” em aglomerados de poucos spins, ou seja, em grandes escalas de comprimento, o sistema se divide em aglomerados de spins. Tais aglomerados tem magnitude $1/2$ e se acoplam aleatoriamente em estados de singletos não perturbados. Este cenário é compatível com a universalidade da amplitude da entropia de emaranhamento verificada recentemente na literatura. Para sub-sistemas suficientemente grandes, a perturbação no singlete é meramente um efeito de borda, e portanto, negligenciável.

Encerramos finalmente essa tese enfatizando que o método do grupo de renormalização para desordem forte é uma ferramenta extremamente poderosa para estudar sistemas desordenados e interagentes de baixa dimensionalidade. Este sucesso se deve ao fato de que a renormalização nos acoplamentos é originada nas flutuações quânticas. Estas por sua vez são de extrema importância para sistemas críticos. Além disso, o procedimento de renormalização é perturbativo e local, ou seja, ele é tanto melhor quanto maior for a desordem no sistema. Isto está relacionado com a natureza localizada de sistemas desordenados unidimensionais. Em suma, o método de renormalização aqui utilizado concilia perfeitamente as flutuações quânticas e a natureza desordenada do sistema. Ao longo deste trabalho descrevemos várias grandezas cujo comportamento exótico certamente se deve à presença conjunta desses dois ingredientes.

Apêndice A

Derivação da equação de normalização

Seja M uma matriz hermitiana $N \times N$. Sejam $\{S^{(i)}\}$ os $N^2 - 1$ geradores da RI fundamental do grupo $SU(N)$, onde $i = 1, \dots, N^2 - 1$. Logo, $\{S^{(i)}\}$ são $N^2 - 1$ matrizes hermitianas de traço nulo e, portanto podemos fazer a seguinte decomposição,

$$M = m_0 1_{N \times N} + \sum_{i=1}^{N^2-1} m_i S^{(i)}. \quad (\text{A.1})$$

Usando a seguinte normalização

$$\text{tr}(S^i S^j) = \frac{1}{2} \delta_{i,j}, \quad (\text{A.2})$$

as constantes m_i são facilmente calculadas,

$$\begin{aligned} m_0 &= \frac{1}{N} \text{tr}(M) \\ &\text{e} \\ m_i &= 2 \text{tr}(M S^{(i)}), \text{ se } i \neq 0. \end{aligned}$$

Como M é arbitrária, escolhemos $M_{\alpha\beta}^{(\delta,\gamma)} = \delta_{\alpha,\delta} \delta_{\beta,\gamma}$, onde δ e γ são dois números inteiros quaisquer pertencentes ao intervalo $[1, N]$. Note que a definição da matriz M depende da escolha de δ e γ , mas para nossos propósitos não devemos impor uma escolha única.

Portanto, a eq. (A.1) torna-se

$$\delta_{\alpha,\delta}\delta_{\beta,\gamma} = \frac{1}{N}\delta_{\delta,\gamma}\delta_{\alpha,\beta} + 2 \sum_i \sum_{\mu,\nu} \delta_{\mu,\delta}\delta_{\nu,\gamma} S_{\nu\mu}^{(i)} S_{\alpha\beta}^{(i)},$$

o que nos leva a

$$\sum_{i=1}^{N^2-1} S_{\alpha\beta}^{(i)} S_{\gamma\delta}^{(i)} = \frac{1}{2}(\delta_{\alpha,\delta}\delta_{\beta,\gamma} - \frac{1}{N}\delta_{\delta,\gamma}\delta_{\alpha,\beta}), \quad (\text{A.3})$$

que é a equação de normalização desejada.

Apêndice B

Casimir de uma tabela de Young em forma de Γ

Considere uma tabela Young na forma de Γ . Esta pode ser representada como uma soma de dois spins, um totalmente anti-simétrico e um totalmente simétrico [Coleman 2000],

$$\mathbf{S}_f = f_\alpha^\dagger \mathbf{S}_{\alpha\beta} f_\beta = \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \vdots \\ \hline n_f \\ \hline \end{array} \text{ e } \mathbf{S}_b = b_\alpha^\dagger \mathbf{S}_{\alpha\beta} b_\beta = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & \cdots & n_b \\ \hline \end{array},$$

onde

$$\sum_{\alpha=1}^N f_\alpha^\dagger f_\alpha = n_f, \text{ e } \sum_{\alpha=1}^N b_\alpha^\dagger b_\alpha = n_b.$$

A série de Clebsch-Gordan de $S_f \otimes S_b$ é igual à soma direta de duas tabelas de Young em forma de Γ ,

$$\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \vdots \\ \hline n_f \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & \cdots & n_b \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & \cdots & n_b \\ \hline \vdots & & & \\ \hline n_f & & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & \cdots & n_b \\ \hline 1 & & \\ \hline \vdots & & \\ \hline n_f & & \\ \hline \end{array}.$$

Como temos duas possíveis representações para $\mathbf{S} = \mathbf{S}_f + \mathbf{S}_b$, esperamos que o Casimir, $C(S)$, assumira dois valores distintos. A distinção entre qual Casimir está sendo calculado (referente à primeira ou à segunda RI) ficará bem definida mais adiante quando definirmos o operador Y . Por enquanto, basta a certeza de que estamos calculando o Casimir de uma tabela de Young em forma de Γ .

Como $C(S) = \mathbf{S}^2 = \mathbf{S} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_f + 2\mathbf{S}_f \cdot \mathbf{S}_b + \mathbf{S}_b \cdot \mathbf{S}_b$, então, usando a eq. (A.3), temos

que

$$C(S) = \left(f_\alpha^\dagger f_\beta + b_\alpha^\dagger b_\beta \right) \left(f_\beta^\dagger f_\alpha + b_\beta^\dagger b_\alpha \right) - \frac{1}{N} (n_f^2 + 2n_f n_b + n_b^2),$$

onde a soma sobre os índices α e β está implícita.

Calculando os termos,

$$\begin{aligned} f_\alpha^\dagger f_\beta f_\beta^\dagger f_\alpha &= (\delta_{\alpha\beta} - f_\beta f_\alpha^\dagger) f_\beta^\dagger f_\alpha = n_f + (1 - f_\beta^\dagger f_\beta) f_\alpha^\dagger f_\alpha, \\ &= n_f + (N - n_f) n_f, \\ b_\alpha^\dagger b_\beta b_\beta^\dagger b_\alpha &= (b_\beta b_\alpha^\dagger - \delta_{\alpha\beta}) b_\beta^\dagger b_\alpha = -n_b + (1 + b_\beta^\dagger b_\beta) b_\alpha^\dagger b_\alpha, \\ &= -n_b + (N + n_b) n_b, \\ f_\alpha^\dagger f_\beta b_\beta^\dagger b_\alpha &= b_\beta^\dagger (\delta_{\alpha\beta} - f_\beta f_\alpha^\dagger) b_\alpha, \\ &= n_b - b_\beta^\dagger f_\beta f_\alpha^\dagger b_\alpha, \end{aligned}$$

encontramos que

$$2C(S) = -\frac{1}{N} Q^2 + (n_b^2 - n_f^2) + (N + 1) Q - 2b_\beta^\dagger f_\beta f_\alpha^\dagger b_\alpha, \quad (\text{B.1})$$

onde definimos $Q = n_f + n_b$ como o operador número total de "caixas". Definindo Y como a diferença entre o número de caixas verticais e o número de caixas horizontais excetuando a caixa de esquina (que é tanto horizontal quanto vertical), que pode ser representada tanto por férmion quanto por bóson, podemos distingüir as duas RI's em questão. Para a primeira, $Y = n_f - n_b - 1$, enquanto para a segunda, $Y = n_f - n_b + 1$. Devemos agora relacionar esse operador com o operador $b_\beta^\dagger f_\beta f_\alpha^\dagger b_\alpha$ na eq. (B.1).

Introduzindo os operadores

$$\theta^\dagger = \sum_\beta f_\beta^\dagger b_\beta, \quad \text{e} \quad \theta = \sum_\beta b_\beta^\dagger f_\beta,$$

que convertem a caixa da esquina de bóson para férmion e vice-versa, $\theta^\dagger : \begin{array}{|c|c|} \hline b & b \\ \hline f & \\ \hline \end{array} \longrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline f & b \\ \hline f & \\ \hline \end{array}; \theta : \begin{array}{|c|c|} \hline f & b \\ \hline f & \\ \hline \end{array} \longrightarrow \begin{array}{|c|c|} \hline b & b \\ \hline f & \\ \hline \end{array}$, podemos calcular Y de maneira única.

Por exemplo, a tabela $\begin{array}{|c|c|} \hline f & b \\ \hline f & \\ \hline \end{array}$ é escrita como $b_\sigma^\dagger f_+^\dagger f_-^\dagger |0\rangle$, onde $\sigma, +$ e $-$ são 3 possíveis

números quânticos. Aplicando θ nesse estado,

$$\theta \left(b_\sigma^\dagger f_+^\dagger f_-^\dagger |0\rangle \right) = b_\sigma^\dagger \left(b_+^\dagger f_-^\dagger - b_-^\dagger f_+^\dagger \right) |0\rangle,$$

porém, o estado correspondente à tabela $\begin{array}{|c|c|} \hline b & b \\ \hline f & \\ \hline \end{array}$ é $\frac{1}{\sqrt{3}} b_\sigma^\dagger \left(b_+^\dagger f_-^\dagger - b_-^\dagger f_+^\dagger \right) |0\rangle$. Ou seja, além de um fator de normalização igual a \sqrt{Q} , os operadores θ e θ^\dagger nos fornecem um meio de distinguir uma representação da outra. Em particular, note que $\mathcal{P}_f + \mathcal{P}_b = 1$, sendo $\mathcal{P}_f = \theta^\dagger \theta / Q$ e $\mathcal{P}_b = \theta \theta^\dagger / Q$. Isto vem do fato que θ e θ^\dagger são operadores geradores do "super-grupo" $SU(1|1)$, com a álgebra

$$\begin{aligned} \{\theta^\dagger, \theta\} &= \sum_{\alpha, \beta} f_\alpha^\dagger b_\alpha b_\beta^\dagger f_\beta + b_\beta^\dagger f_\beta f_\alpha^\dagger b_\alpha, \\ &= \sum_{\alpha=\beta} f_\alpha^\dagger b_\alpha b_\beta^\dagger f_\beta + b_\beta^\dagger f_\beta f_\alpha^\dagger b_\alpha + \sum_{\alpha \neq \beta} f_\alpha^\dagger b_\alpha b_\beta^\dagger f_\beta + b_\beta^\dagger f_\beta f_\alpha^\dagger b_\alpha, \\ &= n_f + n_b - \left(\sum_{\alpha \neq \beta} f_\alpha^\dagger f_\beta b_\beta^\dagger b_\alpha - f_\alpha^\dagger f_\beta b_\beta^\dagger b_\alpha \right), \\ &= Q. \end{aligned}$$

A interpretação de \mathcal{P}_f e \mathcal{P}_b vem quando definimos o operador $\mathcal{P} = \mathcal{P}_f - \mathcal{P}_b$. Este é igual a +1 ou -1 dependendo se a "caixa" da esquina corresponde a um férmion ou a um bóson, respectivamente.

Escrevendo convenientemente o operador $Y = n_f - n_b - \mathcal{P} = n_f - n_b + [\theta, \theta^\dagger] / Q$, reescrevemos a eq. (B.1) como

$$\begin{aligned} 2C(S) &= -\frac{1}{N} Q^2 + (N+1)Q + Q \left(n_b - n_f - \frac{2}{Q} \theta \theta^\dagger \right), \\ &= -\frac{1}{N} Q^2 + NQ - Q \left(n_f - n_b + \frac{1}{Q} [\theta, \theta^\dagger] \right), \\ &= Q \left(N - Y - \frac{Q}{N} \right), \end{aligned}$$

onde usamos que $2\theta\theta^\dagger = [\theta, \theta^\dagger] + Q$ entre a primeira e a segunda passagem. Portanto, o Casimir de uma tabela de Young em forma de Γ é

$$C(\Gamma) = \mathbf{S}^2 = \frac{Q}{2} \left(N - Y - \frac{Q}{N} \right). \quad (\text{B.2})$$

Apêndice C

Derivação das equações de renormalização

Neste apêndice, derivamos as relações de recorrência descritas nas equações de renormalização (4.10), (4.11), (4.12) e (4.13) do capítulo 4.

