



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN

Luiz Filipe Campos Faria

Transporte em cadeias de spin desordenadas

Campinas
2019

LUIZ FILIPE CAMPOS FARIA

Transporte em cadeias de spin desordenadas

*Tese apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin
da Universidade Estadual de Campinas como parte dos
requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor
em Ciências.*

Orientador: Eduardo Miranda

Este exemplar corresponde à versão final da
tese defendida pelo aluno Luiz Filipe Cam-
pos Faria, e orientada pelo Prof. Dr. Eduardo
Miranda.

Campinas
2019

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin
Lucimeire de Oliveira Silva da Rocha - CRB 8/9174

F225t Faria, Luiz Filipe Campos, 1993-
Transporte em cadeias de spin desordenadas / Luiz Filipe Campos Faria. –
Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: Eduardo Miranda.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física
Gleb Wataghin.

1. Cadeias de spin. 2. Sistemas desordenados. 3. Transporte de spin. I.
Miranda, Eduardo, 1963-. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de
Física Gleb Wataghin. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Transport in random spin chains

Palavras-chave em inglês:

Spin chains

Disordered systems

Spin transport

Área de concentração: Física

Titulação: Doutor em Ciências

Banca examinadora:

Eduardo Miranda [Orientador]

José Antonio Brum

Ricardo Luís Doretto

Tobias Micklitz

André de Pinho Vieira

Data de defesa: 20-09-2019

Programa de Pós-Graduação: Física

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0003-1558-0733>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/4933064964152257>

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE **LUIZ FILIPE CAMPOS FARIA – RA 117833** APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 20 / 09 / 2019.

COMISSÃO JULGADORA:

- Prof. Dr. Eduardo Miranda – Orientador – DFMC/IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. José Antonio Brum – DFMC/IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Ricardo Luís Doretto – DFMC/IFGW/UNICAMP
- Prof. Dr. Tobias Micklitz – CBPF
- Prof. Dr. André de Pinho Vieira – IF/USP

OBS.: Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

CAMPINAS
2019

Dedico esta tese ao
meu avô, Vicente Campos.

*”... a vida é trem-bala, parceiro, e a gente
é só passageiro prestes a partir.” (Ana Vilela)*

Agradecimentos

Ao Prof. Eduardo Miranda pela oportunidade, paciência e compreensão ao longo deste trabalho, mas também pelo exemplo profissional que foi. Ao Victor Quito por ter sido praticamente um co-orientador e estar sempre disponível nos momentos de dificuldade. Ao Prof. José A. Hoyos pela colaboração e hospitalidade em São Carlos.

Ao irmão que a vida me deu, Luiz Guilherme, pela amizade e companheirismo, que foram fundamentais para o meu dia a dia ao longo deste trabalho.

À minha mãe, Adriene Helena, por tudo que representa para mim, pelo apoio incondicional e por ser essa mulher guerreira e incansável. Ao meu pai, Renato, pelo apoio que me deu ao longo do doutorado. Aos meus avós Vicente e Francisca por serem praticamente outros pais para mim.

Aos meus amigos da sala de estudos do DFMC Helder, Rodolfo, William, Lisan e Gabriel pelos momentos de descontração e almoços proveitosos.

Aos amigos que a vida me presenteou Adriana, Laura, Helo e Damaris por terem tornado estes anos tão valiosos.

Ao meu primo Diogo e minha prima Jack por estarem presentes nos momentos de dificuldade.

Ao Prof. José Brum pelas valiosas discussões e pelo curso de Matéria Condensada. Aos profs. Alex Antonelli e G. Cabrera pelos bons cursos de Física Estatística e Teoria de Grupos, respectivamente.

Aos alunos que dei aula ao longo do doutorado e todos aqueles que de alguma forma tornaram essa caminhada mais tranquila.

À Fapesp, através do processo 2015/01966-1, pelo apoio financeiro. Além disso, o presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - 1504582/2015.

Resumo

Efeitos de interação são notoriamente difíceis de serem levados em consideração, principalmente quando existe desordem no problema. Para tratar este tipo de problema, precisamos recorrer a métodos confiáveis e, em uma dimensão, o Grupo de Renormalização para Desordem Forte (GRDF) tem tido bastante sucesso na descrição dos fenômenos.

Neste trabalho, utilizamos o GRDF para obter propriedades de transporte de spin em cadeias de spin desordenadas. Há resultados na literatura que indicam que a condutividade de spin do modelo XX desordenado é metálica. Este sistema, no entanto, é exatamente mapeado em um modelo de férmions não interagentes com a desordem presente fora da diagonal. Este sistema é conhecido por ser sempre localizado, embora as funções de onda sejam anômalas, com um comportamento exponencial estendido, em vez da forma exponencial mais comum. Esta natureza localizada das funções de onda está em aparente contradição com o comportamento metálico reivindicado. Resolvemos esse aparente paradoxo trabalhando com o mesmo método e mostrando que a quantidade adequada para caracterizar as propriedades condutoras é o valor típico (mais provável ou média geométrica) da condutividade, em vez de sua média aritmética: enquanto a última é metálica, a primeira é, de fato, isolante. A discrepância entre essas duas grandezas é bem conhecida em sistemas unidimensionais. Seus valores amplamente diferentes são uma marca registrada de sistemas fortemente desordenados. Confirmamos esses resultados dentro da perspectiva do GRDF. Estendemos este estudo para cadeias de spin 1 com simetria

$SU(2)$. Mostramos que esse mesmo comportamento anômalo é visto e o valor típico é a grandeza mais indicada para caracterizar as propriedades de transporte do modelo.

Em seguida, estudamos as propriedades de transporte de calor para o modelo XX . Para este caso, a média aritmética da condutividade térmica já indica um comportamento isolante e seus valores não são tão discrepantes em relação ao valor típico. Isto sugere que a localização é mais rápida. Quando olhamos para as distribuições da condutividade, elas não são tão largas quanto o caso do transporte de spin.

Abstract

Interaction effects are notoriously difficult to take into account, especially when there is disorder in the problem. To address this kind of problem we need to resort to reliable methods and, in one dimension, the Strong Disorder Renormalization Group (SDRG) has been quite successful in describing the phenomena.

In this work we use the SDRG to obtain spin transport properties in disordered spin chains. In the literature there are results regarding the conducting properties of some disordered spin chains. More specifically, there are published claims that the spin conductivity of the disordered XX model is metallic. This system, however, is exactly mapped onto a model of non-interacting spinless fermions with off-diagonal disorder only. The latter system is known to be localized although the wave functions are anomalous, with a stretched exponential behavior, rather than the more usual exponential form. This localized nature of the wave functions is in apparent contradiction with the claimed metallic behavior. We resolve this apparent paradox by working with the same method and showing that the adequate quantity to characterize the conducting properties is the typical (most probable or geometric average) value of the conductivity, rather than its arithmetic average: whereas the latter is metallic, the former is indeed insulating. The discrepancy between these two quantities is well known in one-dimensional systems. Their widely different values are a hallmark of strongly disordered systems. We confirm these features within the SDRG framework. We extended this study to $SU(2)$ symmetric spin 1 chains. We

show that the same anomalous behavior is seen and the typical value is the most indicated quantity to characterize the transport properties of the model.

We then study the heat transport properties of the XX model. For this case, the arithmetic mean of thermal conductivity already indicates an insulating behavior and its values are not so discrepant from the typical ones. This suggests that the localization is faster. When we look at the distributions, they are not as wide as in the spin transport case.