C.1 Renormalização em primeira ordem de teoria de perturbação

Considere o hamiltoniano de quatro spins com simetria $SU(N)$

$$H = H_0 + H_1,$$

onde

$$H_0 = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 = \frac{J_2}{2} \sum_{\alpha\beta} f_{2\alpha}^\dagger f_{2\beta} f_{3\beta}^\dagger f_{3\alpha},$$
$$H_1 = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_3 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 = \frac{J_1}{2} \sum_{\alpha\beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha} + \frac{J_3}{2} \sum_{\alpha\beta} f_{3\alpha}^\dagger f_{3\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha},$$

onde negligenciamos os termos constantes $J_i Q_i Q_{i+1}/2N$, $i = 1, 2$ e 3 , do lado direito das equações acima. Supondo que J_1 e J_3 são muito menores que J_2 , iremos tratar H_1 como uma perturbação de H_0 . Como $J_i > 0$, $\forall i$, e as RI's dos spins S_i são totalmente anti-simétricas, o multipletto fundamental de H_0 tem a simetria de um spin $SU(N)$ totalmente anti-simétrico, $\tilde{\mathbf{S}}$, onde $\tilde{Q} = Q_2 + Q_3$, se $Q_2 + Q_3 < N$, caso contrário, $\tilde{Q} = Q_2 + Q_3 - N$.

Por simplicidade e sem perda de generalidade, vamos supor que $Q_2 + Q_3 < N$.

Para denotar os estados físicos, usaremos a representação fermiônica. Por exemplo, denotamos os estados de um spin \mathbf{S} cuja RI é totalmente anti-simétrica com Q “caixas” por $|n_1, n_2, \dots, n_N\rangle$, onde $n_i = 0$ ou 1 é o número de ocupação do i -ésimo número quântico. Tais estados estão restritos a $\sum n_i = Q$. Podemos simplificar a notação desses estados por $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_Q\rangle$, onde α_j indica o j -ésimo número quântico ocupado. Dessa forma, denotamos os estados de \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 por $|\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}\rangle$ e $|\beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle$, respectivamente.

O multipletto fundamental de H_0 é facilmente calculado anti-simetrizando-se os estados formados pelo produto direto de $|\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}\rangle \otimes |\beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle$, ou seja,

$$|\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0 = cte \times A_{\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}, \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}} |\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle,$$

onde $A_{\alpha_1, \dots, \alpha_k}$ é o operador anti-simetrizador dos índices $\alpha_1, \dots, \alpha_k$, e cte é a constante de normalização. Note que o número total de parcelas produzidas pela operação de anti-simetrização no estado acima é igual a $(Q_2 + Q_3)!$. Como os números quânticos do lado esquerdo e/ou direito do ponto e vírgula já estão anti-simetrizados, muitas dessas $(Q_2 + Q_3)!$ parcelas não são distintas. Por exemplo,

$$\begin{aligned} A_{\alpha_1, \alpha_2, \beta} |\alpha_1, \alpha_2; \beta\rangle &= |\alpha_1, \alpha_2; \beta\rangle + |\alpha_2, \beta; \alpha_1\rangle + |\beta, \alpha_1; \alpha_2\rangle \\ &\quad - |\alpha_2, \alpha_1; \beta\rangle - |\beta, \alpha_2; \alpha_1\rangle - |\alpha_1, \beta; \alpha_2\rangle, \\ &= 2(|\alpha_1, \alpha_2; \beta\rangle + |\alpha_2, \beta; \alpha_1\rangle + |\beta, \alpha_1; \alpha_2\rangle). \end{aligned}$$

No total, cada parcela é repetida $Q_2!Q_3!$ vezes. Logo, o número total de parcelas distintas produzidas pela aplicação do anti-simetrizador $A_{\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}}$ no estado $|\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle$ é igual a $(Q_2 + Q_3)!/Q_2!Q_3! = \binom{Q_2 + Q_3}{Q_2}$. Definindo $A'_{\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}}$ como um operador anti-simetrizador que gera somente parcelas distintas, ou seja, $A'_{\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}} \equiv A_{\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}}/Q_2!Q_3!$, reescrevemos o estado fundamental da seguinte forma,

$$|\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0 = \frac{A'_{\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}}}{\sqrt{\binom{Q_2 + Q_3}{Q_2}}} |\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle.$$

Note que os índices α_i e β_j são distintos entre si $\forall i, j$.

Em primeira ordem de teoria de perturbação, obtém-se o hamiltoniano efetivo proje-

tando H_1 no sub-espço fundamental degenerado descrito acima. Por isso, devemos calcular o seguinte elemento de matriz

$$\begin{aligned} M_{a',a} &= {}_0\langle m'; \alpha'_1, \dots, \beta'_{Q_3} | \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 | m; \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0, \\ &= c(\tilde{Q}, Q_2, Q_3) {}_0\langle m'; \alpha'_1, \dots, \beta'_{Q_3} | \mathbf{S}_1 \cdot \tilde{\mathbf{S}} | m; \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0, \end{aligned}$$

onde $|m\rangle$ denota os vetores correspondentes a \mathbf{S}_1 . A última passagem será demonstrada ao longo deste apêndice, onde também calcularemos $c(\tilde{Q}, Q_2, Q_3)$ e mostraremos que este independe do elemento de matriz. Dessa maneira,

$$H^{ef} = \tilde{J}_1 \mathbf{S}_1 \cdot \tilde{\mathbf{S}} + \tilde{J}_3 \tilde{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{S}_4, \quad (\text{C.1})$$

onde $\tilde{J}_1 = c(\tilde{Q}, Q_2, Q_3)J_1$ e $\tilde{J}_3 = c(\tilde{Q}, Q_3, Q_2)J_3$. Para calcular $c(\tilde{Q}, Q_2, Q_3)$, iremos calcular todos os elementos de matriz ${}_0\langle m'; \alpha'_1, \dots, \beta'_{Q_3} | \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 | m; \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0$ e, em seguida, calcularemos todos os elementos de matriz ${}_0\langle m'; \alpha'_1, \dots, \beta'_{Q_3} | \mathbf{S}_1 \cdot \tilde{\mathbf{S}} | m; \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0$. Dessa forma, poderemos verificar que tais matrizes são proporcionais.

Primeiramente, calcularemos um elemento qualquer da diagonal,

$$M_{a,a} = \langle m | f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} | m \rangle {}_0\langle \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} | f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha} | \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0,$$

onde a soma sobre os índices α e β está implícita e $a = \{\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\}$, denota o seqüência de valores referente à a -ésima linha ou coluna da matriz M . Os únicos termos não nulos, são aqueles em que $\alpha = \beta$, o que resulta em

$$M_{a,a} = \left[\binom{Q_2 + Q_3}{Q_2} \right]^{-1} \lambda \langle m | \left(f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\alpha_1} + \dots + f_{1\beta_{Q_3}}^\dagger f_{1\beta_{Q_3}} \right) | m \rangle,$$

onde

$$\lambda = \binom{Q_2 - 1 + Q_3}{Q_2 - 1}, \quad (\text{C.2})$$

é o número de parcelas da série $A'_{\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}} | \alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle$ em que, por

exemplo, o número quântico α_1 aparece do lado esquerdo do ponto e vírgula. Logo,

$$M_{a,a} = \frac{Q_2}{Q_2 + Q_3} \langle m | \left(f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\alpha_1} + \cdots + f_{1\beta_{Q_3}}^\dagger f_{1\beta_{Q_3}} \right) | m \rangle.$$

Mas

$$\begin{aligned} \langle m | \left(f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\alpha_1} + \cdots + f_{1\beta_{Q_3}}^\dagger f_{1\beta_{Q_3}} \right) | m \rangle &= \langle m | f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} | m \rangle \delta_{\alpha,\beta}, \\ &= \langle m | f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} | m \rangle \times \\ &\quad {}_0 \langle \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} | \tilde{f}_\beta^\dagger \tilde{f}_\alpha | \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0, \end{aligned}$$

uma vez que $|\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0$ é auto-estado do operador número $\tilde{f}_\alpha^\dagger \tilde{f}_\alpha$. Note que a soma sobre os índices α e β está, novamente, implícita do lado direito da equação. Logo,

$$c(\tilde{Q}, Q_2, Q_3) = \frac{Q_2}{Q_2 + Q_3}, \quad (\text{C.3})$$

para qualquer elemento da diagonal.

Devemos agora calcular um elemento fora da diagonal,

$$M_{a',a} = \langle m' | f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} | m \rangle {}_0 \langle \alpha'_1, \dots, \beta'_{Q_3} | f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha} | \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0,$$

onde $m \neq m'$ e a seqüência $\{\alpha'_1, \dots, \beta'_{Q_3}\} \neq \{\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\}$. Para tal, devemos saber calcular

$$\langle \alpha'_1, \dots, \alpha'_{Q_2}; \beta'_1, \dots, \beta'_{Q_3} | f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha} | \alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle.$$

Como o operador $f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha}$ só atua sobre os índices do lado esquerdo do ponto e vírgula das parcelas acima, então a seqüência de índices do lado direito do ponto e vírgula da parcela $|\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle$ tem que ser igual à seqüência de índices do lado direito do ponto e vírgula da parcela $|\alpha'_1, \dots, \alpha'_{Q_2}; \beta'_1, \dots, \beta'_{Q_3}\rangle$, ou seja, $\{\beta'_1, \dots, \beta'_{Q_3}\} = \{\beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\}$, caso contrário, a contração é nula e não contribui para $M_{a',a}$. E como o operador $f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha}$, muda no máximo a ocupação de um único número quântico, as seqüências $\{\alpha'_1, \dots, \beta'_{Q_3}\}$ e $\{\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\}$ devem diferir, exatamente, em um único índice (se não diferissem em pelo menos um índice, estaríamos calculando os elementos diagonais).

Suponhamos agora, e sem perda de generalização, que

$$M_{a',a} = \left\langle m' \left| f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} \right| m \right\rangle {}_0 \left\langle \alpha'_1, \alpha_2, \dots, \beta_{Q_3} \left| f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha} \right| \alpha_1, \alpha_2, \dots, \beta_{Q_3} \right\rangle_0,$$

ou seja, as seqüências $\{\alpha'_1, \dots, \beta'_{Q_3}\}$ e $\{\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\}$ são tais que $\alpha_1 \neq \alpha'_1$, $\alpha'_i = \alpha_i$, $\forall i \neq 1$ e $\beta'_j = \beta_j$, $\forall j$. Portanto, os únicos termos que contribuem para $M_{a',a}$ são aqueles em que $\alpha = \alpha_1$ e $\beta = \alpha'_1$. Logo,

$$M_{a',a} = \left[\binom{Q_2 + Q_3}{Q_2} \right]^{-1} \lambda \left\langle m' \left| f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\alpha'_1} \right| m \right\rangle,$$

onde λ (ver eq. (C.2)) é o número de parcelas do "ket" $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0$ em que o índice α_1 se encontra do lado esquerdo do ponto e vírgula. Note que sempre há uma parcela do "bra" ${}_0 \langle \alpha'_1, \alpha_2, \dots, \beta_{Q_3} |$ respectiva à tal parcela do "ket" $|\alpha_1, \alpha_2, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0$ para que possa haver a contração.

Além disso,

$$\begin{aligned} \left\langle m' \left| f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\alpha'_1} \right| m \right\rangle &= \left\langle m' \left| f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} \right| m \right\rangle \times \\ &{}_0 \left\langle \alpha'_1, \alpha_2, \dots, \beta_{Q_3} \left| \tilde{f}_\beta^\dagger \tilde{f}_\alpha \right| \alpha_1, \alpha_2, \dots, \beta_{Q_3} \right\rangle_0. \end{aligned}$$

Dessa forma, verificamos que a constante de proporcionalidade entre os elementos de matriz fora da diagonal é igual à constante de proporcionalidade entre os elementos de matriz da diagonal (cf. eq. (C.3)),

$$c(\tilde{Q}, Q_2, Q_3) = \frac{Q_2}{Q_2 + Q_3}.$$

C.2 Renormalização em segunda ordem de teoria de perturbação

No caso em que $Q_2 + Q_3 = N$, o estado fundamental é um singlete e, portanto o hamiltoniano efetivo, eq. (C.1), é nulo. Para obter um acoplamento não nulo entre S_1 e S_4 , devemos

tratar H_1 em segunda ordem de teoria de perturbação

$$H_{m',m}^{ef} = \sum_{i \neq 0} \frac{\langle 0' | H_1 | i \rangle \langle i | H_1 | 0 \rangle}{E_0 - E_i},$$

onde

$$|0\rangle = |m_1\rangle \otimes |\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0 \otimes |m_4\rangle, \quad (C.4)$$

é o estado fundamental de H_0 , a soma é sobre todos os estados excitados $|i\rangle$, cuja energia não perturbada é E_i . O único termo não nulo desta soma é aquele em que $|i\rangle$ se refere ao

primeiro estado excitado, que na série de Clebsch-Gordan de $\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \vdots \\ \hline Q_2 \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \vdots \\ \hline Q_3 \\ \hline \end{array}$ é representado

pela tabela de Young em forma de Γ contendo $N' = N - 1$ caixas na primeira coluna e

uma na segunda, $\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & \\ \hline \vdots & \\ \hline N' & \\ \hline \end{array}$.¹ A diferença de energia entre este e o estado fundamental é, cf. eq. (4.7), $J_2/2N$. Dessa maneira,

$$H^{ef} = -\frac{2}{J_2 N} \sum_i \langle 0 | H_1 | i \rangle \langle i | H_1 | 0 \rangle = -\frac{2N}{J_2} \langle 0 | H_1^2 | 0 \rangle,$$

já que $\langle 0 | H_1 | 0 \rangle = 0$. Como não há nenhum acoplamento com outros spins, somente os termos proporcionais a $J_1 J_3$ contribuem para H^{ef} . Os termos proporcionais a J_1^2 e J_3^2 resultam em um deslocamento global da energia que, para os nossos propósitos, pode ser negligenciado. Logo,

$$H^{ef} = -\frac{2}{J_2 N} \times \frac{J_1 J_3}{4} \langle 0 | f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha} f_{3\gamma}^\dagger f_{3\delta} f_{4\delta}^\dagger f_{4\gamma} + \text{h.c.} | 0 \rangle,$$

onde a soma sobre os índices α, β, γ e δ está implícita. Note que os únicos termos não nulos são aqueles em que $\alpha = \beta$ e $\gamma = \delta$, ou $\alpha = \gamma$ e $\beta = \delta$, porque os índices α_i e β_j são todos distintos entre si, percorrem todos os números quânticos possíveis (lembre-se que

¹ Na verdade, não temos uma prova para tal afirmação e a assumimos como uma conjectura. Esta é verdadeira para o grupo $SU(2)$ (ver ref. [Westerberg 1995]), e foi verificada por nós para o caso $SU(4)$ na dizimação de duas RI's auto conjugadas,

$\begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \end{array} = 1 \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \hline \\ \hline \end{array}$, ou seja, em segunda ordem de teoria de perturbação o singlete não é "ligado" ao multiplete $\begin{array}{|c|c|} \hline \hline \\ \hline \end{array}$.

$Q_2 + Q_3 = N$) e estão anti-simetrizados entre si (cf. eq. (C.4)). Logo, H^{ef} deve ter a seguinte forma,

$$H_{m',m}^{ef} = -\frac{2}{J_2 N} \times \frac{J_1 J_3}{4} \langle m'_1; m'_4 | \frac{2 \times \epsilon}{\binom{N}{Q_2}} \sum_{\alpha, \beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha} | m_1; m_4 \rangle + cte,$$

onde o fator 2 vem da soma sobre o termo conjugado, ϵ é o número de vezes em que cada termo $f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha}$ é gerado quando das inúmeras contrações presentes em ${}_0\langle \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} | f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha} f_{3\gamma}^\dagger f_{3\delta} | \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0$, o fator numérico $\binom{N}{Q_2}$ vem da normalização do estado $|\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0$ e *cte* é um termo constante que pode ser desprezado. Este último vem da soma sobre termos em que $\alpha = \beta$ e $\gamma = \delta$ dando origem a um termo proporcional a $Q_1 Q_4$.

Iremos agora contabilizar os termos de

$${}_0\langle \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} | f_{2\beta}^\dagger f_{2\alpha} f_{3\gamma}^\dagger f_{3\delta} | \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0,$$

e dessa maneira provar a afirmação acima e calcular ϵ .

Para tal, contaremos o número de vezes que o termo, por exemplo, $f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\beta_1} f_{4\beta_1}^\dagger f_{4\alpha_1}$ é gerado. Este vem da contração de quando $\alpha = \gamma = \alpha_1$ e $\beta = \delta = \beta_1$. Portanto, devemos calcular

$${}_0\langle \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} | f_{2\beta_1}^\dagger f_{2\alpha_1} f_{3\alpha_1}^\dagger f_{3\beta_1} | \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0.$$

Lembre-se que $|\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0$ é uma combinação linear das parcelas anti-simetrizadas de $|\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle$. Dessa forma, as únicas que contribuem são aquelas em que os índices α_1 e β_1 estão do lado esquerdo e direito do ponto e vírgula, respectivamente. No total, são $\binom{Q_2 - 1 + Q_3 - 1}{Q_2 - 1}$ parcelas. Como a operação de $f_{2\beta_1}^\dagger f_{2\alpha_1} f_{3\alpha_1}^\dagger f_{3\beta_1}$ permuta os índices α_1 e β_1 , e a parcela resultante se contrai com aquela que já foi anti-simetrizada pelo operador $A'_{\alpha_1, \dots, \alpha_{Q_2}; \beta_1, \dots, \beta_{Q_3}}$ e como houve apenas uma troca de índices, um sinal negativo deve ser levado em conta. Assim, concluímos que o termo $f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\beta_1} f_{4\beta_1}^\dagger f_{4\alpha_1}$ deve ser multiplicado por

$$\epsilon = - \binom{Q_2 - 1 + Q_3 - 1}{Q_2 - 1} = - \binom{N - 2}{Q_2 - 1}.$$

Como não há nenhuma restrição sobre os índices α_1 e β_1 (além de que $\alpha_1 \neq \beta_1$), este mesmo pré-fator multiplica todos os termos $f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha}$, restritos a $\alpha \neq \beta$.

Surgem ainda outros termos, esses são do tipo $f_{1\alpha}^\dagger f_{1\alpha} f_{4\alpha}^\dagger f_{4\alpha}$. Para contá-los, devemos calcular o número de vezes que aparece, por exemplo, o termo $f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\alpha_1} f_{4\alpha_1}^\dagger f_{4\alpha_1}$, ou seja, devemos calcular

$${}_0\langle \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} | f_{2\alpha_1}^\dagger f_{2\alpha_1} f_{3\alpha_1}^\dagger f_{3\alpha_1} | \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0.$$

Como o índice α_1 não pode estar dos dois lados do ponto e vírgula das parcelas do vetor $|\alpha_1, \dots, \beta_{Q_3}\rangle_0$, então a quantidade acima é nula.

Resta ainda contar os termos do tipo $f_{1\alpha}^\dagger f_{1\alpha} f_{4\beta}^\dagger f_{4\beta}$. Foquemos nossa atenção no termo $f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\alpha_1} f_{4\beta_1}^\dagger f_{4\beta_1}$, por exemplo. Este vem de quando $\alpha = \beta = \alpha_1$ e $\gamma = \delta = \beta_1$, portanto devemos calcular

$${}_0\langle \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} | f_{2\alpha_1}^\dagger f_{2\alpha_1} f_{3\beta_1}^\dagger f_{3\beta_1} | \alpha_1, \dots, \beta_{Q_3} \rangle_0.$$

As únicas parcelas que contribuem são aquelas em que os índices α_1 e β_1 estão do lado esquerdo e direito do ponto e vírgula, respectivamente. No total, são $\binom{Q_2 - 1 + Q_3 - 1}{Q_2 - 1}$ parcelas. Como a operação de $f_{2\alpha_1}^\dagger f_{2\alpha_1} f_{3\beta_1}^\dagger f_{3\beta_1}$ não permuta os índices α_1 e β_1 , a parcela resultante se contrai com o bra correspondente. Assim, concluímos que o termo $f_{1\alpha_1}^\dagger f_{1\alpha_1} f_{4\beta_1}^\dagger f_{4\beta_1}$ deve ser multiplicado por

$$\epsilon = - \binom{Q_2 - 1 + Q_3 - 1}{Q_2 - 1} = - \binom{N - 2}{Q_2 - 1}.$$

Como não há mais nenhum termo a ser contabilizado,

$$H_{m',m}^{ef} = \frac{\tilde{J}}{2} \langle m'_1; m'_4 | \left(\sum_{\alpha \neq \beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha} - \sum_{\alpha \neq \beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\alpha} f_{4\beta}^\dagger f_{4\beta} \right) | m_1; m_4 \rangle,$$

onde

$$\tilde{J} = -\frac{2}{J_2 N} \times \frac{J_1 J_3}{2} \times \frac{2\epsilon}{\binom{N}{Q_2}} = \frac{2Q_2 Q_3}{N^2 (N - 1)} \times \frac{J_1 J_3}{J_2}.$$

Finalmente, como

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha \neq \beta} \left(f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha} - f_{1\alpha}^\dagger f_{1\alpha} f_{4\beta}^\dagger f_{4\beta} \right) &= \sum_{\alpha, \beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha} - f_{1\alpha}^\dagger f_{1\alpha} f_{4\beta}^\dagger f_{4\beta} - \\
&\sum_{\alpha = \beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha} - f_{1\alpha}^\dagger f_{1\alpha} f_{4\beta}^\dagger f_{4\beta}, \\
&= \sum_{\alpha, \beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha} - f_{1\alpha}^\dagger f_{1\alpha} f_{4\beta}^\dagger f_{4\beta}, \\
&= \sum_{\alpha, \beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha} - Q_1 Q_4,
\end{aligned}$$

então, negligenciando os termos constantes,

$$\begin{aligned}
H^{ef} &= \frac{\tilde{J}}{2} \sum_{\alpha, \beta} f_{1\alpha}^\dagger f_{1\beta} f_{4\beta}^\dagger f_{4\alpha}, \\
&= \tilde{J} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4.
\end{aligned}$$

Apêndice D

Equações de fluxo

Neste apêndice, estão listadas as soluções das equações de fluxo das distribuições de acoplamentos.

D.1 Distribuição de ponto fixo

Nesta seção, resolvemos a equação que dita o fluxo de renormalização da distribuição de constantes de acoplamento $P(J)$ de uma cadeia de spins $SU(N)$,

$$-\frac{\partial}{\partial \Omega} P(J; \Omega) = qP(\Omega)P(J) + pP(\Omega) \int dJ_1 dJ_3 P(J_1)P(J_3) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right), \quad (\text{D.1})$$

onde $p = 1/(N - 1)$ e $q = 1 - p$ são as probabilidades de ocorrência de uma dizimação em segunda e primeira ordem de teoria de perturbação, respectivamente.

O método do GR nos diz que devemos procurar por pontos fixos da seguinte maneira. Diminua a escala de energia de Ω para $\Omega - d\Omega$ e reescale apropriadamente os parâmetros do sistema em função da escala de energia. O ponto fixo é encontrado quando os valores desses parâmetros não mudam quando se diminui a escala de energia, ou seja, os parâmetros apropriadamente reescalados com a energia são constantes ao longo do fluxo de renormalização. Para realizar essa tarefa, devemos reescalar as constantes de acoplamento J em função da escala de energia. Tal reescalamento não é trivial, e por isso faremos antes a seguinte mudança de variáveis,

$$\begin{cases} \Gamma = -\ln \Omega, \\ \zeta = \ln(\Omega/J), \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

com $\Omega_0 = 1$. Dessa forma a equação de recorrência para a variável ζ é dada por

$$\tilde{\zeta}_i = \zeta_i, \quad i = 1 \text{ ou } 3, \quad (\text{D.3})$$

$$\tilde{\zeta} = \zeta_1 + \zeta_3, \quad (\text{D.4})$$

quando da dizimação do acoplamento “2” em primeira e segunda ordem, respectivamente.

A equação de fluxo (D.1) se torna,

$$\frac{\partial}{\partial \Gamma} \rho(\zeta; \Gamma) = \frac{\partial}{\partial \zeta} \rho + q\rho(\zeta)\rho_0 + p\rho_0 \int d\zeta_1 d\zeta_3 \rho(\zeta_1)\rho(\zeta_3)\delta(\zeta - \zeta_1 - \zeta_3), \quad (\text{D.5})$$

onde $\rho(\zeta; \Gamma) = JP(J; \Omega)$, e $\rho_0 = \rho(0; \Gamma)$. Note que a relação de recorrência $\tilde{J} = J_1 J_3 / \Omega$ se torna uma simples relação aditiva $\tilde{\zeta} = \zeta_1 + \zeta_3$. Por isso, essa mudança de variáveis é apropriada.

Um reescalonamento apropriado é,

$$\eta = \frac{\zeta}{\Gamma^k}.$$

Sendo $R(\eta; \Gamma) = \Gamma^k \rho(\zeta; \Gamma)$, a equação de fluxo (D.5) torna-se

$$\Gamma \frac{\partial}{\partial \Gamma} R(\eta; \Gamma) = k \left[R + \eta \frac{\partial}{\partial \eta} R \right] + \Gamma^{1-k} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} R + R_0 (qR + pR \otimes R) \right], \quad (\text{D.6})$$

onde $R_0 = R(0; \Gamma)$ e $R \otimes R = \int_0^\eta d\eta' R(\eta') R(\eta - \eta')$. No limite em que $\Gamma \rightarrow \infty$, a distribuição de ponto fixo não deve depender de Γ [Fisher 1974], portanto o lado esquerdo da equação (D.6) acima deve ser nulo. Se $k > 1$, o primeiro termo do lado direito da eq. (D.6) deve ser nulo o que nos leva a uma solução não normalizável: $R \sim 1/\eta$. Se $k < 1$, o segundo termo do lado direito da eq. (D.6) deve ser nulo, o que nos leva a soluções não físicas porque R oscila em sinal. Logo, $k = 1$ e, portanto,

$$\Gamma \frac{\partial}{\partial \Gamma} R^*(\eta; \Gamma) = R^* + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} R^* + qR_0^* R^* + pR_0^* R^* \otimes R^* = 0 \quad (\text{D.7})$$

cuja solução é

$$R^*(\eta) = \frac{1}{p} \theta(\eta) e^{-\eta/p}. \quad (\text{D.8})$$

Retornando às variáveis originais,

$$\rho^*(\zeta; \Gamma) = \frac{\theta(\zeta)}{p\Gamma} e^{-\zeta/p\Gamma}, \implies P^*(J; \Omega) = \frac{\alpha}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J} \right)^{1-\alpha} \theta(\Omega - J), \quad (\text{D.9})$$

com $\alpha = 1/(p\Gamma)$.