Sumário

Resumo	9
Abstract	11
1 Introdução	16
2 Grupo de Renormalização para Desordem Forte	21
2.1 Modelo de Heisenberg antiferromagnético	21
2.2 Modelo XXZ	26
2.3 Modelo $S = 1$	26
3 Condutividade no modelo XX e a localização de Anderson	30
3.1 Condutividade no modelo XX	30
3.2 Localização de Anderson	38
4 Transporte de spin: Modelo XX	40
4.1 Previsão analítica	40
4.2 Comparação entre valor médio e valor típico	46
4.3 Resultados numéricos	47

5	Transporte de spin: Modelo S=1	54
5.1	Modelo	54
5.2	Resultados numéricos	61
6	Transporte térmico: Modelo XX	66
6.1	Modelo	66
6.2	Fórmula de Kubo	69
6.3	Previsão analítica	72
6.4	Resultados	74
7	Conclusões	77
	Apêndices	80
A	Equação do fluxo	81
B	Espectro de dois sítios do modelo (2.24)	84
C	Forma lorentziana para a delta de Dirac	86
D	Renormalização do operador corrente de spin	90
D.1	Renormalização de $\tau_{1,2}$ e $\tau_{3,4}$	93
D.2	Renormalização de $\tau_{2,3}$	96
D.3	Outras correções de 2 ^a ordem	102
E	Elementos de matriz do operador corrente	103
F	Renormalização do operador corrente térmico	107
F.1	Renormalização de j_2 e j_3	109
F.2	Caso $S_G \neq 0$	110
F.3	Caso $S_G = 0$	111

F.4	Renormalização de $j_{1/4}$	114
F.5	Sumário dos resultados	116
G	Resultados das integrais	117
	Referências Bibliográficas	120

Introdução

O advento da mecânica quântica trouxe uma nova interpretação da natureza e, em particular, do mundo microscópico permitindo que a física conseguisse abrir uma nova era de conhecimento e desenvolvimento tecnológico da sociedade. Com esta nova teoria, o estudo dos materiais e suas propriedades foram aprofundados, propiciando ao homem um aumento na sua capacidade de manipulação da natureza a fim de se obter dispositivos capazes de se comportar de diversas maneiras e, assim, explicar o grande avanço do último século.

O estado sólido é a porta de entrada deste universo, na qual os conceitos básicos da teoria são aplicados para se entender o comportamento de diferentes modelos [1]. As estruturas cristalinas são bastante simétricas e isso pode ser observado no fato de que a função de onda eletrônica pode ser decomposta num termo de onda plana multiplicada por uma função que apresenta a mesma simetria do cristal [1]. Este fato leva o nome de Teorema de Bloch, que é de grande importância nesses sistemas. Contudo, vários sistemas não apresentam esta simetria, como quasi-cristais, vidros e sistemas desordenados. Nesta tese, focaremos neste último grupo, a fim de se obter propriedades de transporte de alguns modelos desordenados.

Estes sistemas vêm sendo bastante estudados desde 1958, quando P. W. Anderson mostrou que a desordem pode alterar bastante a função de onda [2]. Ele mostrou que, quando a desordem

é suficientemente grande, o caráter da função de onda muda qualitativamente: ela passa a ter um caráter localizado e não se estende por todo o cristal. Em um trabalho posterior, Anderson, Abrahams, Licciardello e Ramakrishnan formularam uma teoria de escala para a condutância para mostrar que em sistemas desordenados não interagentes unidimensionais e bidimensionais não há uma transição metal-isolante, conforme Fig. 1.1 [3], ou seja, qualquer desordem infinitesimal é suficiente para localizar todas as funções de onda. Uma transição entre estados localizados e estendidos só é possível em sistemas tridimensionais.

Em particular, esses autores assumiram que uma certa função chamada de função β , definida como

$$\frac{d \ln g}{d \ln L},$$

onde $g = \frac{G}{e^2/h}$, G é a condutância, e^2/h é o quantum de condutância e L é o tamanho do sistema, só depende do valor de g :

$$\frac{d \ln g}{d \ln L} = \beta(g).$$

Utilizando o comportamento conhecido de $\beta(g)$ nos limites de $g \rightarrow 0$ e $g \rightarrow \infty$ e assumindo um comportamento monotônico da função, foi possível, entre outras coisas, mostrar a ausência de uma transição metal-isolante em $d \leq 2$, para desordem do tipo potencial.