D.2 Estabilidade da distribuição de ponto fixo

Para estudar a estabilidade da solução de ponto fixo eq. (D.8), devemos estudar o comportamento de uma função R qualquer, "próxima" de R^* , na eq. (D.6). (Tal procedimento é análogo ao realizado por Fisher quando este estudou a distribuição de ponto fixo para as cadeias de spin SU(2) [Fisher 1994].)

$$\Gamma \frac{\partial}{\partial \Gamma} R(\eta; \Gamma) = R + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} R + R_0 (qR + pR \otimes R).$$

Definindo $r(\eta; \Gamma) = R - R^*$ e linearizando a equação de fluxo com respeito a $r(\eta)$,

$$\begin{aligned} \Gamma \frac{\partial}{\partial \Gamma} r &= r + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} r + R_0^* (qr + pr \otimes R^* + pR^* \otimes r) \\ &\quad + r_0 (qR^* + pR^* \otimes R^*) + \mathcal{O}(r^2), \end{aligned}$$

onde $r_0 = r(0; \Gamma)$. Simplificando a equação acima,

$$\Gamma \frac{\partial}{\partial \Gamma} r = \left(1 + \frac{q}{p} \right) r + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} r + \frac{2}{p} r \otimes e^{-\eta/p} + \frac{r_0}{p} (q + \eta) e^{-\eta/p}.$$

Supondo que r tenha a seguinte forma,

$$r(\eta; \Gamma) = f_\lambda(\eta) e^{-\eta/p\Gamma^\lambda},$$

encontramos seguinte equação para $f_\lambda(\eta)$,

$$0 = - \left(\lambda + \frac{\eta}{p} \right) f_\lambda + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} f_\lambda + \frac{2}{p} \int_0^\eta d\eta' f_\lambda(\eta') + \frac{q + \eta}{p} f_\lambda(0).$$

A equação acima pode ser resolvida usando o método de Frobenius,

$$f_\lambda(\eta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \eta^{n+m},$$

onde $m \geq 0$, uma vez que $\int_0^\infty d\eta r(\eta) = 0$. Dessa maneira,

$$\begin{aligned} - \left(\lambda + \frac{\eta}{p} \right) \sum a_n \eta^{n+m} + (1 + \eta) \sum a_n (n + m) \eta^{n+m-1} \\ + \frac{2}{p} \sum \frac{a_n \eta^{n+m+1}}{n + m + 1} + \frac{q + \eta}{p} a_0 \delta_{m,0} = 0. \end{aligned}$$

Agrupando os termos de forma adequada,

$$\begin{aligned} \frac{q + \eta}{p} a_0 \delta_{m,0} + a_0 m \eta^{m-1} + (a_0 (m - \lambda) + a_1 (m + 1)) \eta^m \\ + \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{p} \left(\frac{2}{n + m + 1} - 1 \right) a_n + (n + m + 1 - \lambda) a_{n+1} \right. \\ \left. + (n + m + 2) a_{n+2} \right] \eta^{n+m+1} = 0. \end{aligned}$$

Como $a_0 \neq 0$, então $m = 0$. Logo, as relações de recorrência são

$$\begin{cases} \left(\frac{q}{p} - \lambda \right) a_0 + a_1 = 0, \\ \frac{2}{p} a_0 + (1 - \lambda) a_1 + 2a_2 = 0, \\ \frac{1}{p} \left(\frac{2}{n+1} - 1 \right) a_n + (n + 1 - \lambda) a_{n+1} + (n + 2) a_{n+2} = 0, \text{ se } n \geq 1, \end{cases}$$

que nos levam ao seguinte resultado,

$$\begin{aligned} a_1 &= \left(\lambda - \frac{q}{p} \right) a_0; \quad a_2 = \frac{1}{2} (\lambda + 1) \left(\lambda - 1 - \frac{1}{p} \right) a_0; \\ a_3 &= \frac{1}{3} (\lambda - 2) a_2; \quad a_4 = \left(\frac{1}{p} + (\lambda - 3) (\lambda - 2) \right) \frac{a_2}{3}; \quad \dots \end{aligned}$$

Como $\int r(\eta) d\eta = 0$, então,

$$\int d\eta f_\lambda e^{-\eta/p} = \sum_{n=0}^{\infty} n! p^{n+1} a_n = 0.$$

Dessa forma, devemos impor um "cut-off" na série de Frobenius. Este se dá impondo $a_2 = 0$ e, portanto $a_i = 0, \forall i \geq 2$. Dessa maneira

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda = -1, \\ \text{ou} \\ \lambda = 1 + 1/p. \end{array} \right.$$

A primeira solução implica que $a_1 = -a_0/p$, enquanto a segunda implica que $a_1 = 2a_0$. Como devemos satisfazer a condição de normalização de r ,

$$p(a_0 + pa_1) = 0,$$

a segunda solução é descartada. Logo,

$$r(\eta) = \left(1 - \frac{1}{p}\eta\right) a_0 e^{-\eta/p} \Gamma^\lambda, \text{ onde } \lambda = -1.$$

Como só existe uma solução com auto-valor λ negativo, concluimos que a distribuição de ponto fixo R^* (D.8) é estável e bem comportada.

D.3 Distribuição de comprimentos das conexões

Considere agora a equação de fluxo de renormalização para a distribuição conjunta das variáveis de energia, J , e comprimento, l , eq. (4.33),

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \Omega} P &= -qP(J, l) P(\Omega, l) + 2q \int dl_1 dl_2 P(J, l_1) P(\Omega, l_2) \delta\left(l - l_1 - \frac{l_2}{2}\right) \\ &+ p \int dl_1 dl_2 dl_3 dJ_1 dJ_3 P(\Omega, l_2) P(J_1, l_1) P(J_3, l_3) \times \\ &\times \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{\Omega}\right) \delta(l - l_1 - l_2 - l_3). \end{aligned}$$

Fazendo a conveniente mudança de variáveis eq. (D.2), a equação de fluxo torna-se,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Gamma} \rho &= \frac{\partial}{\partial \zeta} \rho - q\rho(\zeta, l) \rho_\zeta(0) + 2q \int dl_1 dl_2 \rho(\zeta, l_1) \rho(0, l_2) \delta\left(l - l_1 - \frac{l_2}{2}\right) \\ &+ p \int dl_1 dl_2 dl_3 \rho(0, l_2) \rho(\cdot, l_1) \overset{\zeta}{\otimes} \rho(\cdot, l_3) \delta(l - l_1 - l_2 - l_3), \end{aligned}$$

com $\rho(\zeta, l; \Gamma) = JP(J, l; \Omega)$, onde os pontos dizem respeito à variável a ser convoluída $\rho(\cdot, l_1) \stackrel{\zeta}{\otimes} \rho(\cdot, l_3) = \int d\zeta_1 d\zeta_3 \rho(\zeta_1, l_1) \rho(\zeta_3, l_3) \delta(\zeta - \zeta_1 - \zeta_3)$ e $\rho_\zeta(\zeta) = \int \rho(\zeta, l) dl$. Procurando por pontos fixos, reescalamos

$$\eta = \zeta/\Gamma, \text{ and } \lambda = l/\Gamma^\kappa,$$

onde κ dever ser ajustado para obtermos soluções bem comportadas. Entretanto, da eq. (4.25), esperamos que $\kappa = N$. Como $\rho(\zeta, l; \Gamma) = R(\eta, \lambda; \Gamma)/\Gamma^{\kappa+1}$, temos que

$$\begin{aligned} \Gamma \frac{\partial R}{\partial \Gamma} &= (\kappa + 1) R + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} R + \kappa \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} R - q R_\eta(0) R(\eta, \lambda) \\ &+ 2q \int d\lambda_1 d\lambda_2 R(\eta, \lambda_1) R(0, \lambda_2) \delta\left(\lambda - \lambda_1 - \frac{1}{2}\lambda_2\right) \\ &+ p \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 R(0, \lambda_2) R(\cdot, \lambda_1) \stackrel{\eta}{\otimes} R(\cdot, \lambda_3) \delta(\lambda - \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3). \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

Fazendo a seguinte transformada de Laplace,

$$\hat{R}(\eta, y) = \int_0^\infty e^{-y\lambda} R(\eta, \lambda) d\lambda,$$

a equação de fluxo (D.10) no ponto fixo torna-se

$$\begin{aligned} 0 &= \left(1 - \frac{q}{p}\right) \hat{R} + (1 + \eta) \frac{\partial \hat{R}}{\partial \eta} - \kappa y \frac{\partial \hat{R}}{\partial y} \\ &+ 2q \hat{R}\left(0, \frac{y}{2}\right) \hat{R}(\eta, y) + p \hat{R}(0, y) \hat{R}(\cdot, y) \stackrel{\eta}{\otimes} \hat{R}(\cdot, y), \end{aligned}$$

uma vez que as soluções de ponto fixo não dependem de Γ .

Nós então tentamos uma solução da forma $\exp\{f_1(y) + f_2(y)\eta - \eta/p\}/p$ com as condições de contorno $f_1(0) = f_2(0) = 0$ que vêm de $\hat{R}(\eta, 0) = R^*(\eta)$, e achamos que f_1 deve satisfazer

$$\begin{aligned} 0 &= \kappa^2 y^2 \frac{d^2}{dy^2} f_1(y) + \kappa(\kappa - 1) y \frac{d}{dy} f_1(y) - \frac{e^{2f_1}}{p} \\ &- 2\kappa \frac{q}{p} e^{f_1(y/2)} \frac{d}{dy} f_1(y/2) + 2 \frac{q}{p} e^{f_1(y/2)} - \frac{q}{p} + 1, \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

e otemos f_2 a partir de

$$f_2 = \kappa y \frac{d}{dy} f_1(y) + 2 \frac{q}{p} (1 - e^{f_1(y/2)}).$$

Note que as condições de contorno fixam f_1 a menos de uma constante multiplicativa em y que corresponde a um reescalonamento global das variáveis de comprimento.

Se conseguíssemos resolver a eq. (D.11), a distribuição de comprimento das conexões poderia ser obtida integrando \hat{R} sobre a variável η e tomando a transformada de Laplace inversa do resultado. Dessa forma,

$$Pr(l; \Gamma) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{e^{f_1(y)}}{p \left(\frac{1}{p} - f_2(y) \right)} e^{y\lambda} dy \sim e^{y^* l / \Gamma^\kappa}, \quad (\text{D.12})$$

onde y^* é a raiz da equação $f_2(y^*) = 1/p$ mais próxima da origem no plano complexo de y .

Procurando pelo comportamento de $Pr(l; \Gamma)$ no limite de longas escalas de comprimento, esperamos que a principal contribuição para a integral na eq. (D.12) venha de $y \ll 1$. Então, supondo que f_1 é bem comportada nesse limite, podemos aproximar $f_1 \approx ay$ na equação de ponto fixo (D.11), o que nos leva a

$$a(\kappa + 1)(\kappa - N)y + \mathcal{O}(y^2) = 0.$$

Como esperado, $\kappa = N$, e $y^* \approx (N - 1)/2a$.

Se compararmos essa solução com a de Fisher para o caso $SU(2)$ (ver ref. [Fisher 1994]), encontramos que $f_1 = \ln(\sqrt{y}/\sinh \sqrt{y}) \approx -y/6$, o que implica em $y^* = -3$. Entretanto, o resultado exato da integração da eq. (D.11) é $Pr \sim \exp\{-\pi^2 l / (4\Gamma^2)\}$ [Fisher 1994], ou seja, a solução aproximada (D.12) é exponencialmente diferente da solução exata. Isto é devido ao reescalonamento global na variável y . Note que $y \rightarrow \text{cte} \times y$ preserva qualquer solução da eq. (D.11). O principal resultado é que $\kappa = N$ e a deve ser negativo e independente de Γ . Este último dá suporte para a nossa generalização do argumento de Fisher para calcular a função de correlação típica (ver eq. (4.29)), bem como o comprimento de correlação térmico médio (ver eq. (4.32)).

D.4 Distribuição de ponto fixo com variáveis auxiliares

Nesta seção, calculamos o comportamento de escala de alguns momentos da distribuição de variáveis auxiliares.

Definimos como variável auxiliar, aquela que se modifica junto com a variável ζ durante o fluxo de renormalização. Considere a variável x que não se renormaliza em procedimentos de dizimação de primeira ordem em teoria de perturbação (tal como ζ) e que em procedimentos de dizimação de segunda ordem em teoria de perturbação se renormaliza como

$$\tilde{x} = x_1 + x_3 + \Upsilon x_2, \quad (\text{D.13})$$

onde Υ é um número real, e a dizimação simultânea na variável ζ é aquela descrita pela eq. (D.4). Dessa maneira, a equação de fluxo para a distribuição $\rho(\zeta, x; \Gamma)$ torna-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Gamma} \rho = & \frac{\partial}{\partial \zeta} \rho + q \rho(\zeta, x) \rho_\zeta(0, x) + p \int dx_1 dx_2 dx_3 d\zeta_1 d\zeta_3 \rho(0, x_2) \times \\ & \rho(\zeta_1, x_1) \rho(\zeta_3, x_3) \delta(\zeta - \zeta_1 - \zeta_3) \delta(x - x_1 - x_3 - \Upsilon x_2), \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

onde $p(q)$ é a probabilidade de ocorrência de uma dizimação em segunda (primeira) ordem de teoria de perturbação.

Reescalando as variáveis ζ e x ,

$$\eta = \zeta/\Gamma, \quad \chi = x/\Gamma^\gamma,$$

onde γ deve ser determinado procurando soluções que apresentem invariância de escala, a equação de ponto fixo se torna

$$\begin{aligned} \Gamma \frac{\partial R^*}{\partial \Gamma} = & (1 + \gamma) R^* + (1 + \eta) \frac{\partial R^*}{\partial \eta} + \gamma \chi \frac{\partial R^*}{\partial \chi} + q R^* R_\eta^*(0) + p \int d\chi_2 R^*(0, \chi_2) \\ & \int \int d\chi_1 d\chi_3 R^*(\cdot, \chi_1) \overset{\eta}{\otimes} R^*(\cdot, \chi_3) \delta(\chi - \chi_1 - \chi_3 - \Upsilon \chi_2) = 0, \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

onde $\rho(\zeta, x; \Gamma) = R(\eta, \chi; \Gamma)/\Gamma^{\gamma+1}$, $R_\eta = \int R d\chi = e^{-\eta/p}/p$, e os pontos denotam a variável de convolução η , $R(\cdot) \overset{\eta}{\otimes} R(\cdot) = \int_0^\eta R(\eta') R(\eta - \eta') d\eta'$.

Podemos analisar os momentos da distribuição condicional de χ

$$M_s(\eta) \equiv \frac{1}{R_\eta(\eta)} \int \chi^s R(\eta, \chi) d\chi,$$

a partir da equação (D.15). Multiplicando-se por χ^s e integrando em χ ,

$$-\left(\gamma s + \frac{\eta}{p}\right) M_s + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} M_s + \frac{1}{p} F_s(\eta) = 0, \quad (\text{D.16})$$

com

$$F_s(\eta) = p^3 e^{\eta/p} \int d\chi \int d\chi_1 \int d\chi_2 \int d\chi_3 \chi^s Q(0, \chi_2) \\ \times Q(\cdot, \chi_1) \overset{\eta}{\otimes} Q(\cdot, \chi_3) \delta(\chi - \chi_1 - \chi_3 - \Upsilon \chi_2).$$

Dessa maneira, os momentos podem ser calculados iterativamente em s uma vez que,

$$\begin{aligned} F_0(\eta) &= \eta, \\ F_1(\eta) &= 2M_1 \otimes 1 + \Upsilon \eta M_1(0), \\ F_2(\eta) &= 2M_2 \otimes 1 + 4\Upsilon M_1(0) M_1 \otimes 1 + 2M_1 \otimes M_1 + \Upsilon^2 \eta M_2(0), \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

e assim por diante.

Devemos agora distinguir dois casos, dependendo se a distribuição é simétrica ou não em x .

D.4.1 Caso assimétrico

Nesta seção, calculamos o momento $M_1(\eta)$ no caso assimétrico. Este deve satisfazer a equação

$$-\left(\gamma + \frac{\eta}{p}\right) M_1 + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} M_1 + \frac{2}{p} \int_0^\eta M_1(\eta') d\eta' + \frac{\Upsilon \eta}{p} M_1(0) = 0, \quad (\text{D.18})$$

ou, diferenciando com relação a η ,

$$(1 + \eta) \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} M_1 + \left(1 - \gamma - \frac{\eta}{p}\right) \frac{\partial}{\partial \eta} M_1 - \frac{1}{p} M_1(\eta) + \frac{\Upsilon}{p} M_1(0) = 0, \quad (\text{D.19})$$

com a seguinte condição de contorno,

$$\left. \frac{\partial}{\partial \eta} M_1 \right|_{\eta=0} - \gamma M_1(0) = 0. \quad (\text{D.20})$$

Resolvendo a equação (D.19) pelo método de Frobenius, encontramos as seguintes so-

luções linearmente independentes,

$$\begin{aligned} M_1^a(\eta) &= 1 + \frac{\Upsilon + 1}{p(\gamma - 1)}\eta, \\ M_1^b(\eta) &\sim \exp\{\eta/p\}, \text{ para } \eta \gg 1. \end{aligned}$$

A solução M_1^b não possui realidade física, uma vez que ela só poderia ser originada de distribuições iniciais com χ 's muito grandes associados a grandes η 's. Portanto $M_1 \propto M_1^a$. Para que a condição (D.20) seja satisfeita, é necessário que

$$\gamma(\gamma - 1) = \frac{\Upsilon + 1}{p},$$

resultando no seguinte expoente de escala

$$\gamma_{ass} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4}{p}(1 + \Upsilon)} \right). \quad (\text{D.21})$$

A solução com $\gamma < 0$ não é física porque, tipicamente, x deve crescer sob o fluxo de renormalização.

D.4.2 Caso simétrico

Nesta seção, calculamos o momento $M_2(\eta)$ no caso em que a distribuição de x é simétrica. Pelas equações (D.16) e (D.17),

$$-\left(2\gamma + \frac{\eta}{p}\right) M_2 + (1 + \eta) \frac{\partial}{\partial \eta} M_2 + \frac{2}{p} \int_0^\eta M_2(\eta') d\eta' + \frac{\Upsilon^2}{p} \eta M_2(0) = 0, \quad (\text{D.22})$$

onde usamos que $M_s(\eta) = 0$ para s ímpar, uma vez que a distribuição é simétrica. Note que a equação (D.22) tem a mesma forma que a equação (D.18) com γ indo em 2γ e Υ indo em Υ^2 . Portanto, a solução bem comportada para M_2 é

$$M_2 = 1 + \frac{\Upsilon^2 + 1}{p(2\gamma - 1)}\eta,$$

onde

$$\gamma_{sim} = \frac{1}{4} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4}{p}(1 + \Upsilon^2)} \right). \quad (\text{D.23})$$

Apêndice E

Susceptibilidade magnética de um spin $SU(N)$

Iremos calcular a susceptibilidade magnética de um único spin $SU(N)$, \mathbf{S} , livre. O hamiltoniano que descreve o acoplamento deste com um campo magnético externo é

$$H = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = -BS^{(a)}, \quad (\text{E.1})$$

onde escolhemos sem perda de generalidade que o campo magnético \mathbf{B} está na direção indicada pela componente a do vetor de spin que, por simplicidade, escolhemos

$$S^{(a)} = S_{11} = f_1^\dagger f_1 - \frac{1}{N}. \quad (\text{E.2})$$

Lembre-se que $S_{\alpha\beta} = f_\alpha^\dagger f_\beta - \frac{1}{N}\delta_{\alpha,\beta}$, restrito a $\sum f_\alpha^\dagger f_\alpha = Q$. Para nossos propósitos, podemos desconsiderar a constante $-1/N$ na definição da matriz $S^{(a)}$ na eq. (E.2), uma vez que este representa um deslocamento global da energia (cf. eq. (E.1)). Note que a matriz $S^{(a)}$ é diagonal na base de vetores $\{|\alpha_1, \dots, \alpha_Q\rangle\}$,¹ e

$$\langle \alpha_1, \dots, \alpha_Q | S^{(a)} | \alpha_1, \dots, \alpha_Q \rangle = \sum_{i=1}^Q \delta_{1,\alpha_i},$$

além de uma constante. Portanto, a função partição é,

¹Veja a definição dessa base no apêndice C.1.

$$\mathcal{Z} = \sum_i \exp \left\{ -\frac{E_i}{T} \right\} = w_1 e^{\frac{B}{T}} + w_2,$$

onde

$$w_1 = \binom{N-1}{Q-1} \text{ e } w_2 = \binom{N}{Q} - w_1,$$

são o número de estados da base $\{|\alpha_1, \dots, \alpha_Q\rangle\}$ em que o número quântico $\alpha = 1$ está ocupado e desocupado, respectivamente. Uma vez calculada a função de partição, podemos encontrar a magnetização,

$$M(T) = T \frac{\partial}{\partial B} \ln \mathcal{Z} = \frac{1}{1 + w e^{-\frac{B}{T}}},$$

onde $w = w_2/w_1$. Dessa maneira, mostramos que a susceptibilidade magnética de um spin $SU(N)$,

$$\chi(T) = \lim_{B \rightarrow 0} = \frac{\partial}{\partial B} M = \frac{w}{(1+w)^2} \times \frac{1}{T},$$

segue uma lei de Curie.

Apêndice F

Distribuição de spins originais

Neste apêndice, calculamos o número médio de spins originais que formam um aglomerado-singlete no estado fundamental da cadeia de spins $SU(N)$ desordenada AF e ainda calculamos a distribuição do número de spins originais que formam um determinado aglomerado ativo na mesma cadeia na escala de energia Ω .

F.1 Número médio de spins em um aglomerado

O número médio de spins em um determinado aglomerado no estado fundamental, $\langle N_s \rangle$, é dado pela razão entre o número total de spins, L_0 , e o número total de dizimações em segunda ordem de teoria de perturbação que ocorreram quando toda a cadeia foi dizimada, N_{T2} . Ou seja,

$$\langle N_s \rangle = \frac{L_0}{N_{T2}}.$$

A relação entre L_0 e N_{T2} é derivada da seguinte maneira. O número médio de spins extraídos da cadeia quando N_d dizimações ocorreram é $(2p' + q') N_d$, onde p' ($q' = 1 - p'$) é a fração de dizimações em segunda (primeira) ordem. Assim que a cadeia for totalmente dizimada, $L_0 = (2p' + q') N_{Td}$, onde N_{Td} é o número total de dizimações ocorridas. Por definição, $N_{T2} = p' N_{Td}$, o que implica em

$$\langle N_s \rangle = 1 + \frac{1}{p'}.$$

Perto do ponto fixo, p' é igual à probabilidade de ocorrência de dizimações em segunda ordem de teoria de perturbação $p = 1/(N - 1)$ e, portanto, $\langle N_s \rangle \approx N$. Os erros envolvidos nessa aproximação estão relacionados ao transiente devido às correlações que surgem entre

as RI's dos spins originais e a magnitude das constantes de acoplamento, J 's, compartilhadas por eles. Se tal transiente cair exponencialmente (que é o caso), a aproximação permanece válida. Note que o efeito desse transiente sobre o número médio de spins em um aglomerado é aumentar o mesmo. Uma vez que nos primeiros estágios do fluxo de renormalização o procedimento de renormalização mais comum é o de primeira ordem, o número total de dizimações em segunda ordem N_{T2} será um pouco menor que pN_{Td} .

F.2 Distribuição do número de spins originais em um aglomerado

Seja $\rho(\zeta, t; \Gamma) d\zeta$ a probabilidade de encontrarmos, na escala de energia Γ , um aglomerado de spins formado por t spins originais cujo logaritmo da constante de acoplamento a sua direita está entre ζ e $\zeta + d\zeta$.¹

A relação de recorrência para a variável t é dada por

$$\tilde{t} = \begin{cases} t_2 + t_3, & \text{se } Q_2 + Q_3 \neq N, \\ t, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

quando a conexão “2” é dizimada. Note que, diferentemente de ζ (ver eqs. (D.3) e (D.4)), a variável t é *efetivamente* renormalizada quando da ocorrência de uma dizimação em primeira ordem de teoria de perturbação.