Entretanto, existem evidências experimentais que indicam haver uma transição metal-isolante em alguns sistemas bidimensionais [4, 5, 6]. A Fig.1.2 mostra um desses casos para MOSFET's de silício, que são sistemas semicondutores bidimensionais, à medida em que se varia a densidade de portadores no material [7].

A escala de energia cinética do problema é dada por

$$\frac{\langle K \rangle}{N} = \frac{\pi \hbar^2 n}{2m^*} \approx 0.5 meV$$

enquanto a escala de energia da interação eletrônica é dada por

$$\frac{\langle U \rangle}{N} = \frac{e^2 \sqrt{\pi n}}{2\epsilon} \approx 5 meV$$

o que mostra que a interação eletrônica é a escala dominante no problema, devendo ser levada

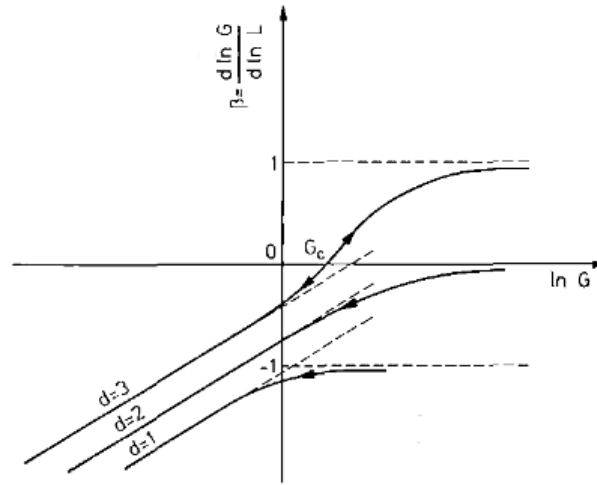


Figura 1.1: Comportamento da função $\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L}$ como função da condutância para 1, 2 e 3 dimensões. Notemos que nos casos unidimensional e bidimensional não há uma raiz da função β , não existindo uma transição metal-isolante. Já para o caso tridimensional, existe uma raiz que sinaliza o ponto de transição. Retirado da Ref. [3].

em consideração na modelagem a fim de se obter resultados teóricos mais coerentes com os dados experimentais [8].

Entretanto, efeitos de interações são notoriamente difíceis de serem levados em consideração e é necessário recorrer a métodos confiáveis. Em uma dimensão, um método poderoso é o Grupo de Renormalização para Desordem Forte (GRDF) proposto inicialmente por Ma, Dasgupta e Hu em 1979 para a cadeia de Heisenberg antiferromagnética [9, 10] e que teve suas propriedades amplamente estudadas por Fisher [11, 12, 13]. Este método consiste em uma sequência de dizimações locais no espaço real. Primeiro, procura-se o sítio ou par de sítios cujo espectro tem o maior gap de excitação (diferença entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado). Apenas o multiplete fundamental é mantido e os demais estados são descartados. Em seguida, é calculado o acoplamento entre este multiplete efetivo e os estados dos sítios vizinhos através de teoria de perturbação. A utilização de teoria de perturbação é justificada no limite de desordem forte e, portanto, quando a desordem efetiva cresce com o fluxo, o método se torna cada vez