A equação de fluxo para a distribuição ρ é dada por

$$\frac{\partial}{\partial \Gamma} \rho(\zeta, t; \Gamma) = \frac{\partial}{\partial \zeta} \rho + q \rho^0 \overset{t}{\otimes} \rho + p \rho_\zeta^0 \rho_\zeta \overset{\zeta}{\otimes} \rho, \quad (\text{F.1})$$

com $\rho_\zeta = \rho_\zeta(\zeta; \Gamma) = \sum_t \rho(\zeta, t; \Gamma)$, $\rho^0 \overset{t}{\otimes} \rho = \sum_{t_2, t_3} \rho(0, t_2) \rho(\zeta, t_3) \delta_{t, t_2 + t_3}$, $\rho_\zeta \overset{\zeta}{\otimes} \rho = \int d\zeta_1 d\zeta_3 \rho_\zeta(\zeta_1) \rho(\zeta_3, t) \delta(\zeta - \zeta_1 - \zeta_3)$, e $\rho^0 = \rho(0, t; \Gamma)$. Procurando por soluções invariantes por reescalonamento, definimos

$$\eta = \zeta/\Gamma, \text{ and } \tau = t/\Gamma^\kappa,$$

onde κ deve ser ajustado para obtermos soluções bem comportadas. Tratando τ como uma

¹Veja a definição de ζ e Γ no apêndice D.

variável contínua, a equação de fluxo (F.1) se torna

$$\begin{aligned} \Gamma \frac{\partial}{\partial \Gamma} R &= (\kappa + 1) R + \eta \frac{\partial}{\partial \eta} R + \kappa \tau \frac{\partial}{\partial \tau} R + \frac{\partial}{\partial \eta} R \\ &+ q R^0(\cdot) \overset{\tau}{\otimes} R(\eta, \cdot) + p R_\eta^0 R_\eta(\cdot) \overset{\eta}{\otimes} R(\cdot, \tau), \end{aligned} \quad (\text{F.2})$$

onde o primeiro, o segundo e o terceiro termos do lado direito da eq. (F.2) vêm do termo $\partial \rho / \partial \Gamma$ e o lado esquerdo deve ser igual a zero no ponto fixo. Fazendo a transformada de Laplace em τ ,

$$\hat{R}(\eta, \lambda) \equiv \int_0^\infty e^{-\lambda \tau} R(\eta, \tau) d\tau,$$

encontramos que

$$\begin{aligned} 0 &= \hat{R} + (\eta + 1) \frac{\partial}{\partial \eta} \hat{R} - \kappa \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{R} + q \hat{R}(0, \lambda) \hat{R}(\eta, \lambda) \\ &+ p \hat{R}(0, 0) \hat{R}(\cdot, 0) \overset{\eta}{\otimes} \hat{R}(\cdot, \lambda), \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

uma vez que $R_\eta = \hat{R}(\eta, 0)$ e o termo de convolução é denotado por $\hat{R}(\cdot, 0) \overset{\eta}{\otimes} \hat{R}(\cdot, \lambda) = \int d\eta_1 d\eta_2 \hat{R}(\eta_1, 0) \hat{R}(\eta_2, \lambda) \delta(\eta - \eta_1 - \eta_2)$. Depois de algumas inspeções, concluímos que a eq. (F.3) deve ter uma solução da forma

$$\hat{R}(\eta, \lambda) = \frac{1}{p} \exp \{ f(\lambda) - \eta/p \}.$$

Note que $\hat{R}(\eta, \lambda) = \hat{R}_\eta(\eta) \hat{R}_\lambda(\lambda)$ é separável e isto é reflexo do fato de que não existe nenhuma correlação entre a magnitude das constantes de acoplamento \tilde{J} e o número original de spins \tilde{t} que constitui o aglomerado de spin adjacentes a elas. Dessa maneira, a distribuição de ponto fixo pode ser facilmente obtida a partir da eq. (F.1) supondo que

$$\rho(\zeta, t; \Gamma) = \rho_\zeta(\zeta; \Gamma) \rho_t(t; \Gamma),$$

o que nos leva a

$$\Gamma \frac{\partial}{\partial \Gamma} \rho_t(t; \Gamma) = -\frac{q}{p} \left[\rho_t - \rho_t \overset{t}{\otimes} \rho_t \right], \quad (\text{F.4})$$

onde usamos que $\rho_\zeta = \rho_\zeta^*$ da eq. (D.9). Logo,

$$\rho_t(t; \Gamma) \approx \Gamma^{-\kappa} \exp \{ -t \Gamma^{-\kappa} \},$$

com $\kappa = q/p = N - 2$. Dizemos que esse resultado é uma aproximação porque t foi tratado como uma variável contínua para resolver a eq. (F.4).

Podemos agora calcular a probabilidade de encontrar um aglomerado ativo composto por t spins originais, m_Ω , na escala de energia Γ . Esta é dada por

$$m_\Omega = \bar{t}n_\Omega = n_\Omega^{2/N}, \quad (\text{F.5})$$

onde $\bar{t} = \Gamma^\kappa$ está relacionado com a fração de aglomerados de spins ativos, n_Ω , pela eq. (4.23). Na verdade, $\bar{t} = \Gamma^\kappa$ é um *resultado exato* que pode ser obtido operando com $\sum_t t$ em ambos os lados da eq. (F.4) e tratando t como uma variável discreta. O resultado da eq. (F.5) é o que estamos procurando para o cálculo da função correlação média, eq. (4.30).

Há uma outra maneira interessante de derivar o resultado da eq. (F.5). Esta vem do fato de que a renormalização da variável t se dá independentemente da renormalização da variável ζ . Do ponto de vista da variável t , o procedimento de renormalização pode ser resumido da seguinte maneira. Escolhe-se arbitrariamente um par de spins vizinhos na cadeia, e com probabilidade p retira-se esse par do sistema, ou com probabilidade $q = 1 - p$, junta-se o par em um novo spin efetivo composto pela soma dos spins originais que formavam o par. Note que um aglomerado de spins composto por um número enorme de spins originais não é menos provável de ser dizimado, uma vez que as constantes de acoplamento que o cercam foram dizimadas em primeira ordem de teoria de perturbação, e portanto, suas magnitudes não são tipicamente menores que as das demais. Resumindo o procedimento de renormalização dessa maneira, podemos escrever uma equação de fluxo para ρ_t em função da fração de aglomerados de spins ativos n_Γ .

Seja $M_S(t; n_\Gamma)$ o número total de aglomerados de spins compostos por t spins originais na escala de densidade n_Γ . Então, quando se abaixa n_Γ uma fração dn_Γ , M_s muda da seguinte maneira

$$M_S(t; n_\Gamma - dn_\Gamma) = M_S(t; n_\Gamma) + T_1 + T_2, \quad (\text{F.6})$$

onde T_1 e T_2 são os funcionais que mudam M_S quando das dizimações em primeira e segunda ordem, respectivamente. No caso das dizimações em segunda ordem, T_2 somente extrai de M_S o número correspondente de aglomerados quando $n_\Gamma \rightarrow n_\Gamma - dn_\Gamma$, então

$$T_2 = -2p \frac{M_S(t; n_\Gamma)}{M(n_\Gamma)} dN_{diz},$$

onde $M(n_\Gamma) = \sum_t M_S(t; n_\Gamma) = n_\Gamma L_0$ é o número total de aglomerados de spins ativos na

escala n_Γ , e dN_{diz} é o número total de dizimações ocorridas quando $n_\Gamma \rightarrow n_\Gamma - dn_\Gamma$. Este último está relacionado a dn_Γ através de $dM = (2p + q) dN_{diz}$, onde dM é o número total médio de aglomerados *removidos* do sistema quando dN_{diz} dizimações ocorreram.

Por outro lado, além de remover os aglomerados de spins correspondentes, T_1 insere um novo aglomerado composto por $t = t_2 + t_3$ spins, supondo que a conexão “2” é aquela a ser dizimada. Dessa forma,

$$T_1 = q \left(-2 \frac{M_S}{M} + \sum_{t_2, t_3} \frac{M_S(t_2) M_S(t_3)}{M^2} \delta_{t, t_2 + t_3} \right) dN_{diz},$$

tornando a equação de fluxo (F.6) igual a

$$n_\Gamma \frac{\partial}{\partial n_\Gamma} \rho_t(t; n_\Gamma) = \frac{q}{1+p} \left[\rho_t - \rho_t \otimes^t \rho_t \right],$$

onde usamos que $\rho_t(t; n_\Gamma) M(n_\Gamma) = M_S(t; n_\Gamma)$. Como $n_\Gamma \sim \Gamma^{-1/\psi}$ (ver eq. (4.23)), recuperamos a equação de fluxo (F.4) e, conseqüentemente, os demais resultados.

Apêndice G

Modelo de Hubbard de duas bandas

Neste apêndice, deduzimos o hamiltoniano efetivo do modelo de Hubbard unidimensional com dupla degenerescência orbital no limite fortemente interagente.

Partimos do hamiltoniano correspondente (5.1). No limite $U \gg t$ e no preenchimento $1/4$, o estado fundamental não perturbado é aquele em que há um elétron por sítio, e a degenerescência deste é igual a 4^{L_0} , onde L_0 é o número de sítios. Para que haja condução, é necessário que um elétron tunele para o sítio vizinho. Como $U \gg t$, a configuração final é energeticamente desfavorável. Neste caso, dizemos que o sistema é um isolante de Mott.

Tratando H_t em primeira ordem de teoria de perturbação,

$$\langle \psi_{0l} | H_t | \psi_{0m} \rangle = 0,$$

onde $|\psi_{0l}\rangle$ é um dos 4^{L_0} estados fundamentais degenerados e não obtemos nenhuma correção. Isto porque H_t só “liga” os estados $|\psi_0\rangle$ com estados em que há uma dupla ocupação vizinha a uma vacância. Devemos então tratar H_t em segunda ordem de teoria de perturbação,

$$H_{l,m}^{ef} = \sum_{k \neq 0} \frac{\langle \psi_{0l} | H_t | \psi_k \rangle \langle \psi_k | H_t | \psi_{0m} \rangle}{E_0 - E_k}, \quad (\text{G.1})$$

onde E_k é a energia não perturbada do estado $|\psi_k\rangle$. Como não há correções em primeira ordem, e H_t só “conecta” os estados $|\psi_0\rangle$ com aqueles em que há uma única dupla ocupação vizinha a uma vacância (cuja energia não perturbada é igual a U), o hamiltoniano efetivo

(G.1) torna-se

$$\begin{aligned}
H_{l,m}^{ef} &= -\frac{1}{U} \sum_{k \neq 0} \langle \psi_{0l} | H_t | \psi_k \rangle \langle \psi_k | H_t | \psi_{0m} \rangle, \\
&= -\frac{1}{U} \langle \psi_{0l} | H_t \left(\sum_k | \psi_k \rangle \langle \psi_k | \right) H_t | \psi_{0m} \rangle, \\
&= -\frac{1}{U} \langle \psi_{0l} | H_t^2 | \psi_{0m} \rangle, \\
&= -\frac{t^2}{U} \left\langle \psi_{0l} \left| \sum c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i+1,\alpha,\sigma} c_{j,\beta,\tau}^\dagger c_{j+1,\beta,\tau} + \dots \right| \psi_{0m} \right\rangle.
\end{aligned}$$

Nesta última linha, devemos considerar somente os termos não nulos. Note que o primeiro e o último termos são nulos, pois estes correspondem a termos do tipo $c_i^\dagger c_{i+1} c_j^\dagger c_{j+1}$ (onde estamos suprimindo os demais índices por simplicidade) que só não são nulos se $i = j + 1$ e $i + 1 = j$, o que é impossível. O segundo e terceiro termos são do tipo $c_i^\dagger c_{i+1} c_{j+1}^\dagger c_j$, que não é nulo se e somente se $i = j$. Dessa maneira, o hamiltoniano efetivo simplifica em

$$\begin{aligned}
H_{l,m}^{ef} &= -\frac{2t^2}{U} \left\langle \psi_{0l} \left| \sum c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i+1,\alpha,\sigma} c_{i+1,\beta,\tau}^\dagger c_{i,\beta,\tau} \right| \psi_{0m} \right\rangle, \\
&= -\frac{2t^2}{U} \left\langle \psi_{0l} \left| \sum c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i,\beta,\tau} \left(\delta_{\alpha,\beta} \delta_{\sigma,\tau} - c_{i+1,\beta,\tau}^\dagger c_{i+1,\alpha,\sigma} \right) \right| \psi_{0m} \right\rangle, \\
&= -\frac{2t^2}{U} \sum_i \left\langle \psi_{0l} \left| 1 - \sum c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i,\beta,\tau} c_{i+1,\beta,\tau}^\dagger c_{i+1,\alpha,\sigma} \right| \psi_{0m} \right\rangle, \\
&= \text{cte} + \frac{2t^2}{U} \sum \left\langle \psi_{0l} \left| c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i,\beta,\tau} c_{i+1,\beta,\tau}^\dagger c_{i+1,\alpha,\sigma} \right| \psi_{0m} \right\rangle, \tag{G.2}
\end{aligned}$$

onde o termo constante pode ser negligenciado.

O grande desafio agora é relacionar o hamiltoniano efetivo (G.2) com os operadores de spin, \mathbf{S}_i , e isospin \mathbf{T}_i , definidos na eq. (5.3). Depois de uma exaustiva álgebra, chega-se a

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha,\beta,\sigma,\tau} \left\langle \psi_{0l} \left| c_{i,\alpha,\sigma}^\dagger c_{i,\beta,\tau} c_{i+1,\beta,\tau}^\dagger c_{i+1,\alpha,\sigma} \right| \psi_{0m} \right\rangle &= \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1} \\
&\quad + 4 (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}) (\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1}) \\
&\quad + \frac{1}{4} \sum n_{i,\alpha,\sigma} n_{i+1,\beta,\tau},
\end{aligned}$$

onde este último termo, no preenchimento 1/4, é constante e igual a 1/4. Com este resultado recuperamos o hamiltoniano efetivo (5.2).