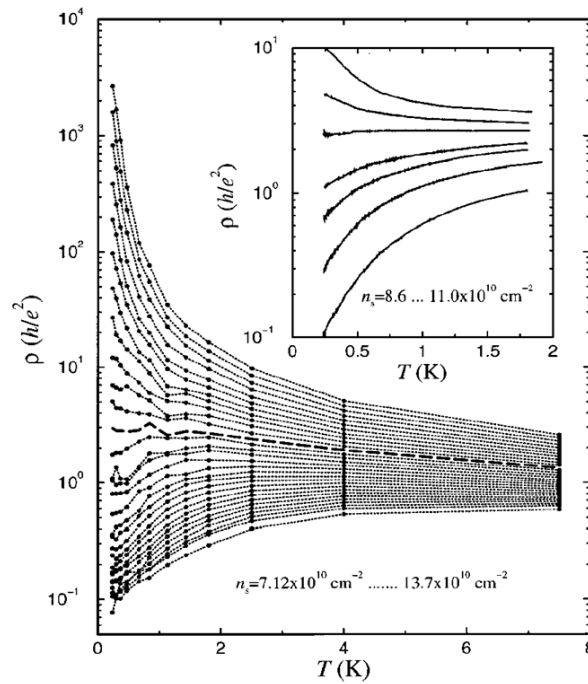


Figura 1.2: Resistividade como função da temperatura para diferentes densidades. A partir de uma determinada densidade, ρ muda de comportamento mostrando uma transição metal-isolante. Retirado da Ref. [7].

melhor. O fato da dizimação ser local e, assim, ser necessário resolver problemas de poucos sítios, indica a viabilidade do método quando a interação é incluída.

O GRDF foi aplicado anteriormente para o cálculo de propriedades de transporte de sistemas não-interagentes e mostrou-se exitoso na obtenção da função β em 1 dimensão [14]. Também, foi feito a extensão deste estudo para dimensões superiores e a transição metal-isolante foi capturada pelo método em dimensões até $d = 10$ [15]. O estudo de propriedades de transporte em sistemas de spin foi feito em 1999 por K. Damle, O. Motrunich e D. Huse [16, 17], que obtiveram a condutividade ac para cadeias de spin a partir da fórmula de Kubo [18] e dentro do GRDF.

No entanto, o estudo das quantidades físicas em sistemas desordenados de baixa dimensionalidade deve ser feito com cuidado. Nestes problemas as distribuições tendem a ficar bastante

largas e as flutuações destas quantidades são grandes. Um exemplo relevante é a condutividade dc em sistemas desordenados unidimensionais [19]. Neste caso, o valor típico da condutividade é muito menor que o valor médio e este último forneceria uma caracterização errada do sistema.

Neste sentido, este trabalho se insere nesta fronteira entre desordem e interação, buscando obter propriedades de transporte de spin e de calor para alguns modelos. Mostraremos que o GRDF tem a capacidade não apenas de acessar essas propriedades de maneira confiável em uma dimensão, como também de descrever suas distribuições, o que é crucial para uma descrição completa e relevante. O Capítulo 2 apresenta o método que será utilizado, o Grupo de Renormalização para Desordem Forte, na sua aplicação original e em dois outros modelos, que serão utilizados no trabalho. O Capítulo 3 apresenta os resultados anteriores da literatura sobre o problema a ser tratado e a discrepância existente, a qual tentaremos resolver. Os Capítulos 4 e 5 trazem os resultados obtidos para o transporte de spin para o modelo XX e para o modelo mais geral com simetria $SU(2)$ de $S = 1$. O Capítulo 6 apresenta os resultados obtidos para o transporte térmico no modelo XX . Finalmente, são dadas as conclusões e perspectivas deste trabalho.

2

Grupo de Renormalização para Desordem Forte

Neste capítulo, será apresentado o método do Grupo de Renormalização para desordem forte, proposto originalmente por Ma, Dasgupta e Hu [9, 20], aplicado ao modelo de Heisenberg antiferromagnético. Em seguida, apresentaremos o método aplicado ao modelo XXZ [12]. Também, será apresentada a aplicação do mesmo a cadeias de spin 1 com simetria $SU(2)$ [21].

2.1 Modelo de Heisenberg antiferromagnético

O hamiltoniano deste modelo 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 de spin localizado no sítio i e J_i 's são os acoplamentos antiferromagnéticos, $J_i > 0$, tomados como variáveis aleatórias descorrelacionadas obtidas a partir de uma distribuição de acoplamentos $P(J)$, com valor máximo dado por Ω_0 . O espectro para dois sítios deste modelo é dado por um singleto,

$$|S = 0, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle), \quad (2.2)$$

cuja energia é $E_{00} = -\frac{3J}{4}$. Os estados de tripleto são dados por

$$|S = 1, M = 1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle, \quad (2.3)$$

$$|S = 1, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle), \quad (2.4)$$

$$|S = 1, M = -1\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle, \quad (2.5)$$

cuja energia é dada por $\frac{J}{4}$. Portanto, o gap de energia entre os estados de singleto e tripleto é dado por J .

Suponha que o maior acoplamento da cadeia seja entre os sítios 2 e 3, $J_2 = \Omega$, de maneira que tratamos este termo como dominante

$$H_0 = J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3, \quad (2.6)$$

cujo estado fundamental é o singleto separado por uma escala $J_2 = \Omega$ do tripleto. O método tem como foco descrever a física de baixas energias do sistema. Assim, congelamos este par de sítios no seu estado de singleto.

Tratamos o restante da cadeia como perturbação. Os únicos termos relevantes são aqueles que envolvem o par de sítios 2 e 3:

$$V = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_3 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4. \quad (2.7)$$

Em primeira ordem de teoria de perturbação temos que

$$\langle S = 0, M = 0 | V | S = 0, M = 0 \rangle = 0. \quad (2.8)$$

Já em segunda ordem de teoria de perturbação, temos que



Figura 2.1: Representação esquemática do processo de dizimação. Os sítios 2 e 3 são congelados num estado de singlete e, através de teoria de perturbação, calculamos os efeitos deste procedimento no restante da cadeia.

$$\begin{aligned}
 H^{ef} &= \sum_M \frac{\langle S=0, M=0 | V | S=1, M \rangle \langle S=1, M | V | S=0, M=0 \rangle}{E_{00} - E_{1M}} \\
 &= \tilde{J} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4,
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

onde

$$\tilde{J} = \frac{J_1 J_3}{2\Omega}. \tag{2.10}$$

A Fig. 2.1 mostra o processo de dizimação.

Percebamos que, como $\Omega > J_1, J_3$, então $\tilde{J} < J_1, J_2, J_3$. Assim, o método é tão melhor quanto maior for a desordem, já que nesse caso há uma grande chance de Ω ser muito maior que os outros acoplamentos e o uso da teoria de perturbação se justifica. Além disso, podemos ver que numa dizimação três acoplamentos são retirados do sistema e outro muito menor que os outros é colocado. A Fig.2.2 mostra esquematicamente o efeito deste processo na distribuição de acoplamentos $P(J)$, onde podemos ver que a distribuição fica cada vez mais singular na origem.

Assim, a equação de fluxo da distribuição de acoplamentos é dada por (ver Apêndice A)

$$\frac{\partial P}{\partial \Omega} = -P(J = \Omega) \int dJ_1 dJ_3 P(J_1) P(J_3) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{2\Omega}\right), \tag{2.11}$$

que apresenta um ponto fixo [9, 12]

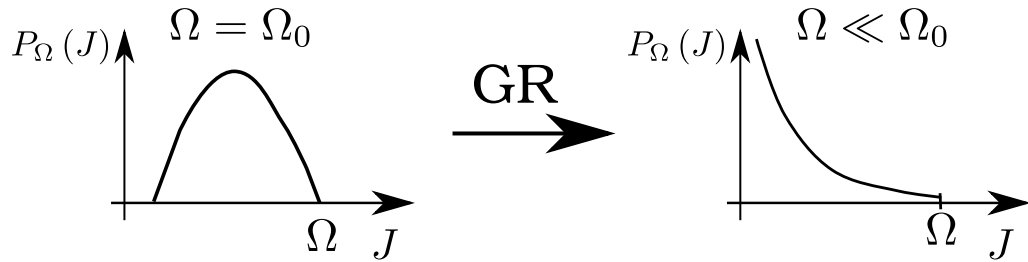


Figura 2.2: Representação esquemática do efeito das dizimações na distribuição de acoplamentos.