Antes de concluir esse apêndice, queremos mostrar como o termo

$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1})$ se torna quártico nos operadores c 's. Para tal, considere a primeira parcela desse termo

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1}) &= \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + \text{h.c.}) + S_i^z S_{i+1}^z \right] \\ &\quad \times \left[\frac{1}{2} (T_i^+ T_{i+1}^- + \text{h.c.}) + T_i^z T_{i+1}^z \right], \end{aligned}$$

que é proporcional a $S_i^+ S_{i+1}^- T_i^+ T_{i+1}^-$. Em função dos operadores c 's,

$$S_i^+ S_{i+1}^- T_i^+ T_{i+1}^- = \sum c_{i,\alpha,+}^\dagger c_{i,\alpha,-} c_{i,1,\sigma}^\dagger c_{i,2,\sigma} c_{i+1,\beta,-}^\dagger c_{i+1,\beta,+} c_{i+1,2,\tau}^\dagger c_{i+1,1,\tau}.$$

Foquemos nossa atenção nos operadores referente ao sítio i ,

$$\begin{aligned} \sum c_{i,\alpha,+}^\dagger c_{i,\alpha,-} c_{i,1,\sigma}^\dagger c_{i,2,\sigma} &= \sum c_{i,\alpha,+}^\dagger \left(\delta_{\alpha,1} \delta_{\sigma,-} - c_{i,1,\sigma}^\dagger c_{i,\alpha,-} \right) c_{i,2,\sigma}, \\ &= c_{i,1,+}^\dagger c_{i,2,-}, \end{aligned}$$

onde na segunda passagem usamos o fato de que $c_{i,\alpha,-} c_{i,2,\sigma} = 0$ no preenchimento em questão. Analogamente para os operadores referente ao sítio $i+1$, encontramos que

$$S_i^+ S_{i+1}^- T_i^+ T_{i+1}^- = c_{i,1,+}^\dagger c_{i,2,-} c_{i+1,2,-}^\dagger c_{i+1,1,+},$$

que é quártico nos operadores c 's. O mesmo raciocínio é válido para as outras parcelas do termo $(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})(\mathbf{T}_i \cdot \mathbf{T}_{i+1})$ que é inteiramente quártico nos operadores de criação e aniquilação de férmions.

Apêndice H

Matrizes do grupo SU(4)

Neste apêndice, construímos as matrizes geradoras das 3 representações irredutíveis totalmente anti-simétricas do grupo SU(4). Estas são a RI fundamental, auto-conjugada e anti-fundamental que correspondem às tabelas de Young formadas por uma, duas e três caixas concatenadas verticalmente, respectivamente. Nosso ponto de partida será a escolha conveniente de um conjunto de matrizes com a simetria do problema que temos interesse, que é dada pelo hamiltoniano

$$H = 4 \sum_i J_i [\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} + \mathbf{t}_i \cdot \mathbf{t}_{i+1} + 4 (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1}) (\mathbf{t}_i \cdot \mathbf{t}_{i+1})], \quad (\text{H.1})$$

onde \mathbf{s} e \mathbf{t} são operadores de spins-1/2 usuais. Uma escolha conveniente para as matrizes da representação fundamental é $A^\gamma = 4s^\alpha t^\beta, 2s^\alpha, 2t^\alpha$, com $\alpha, \beta = x, y, z$ [Arovas 1995]. Definindo os vetores

$$\begin{aligned} |1\rangle_f &= |+, +\rangle, & |2\rangle_f &= |-, +\rangle, \\ |3\rangle_f &= |+, -\rangle, & |4\rangle_f &= |-, -\rangle, \end{aligned}$$

onde $|\pm, \pm\rangle = |\pm\rangle \otimes |\pm\rangle$ são os auto-vetores dos operadores de spin s^z e t^z , as matrizes da representação fundamental são escritas como,

$$\begin{aligned}
A^1 &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^x \\ \sigma^x & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & A^2 &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\sigma^x \\ \sigma^x & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & A^3 &= \begin{pmatrix} \sigma^x & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\sigma^x \end{pmatrix}, \\
A^4 &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^y \\ \sigma^y & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & A^5 &= -i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^y \\ \sigma^y & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & A^6 &= \begin{pmatrix} \sigma^y & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\sigma^y \end{pmatrix}, \\
A^7 &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^z \\ \sigma^z & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & A^8 &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\sigma^z \\ \sigma^z & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & A^9 &= \begin{pmatrix} \sigma^z & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\sigma^z \end{pmatrix}, \\
A^{10} &= \begin{pmatrix} \sigma^x & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^x \end{pmatrix}, & A^{11} &= \begin{pmatrix} \sigma^y & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^y \end{pmatrix}, & A^{12} &= \begin{pmatrix} \sigma^z & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^z \end{pmatrix}, \\
A^{13} &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & A^{14} &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & A^{15} &= \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{H.2}$$

onde σ^γ , $\gamma = x, y, z$ são as matrizes de Pauli, $\mathbf{0}$ e $\mathbf{1}$ são as matrizes nula e identidade de ordem 2×2 , respectivamente. Dessa maneira, o hamiltoniano (H.1) torna-se

$$H = \sum_i J_i \mathbf{A}_i \cdot \mathbf{A}_{i+1}.$$

Para construir a representação auto-conjugada, devemos diagonalizar o hamiltoniano

$$H_1 = \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{A}_2 = \sum_\gamma A_1^\gamma A_2^\gamma.$$

Conforme a série de Clebsh-Gordan,

$$\square \otimes \square = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \square \square,$$

o hamiltoniano H_1 tem dois níveis, o primeiro com degenerescência $g = 6$ e o segundo com degenerescência $g = 10$. As matrizes geradoras da representação auto-conjugada são construídas projetando $\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2$ no sub-espço de degenerescência $g = 6$. Diagonalizando H_1 , os 6 estados degenerados correspondentes à representação auto-conjugada são (negligenciando

o fator $\sqrt{2}$ devido a normalização),¹

$$\begin{aligned} |1\rangle_{ac} &= |3, 4\rangle_f - |4, 3\rangle_f, & |2\rangle_{ac} &= |2, 4\rangle_f - |4, 2\rangle_f, & |3\rangle_{ac} &= |1, 4\rangle_f - |4, 1\rangle_f, \\ |4\rangle_{ac} &= |2, 3\rangle_f - |3, 2\rangle_f, & |5\rangle_{ac} &= |1, 3\rangle_f - |3, 1\rangle_f, & |6\rangle_{ac} &= |1, 2\rangle_f - |2, 1\rangle_f, \end{aligned}$$

com auto-energia igual a $E_{ac} = -5$. A energia dos outros 10 estados é igual a $E_{ex} = 3$, e os respectivos auto-vetores podem ser calculados simetrizando os índices j, k nos estados $|j\rangle \otimes |k\rangle = |j, k\rangle$. Note que a escolha das matrizes da RI fundamental não obedece à normalização da eq. (A.2) e, portanto a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro excitado não é mais dada pela eq. (4.7). A equação deve ser modificada por um simples fator numérico que é obtido a partir do reescalonamento do casimir dessas tabelas na eq. (B.2). Deixamos ao leitor a tarefa de rededuzir essas equações.

Projetando $\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2$ no sub-espço $|j\rangle_{ac}$, obtêm-se as seguintes matrizes (6x6) da representação auto-conjugada,

¹Esses estados são facilmente obtidos pelas regras de construção de tabelas de Young (ver refs. [Jones 1990, Cheng 1988]). Simplesmente, anti-simetrizam-se os números quânticos correspondentes.

$$\begin{aligned}
B^1 &= \begin{pmatrix} \sigma^x & \mathbf{0} & -\mathbf{1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} & \sigma^x \end{pmatrix}, & B^2 &= - \begin{pmatrix} \sigma^y & \mathbf{0} & \mathbf{i} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{i} & \mathbf{0} & \sigma^y \end{pmatrix}, \\
B^3 &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^7 & \mathbf{0} \\ \sigma^8 & \mathbf{0} & -\sigma^6 \\ \mathbf{0} & -\sigma^5 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & B^4 &= \begin{pmatrix} \sigma^y & \mathbf{0} & -\mathbf{i} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{i} & \mathbf{0} & \sigma^y \end{pmatrix}, \\
B^5 &= \begin{pmatrix} \sigma^y & \mathbf{0} & -\mathbf{i} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{i} & \mathbf{0} & \sigma^y \end{pmatrix}, & B^6 &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^7 & \mathbf{0} \\ -\sigma^8 & \mathbf{0} & -\sigma^6 \\ \mathbf{0} & \sigma^5 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \\
B^7 &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^1 & \mathbf{0} \\ \sigma^2 & \mathbf{0} & -\sigma^4 \\ \mathbf{0} & -\sigma^3 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & B^8 &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^1 & \mathbf{0} \\ -\sigma^2 & \mathbf{0} & -\sigma^4 \\ \mathbf{0} & \sigma^3 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & (H.3) \\
B^9 &= 2 \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^z & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & B^{10} &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^3 & \mathbf{0} \\ \sigma^4 & \mathbf{0} & \sigma^2 \\ \mathbf{0} & \sigma^1 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \\
B^{11} &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^3 & \mathbf{0} \\ -\sigma^4 & \mathbf{0} & \sigma^2 \\ \mathbf{0} & -\sigma^1 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & B^{12} &= 2 \begin{pmatrix} -\sigma^9 & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \sigma^{10} \end{pmatrix}, \\
B^{13} &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^5 & \mathbf{0} \\ \sigma^6 & \mathbf{0} & -\sigma^8 \\ \mathbf{0} & \sigma^7 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & B^{14} &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^5 & \mathbf{0} \\ -\sigma^6 & \mathbf{0} & -\sigma^8 \\ \mathbf{0} & -\sigma^7 & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \\
B^{15} &= 2 \begin{pmatrix} -\sigma^{10} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \sigma^9 \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

onde $\mathbf{i} = i\mathbf{1}$, $\sigma^\pm = (\sigma^x \pm i\sigma^y)/2$, $\sigma^1 = \sigma^9 + \sigma^+$, $\sigma^2 = \sigma^9 + \sigma^-$, $\sigma^3 = \sigma^{10} + \sigma^-$, $\sigma^4 = \sigma^{10} + \sigma^+$, $\sigma^5 = \sigma^9 - \sigma^+$, $\sigma^6 = \sigma^9 - \sigma^-$, $\sigma^7 = -\sigma^{10} + \sigma^-$, $\sigma^8 = -\sigma^{10} + \sigma^+$, $\sigma^9 = (\mathbf{1} + \sigma^z)/2$, $\sigma^{10} = (\mathbf{1} - \sigma^z)/2$.

Para construirmos as matrizes da representação antifundamental, devemos diagonalizar

$$H_2 = \mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{B}_2 = \sum_{\gamma} A_1^{\gamma} B_2^{\gamma},$$

que pela série de Clebsh-Gordan,

$$\square \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array},$$

possui dois níveis com degenerescências $g = 4$ e $g = 20$ cujas energias são $E_0 = -10$ e $E_{ex} = 2$, respectivamente. Os estados correspondentes ao multipletto fundamental são (negligenciando os fatores de normalização),

$$\begin{aligned} |1\rangle_{af} &= |1\rangle \otimes |2\rangle_{ac} - |2\rangle \otimes |3\rangle_{ac} + |4\rangle \otimes |6\rangle_{ac} = \mathcal{A}_{1,2,4} |1\rangle_f \otimes |2\rangle_f \otimes |4\rangle_f, \\ |2\rangle_{af} &= |1\rangle \otimes |4\rangle_{ac} - |2\rangle \otimes |5\rangle_{ac} + |3\rangle \otimes |6\rangle_{ac} = \mathcal{A}_{1,2,3} |1\rangle_f \otimes |2\rangle_f \otimes |3\rangle_f, \\ |3\rangle_{af} &= |1\rangle \otimes |1\rangle_{ac} - |3\rangle \otimes |3\rangle_{ac} + |4\rangle \otimes |5\rangle_{ac} = \mathcal{A}_{1,3,4} |1\rangle_f \otimes |3\rangle_f \otimes |4\rangle_f, \\ |4\rangle_{af} &= |2\rangle \otimes |1\rangle_{ac} - |3\rangle \otimes |2\rangle_{ac} + |4\rangle \otimes |4\rangle_{ac} = \mathcal{A}_{2,3,4} |2\rangle_f \otimes |3\rangle_f \otimes |4\rangle_f, \end{aligned}$$

onde $\mathcal{A}_{i,j,k}$ é o operador anti-simetrizador dos índices i, j, k .

Projetando $\mathbf{A}_1 + \mathbf{B}_2$ no sub-espaco fundamental, encontramos as seguintes matrizes da representação antifundamental,

$$\begin{aligned} C^1 &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^x \\ \sigma^x & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & C^2 &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & C^3 &= \begin{pmatrix} -\sigma^x & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^x \end{pmatrix}, \\ C^4 &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^z \\ -\sigma^z & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & C^5 &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^z \\ \sigma^z & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & C^6 &= \begin{pmatrix} \sigma^y & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^y \end{pmatrix}, \\ C^7 &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\sigma^y \\ \sigma^y & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & C^8 &= - \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^y \\ \sigma^y & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & C^9 &= \begin{pmatrix} \sigma^z & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^z \end{pmatrix}, \\ C^{10} &= \begin{pmatrix} \sigma^x & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^x \end{pmatrix}, & C^{11} &= \begin{pmatrix} -\sigma^y & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \sigma^y \end{pmatrix}, & C^{12} &= \begin{pmatrix} \sigma^z & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\sigma^z \end{pmatrix}, \\ C^{13} &= - \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^x \\ \sigma^x & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & C^{14} &= i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^x \\ -\sigma^x & \mathbf{0} \end{pmatrix}, & C^{15} &= \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{H.4}$$

Dessa forma, construímos todas as matrizes das representações irredutíveis totalmente anti-simétricas do grupo SU(4).

Apêndice I

Emaranhamento de duas partículas de spins-1/2 em um singleto

Seja ρ a matriz densidade de um sistema de 2 partículas de spins-1/2 em estado de singleto,

$$\rho = |s\rangle\langle s|,$$

onde $|s\rangle = (|+, -\rangle - |-, +\rangle) / \sqrt{2}$ é o estado singleto e $|\sigma_z^1, \sigma_z^2\rangle = |\sigma_z^1\rangle_1 \otimes |\sigma_z^2\rangle_2$. Traçando a partícula 2, construímos a matriz densidade reduzida ρ_1 da partícula 1,

$$\rho_1 = \frac{1}{2} (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|)_1.$$

Dessa maneira a entropia de ρ_1 é igual a

$$S = -\text{tr} \rho_1 \log_2 \rho_1 = -2 \times \frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} = 1.$$

Portanto o emaranhamento de uma partícula de spin-1/2 com a sua parceira em um estado de singleto é igual a 1, como era esperado, uma vez que $|s\rangle$ é um estado de Bell.

Referências Bibliográficas

- [AKLT 1987] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Takasi, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [Affleck 1991] I. Affleck, D. P. Arovas, J. B. Marston, and D. A. Rabson, Nucl. Phys. B **366**, 467 (1991).
- [Arovas 1995] D. P. Arovas, and A. Auerbach, Phys. Rev. B **52**, 10114 (1995).
- [Azaria 1999] P. Azaria, A. O. Gogolin, P. Lecheminant, and A. A. Nersesyan, Phys. Rev. Lett. **83**, 624 (1999).
- [Azuma 1997] M. Azuma, Y. Fujishiro, M. Takano, M. Nohara, and H. Takagi, Phys. Rev. B **55**, R8658 (1997); M. Azuma, M. Takano, and R. S. Eccleston cond-mat/9706170.
- [Bethe 1931] H. Bethe, Z. Physik **71**, 205 (1931); veja também a ref. [Fradkin 1991].
- [Bhatt 1982] R. N. Bhatt, and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **48**, 344 (1982).
- [Boechat 1996] B. Boechat, A. Saguia, and M. A. Continentino, Solid State Commun. **98**, 411 (1996).
- [Bonner 1964] J. C. Bonner, and M. E. Fisher, Phys. Rev. **135**, A640 (1964).
- [Bulaesvkii 1972] L. N. Bulaesvkii, A. V. Zvarykina, Yu. S. Karimov, R. B. Lyubovskii, and I. F. Shcheglov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **62**, 725 (1972) [Sov. Phys. JETP **35**, 384 (1972)].
- [Carlon 2004] E. Carlon, P. Lajkó, H. Rieger, and F. Iglói, Phys. Rev. B **69**, 144416 (2004).

- [Cheng 1988] Para uma introdução em teoria de grupos e tabelas de Young, veja T.-P. Cheng, and L.-F. Li, *Gauge theory of elementary particle physics* (Oxford University Press, New York, 1988), cap. 4.
- [Coleman 2000] P. Coleman, C. Pépin, and A. M. Tsvelik, *Phys. Rev. B* **62**, 3852 (2000).
- [Continentino 2005] Magnetism in highly anisotropic borates: experiment and theory, M. A. Continentino, J. C. Fernandes, R. B. Guimarães, B. Boechat, and A. Saguia, in *Frontiers in Magnetic Materials*, pp. 385-410 (Ed. A. V. Narlikar, Springer, 2005).
- [Coqblin 1969] B. Coqblin, and J. B. Schrieffer, *Phys. Rev.* **185**, 847 (1969).
- [Damle 2002a] K. Damle, *Phys. Rev. B* **66**, 104425 (2002).
- [Damle 2002b] K. Damle, and D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 277203 (2002).
- [Doty 1992] C. A. Doty, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **45**, 2167 (1992).
- [Fisher 1974] M. E. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 597 (1974).
- [Fisher 1992] D. S. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 534 (1992); *ibid*, *Phys. Rev. B* **51**, 6411 (1995).
- [Fisher 1994] D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **50**, 3799 (1994).
- [Fradkin 1991] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems* (Addison-Wesley, Redwood City, CA, 1991).
- [Haldane 1983] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983); *Phys. Lett. A* **93**, 464 (1983). Veja também a ref. [Fradkin 1991].
- [Haldane 1982] F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. B* **25**, 4925 (1982). Veja também S. Eggert, and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **54**, 9612 (1996), para um cálculo mais preciso de Λ_c .
- [Henelius 1998] P. Henelius, and S. M. Girvin, *Phys. Rev. B*, **57**, 11457 (1998).
- [Hida 1992] K. Hida, *Phys. Rev. B*, **45**, 2207 (1992).

- [Hikihara 1999] T. Hikihara, A. Furusaki, and M. Sigrist, Phys. Rev. B, **60**, 12116 (1999).
- [Holzhey 1994] C. Holzhey, F. Larsen, and F. Wilczek, Nucl. Phys. **B424**, 443 (1994).
- [Hoyos 2004a] J. A. Hoyos, and E. Miranda, Phys. Rev. B, **69**, 214411 (2004).
- [Hoyos 2004b] J. A. Hoyos, and E. Miranda, Phys. Rev. B, **70**, 180401(R) (2004).
- [Hoyos 2005] J. A. Hoyos, and E. Miranda, em processo final de edição.
- [Hung 2004] H.-H. Hung, and C.-D. Gong, cond-mat/0408690.
- [Hyman 1996] R. A. Hyman, K. Yang, R. N. Bhatt, and S. M. Girvin, Phys. Rev. Lett. **76**, 839 (1996).
- [Hyman 1997] R. A. Hyman, and K. Yang, Phys. Rev. Lett. **78**, 1783 (1997).
- [Iglói 2001] F. Iglói, R. Juhász, and P. Lajkó, Phys. Rev. Lett. **86**, 1343 (2001); F. Iglói, Phys. Rev. B **65**, 064416 (2002).
- [Iglói 2005] F. Iglói, and C. Monthus, Phys. Rep. **412**, 277-433 (2005).
- [Jones 1990] Para uma revisão em teoria de grupos e tabelas de Young, veja H. F. Jones, *Groups, Representations and Physics* (IOP, Bristol, 1990), cap. 8.
- [Kolezhuk 1998] A. K. Kolezhuk, and H. J. Mikeska, Phys. Rev. Lett. **80**, 2709 (1998).
- [Laflorencie 2003] N. Laflorencie, and H. Rieger, Phys. Rev. Lett. **91**, 229701 (2003).
- [Laflorencie 2004] N. Laflorencie, H. Rieger, A. W. Sandvik, and P. Henelius, Phys. Rev. B **70**, 054430 (2004).
- [Laflorencie, 2005] N. Laflorencie, preprint cond-mat/054446.
- [Landau 1959] L. D. Landau, and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamom, London, 1959), página 482.

- [Li 1998] Y. Q. Li, M. Ma, D. N. Shi, and F. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3527 (1998).
- [LSM 1961] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys.* **16**, 407 (1961).
- [Lin 2003] Y.-C. Lin, R. Mélin, H. Rieger, and F. Iglói, *Phys. Rev. B* **68**, 024424 (2003).
- [MDH 1979] S. K. Ma, C. Dasgupta, and C.-K. Hu, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1434 (1979); C. Dasgupta, and S. K. Ma, *Phys. Rev. B* **22**, 1305 (1980).
- [Masuda 2004] T. Masuda, A. Zheludev, K. Uchinocura, J.-H. Chung, and S. Park, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 077206 (2004).
- [McCoy 1968] B. M. McCoy, and T. T. Wu, *Phys. Rev.* **176**, 631 (1968); *ibid*, **188**, 982 (1969); B. M. McCoy **188**, 1014 (1969).
- [Monthus 1997] C. Monthus, O. Golinelli, and Th. Jolicœur, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3254 (1997); *ibid*, *Phys. Rev. B* **58**, 805 (1998).
- [Mélin 2002] R. Mélin, Y.-C. Lin, P. Lajkó, H. Rieger, and F. Iglói, *Phys. Rev. B* **65**, 104415 (2002).
- [Miranda 2003] E. Miranda, *Braz. J. Phys.* **33**, 3 (2003).
- [Nguyen 1994] T. N. Nguyen, D. M. Giaquinta, and H.-C. zur Loye, *Chem. Mater.* **6**, 1642 (1994); T. N. Nguyen, and H.-C. zur Loye, *J. Solid State Chem.* **117**, 300 (1995).
- [Nguyen 1996] T. N. Nguyen, P. A. Lee, and H.-C. zur Loye, *Science* **271**, 489 (1996).
- [Nijs 1989] M. den Nijs, and K. Rommelse, *Phys. Rev. B*, **40**, 4709 (1989).
- [Onufriev 1999] A. V. Onufriev, and J. B. Marston, *Phys. Rev. B* **59**, 12573 (1999).
- [Pati 1998] S. K. Pati, R. R. P. Singh, and D. I. Khomskii, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 5406 (1998).
- [Read 1989] N. Read, S. Sachdev, *Nucl. Phys. B* **316**, 609, (1989).

- [Refael 2002] G. Refael, S. Kehrein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **66**, 060402(R) (2002).
- [Refael 2004] G. Refael, and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 260602 (2004).
- [Rieger 1999] H. Rieger, and F. Iglói, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3741 (1999); Y.-C. Lin, H. Rieger, and F. Iglói, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 1602 (2004).
- [Sachdev 1999] S. Sachdev, *Quantum phase transitions* (Cambridge University Press, UK, 1999).
- [Sagua 2002] A. Saguia, B. Boechat, and M. A. Continentino, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 117202 (2002).
- [Sagua 2003] A. Saguia, B. Boechat, and M. A. Continentino, *Phys. Rev. B* **68**, 020403(R) (2003).
- [Sakurai 1985] Veja por exemplo, J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Benjamin/Cummings, Menlo Park, 1985), p. 238.
- [Schegolev 1972] I. F. Schegolev, *Phys. Status Solidi* **12**, 9 (1972); L. J. Azevedo, and W. G. Clark, *Phys. Rev. B* **16**, 3252 (1977).
- [Sutherland 1975] B. Sutherland, *Phys. Rev. B* **12**, 3795 (1975).
- [Theodorou 1976] G. Theodorou, and M. H. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 1014 (1976); G. Theodorou, *Phys. Rev. B* **16**, 2264 (1977); S. Alexander, and J. Bernasconi, *J. Phys. C* **12**, L1 (1979); W. G. Clark, and L. C. Tippie, *Phys. Rev. B* **20**, 2974 (1979).
- [Westerberg 1995] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4302 (1995); *ibid*, *Phys. Rev. B* **55**, 12578 (1997).
- [White 1996a] S. R. White, *Phys. Rev. B* **53**, 52 (1996).
- [White 1996b] S. R. White, and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **54**, 9862 (1996).
- [Wilson 1974/75] K. G. Wilson, and J. Kogut, *Phys. Rep.* **12C**, 75 (1974); K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773 (1975).

- [Yamashita 1998] Y. Yamashita, N. Shibata, and K. Ueda, Phys. Rev. B **58**, 9114 (1998).
- [Yang 1996] K. Yang, R. A. Hyman, R. N. Bhatt, and S. M. Girvin, J. Appl. Phys. **79**, 5096 (1996).
- [Yusuf 2002] E. Yusuf, and K. Yang, Phys. Rev. B **65**, 224428 (2002).
- [Yusuf 2003] E. Yusuf, and K. Yang, Phys. Rev. B **68**, 024423 (2003).
- [Zamolodchikov 1987] A. B. Zamolodchikov, Sov. J. Nucl. Phys. **46**, 1090 (1987); Yad. Fiz. **46**, 1819 (1987).