$$P^*(J; \Omega) = \frac{\alpha}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J} \right)^{1-\alpha} \theta(\Omega - J), \quad (2.12)$$

onde $\alpha = -\frac{1}{\ln(\frac{\Omega_0}{\Omega})}$. Podemos estimar como a largura da distribuição flui com o método. Isto é feito através da razão do desvio padrão pelo valor médio de J

$$\frac{\Delta J}{\langle J \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \rightarrow \infty. \quad (2.13)$$

Assim, pode-se perceber que à medida que o método é iterado a distribuição fica cada vez mais larga, fluindo para um ponto fixo de desordem infinita, no qual a teoria de perturbação é completamente justificada. Portanto, diz-se que o método é assintoticamente exato.

À medida que o método é iterado, os pares de sítios são congelados em estados de singleto. Assim, vemos que o estado fundamental do sistema é um conjunto de pares de sítios congelados em singletos, de tamanhos arbitrariamente grandes, vide Fig. 2.3. Esta fase é chamada de fase de singletos aleatórios.

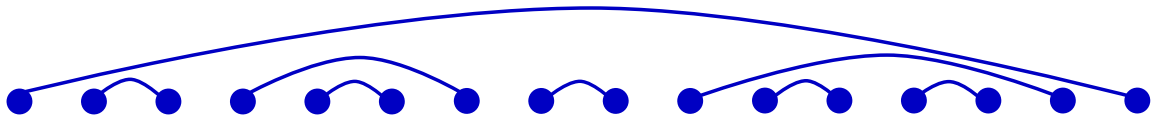


Figura 2.3: Representação esquemática da fase de singletos aleatórios.

Com base nisso, podemos calcular algumas quantidades físicas de interesse. Por exemplo, a densidade de spins ativos numa dada escala Ω é calculada levando em consideração que a cada

dizimação dois spins são retirados da cadeia

$$dn_{\Omega} = 2n_{\Omega}P(\Omega)d\Omega. \quad (2.14)$$

Considerando que o método já fluiu para o ponto fixo e tomando a distribuição de probabilidade assintótica, $P(\Omega) = P^*(\Omega)$, chegamos a

$$dn_{\Omega} = 2n_{\Omega}P^*(\Omega)d\Omega. \quad (2.15)$$

Resolvendo a Eq. (2.15) para n_{Ω} obtemos

$$n_{\Omega} \sim \frac{1}{\left(\ln \frac{1}{\Omega}\right)^2}. \quad (2.16)$$

A distância efetiva entre dois sítios ativos da cadeia na escala Ω é da ordem do inverso da densidade

$$L_{\Omega} \sim n_{\Omega}^{-1}. \quad (2.17)$$

Substituindo (2.16), chegamos a

$$L_{\Omega}^{\psi} \sim \ln \frac{\Omega_0}{\Omega}, \quad (2.18)$$

onde $\psi = \frac{1}{2}$ é o chamado expoente dinâmico que fornece a relação entre tamanho e energia das excitações do sistema.

Outra grandeza que pode ser calculada é a susceptibilidade magnética. Suponhamos que queremos a susceptibilidade à temperatura T . Dizimamos a cadeia até a escala $\Omega = T$, de maneira que os spins ativos estão conectados por acoplamentos muito menores que T , devido ao fato de a desordem crescer cada vez mais. Assim, podemos tomá-los como livres e a susceptibilidade é dada pela Lei de Curie

$$\chi(T) \sim \frac{n_{\Omega=T}}{T} \sim \frac{1}{T \left(\ln \frac{1}{T}\right)^2}. \quad (2.19)$$

2.2 Modelo XXZ

Uma variação de interesse do modelo anterior é o modelo XXZ , que apresenta uma anisotropia no acoplamento z do spin

$$H = \sum_i [J_i^\perp (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + J_i^z S_i^z S_{i+1}^z]. \quad (2.20)$$

Supondo que o maior gap de energia é dada entre os sítios 2 e 3, as regras de dizimação são dadas por [12]

$$\tilde{J}^z = \frac{J_1^z J_3^z}{2J_2^\perp}, \quad (2.21)$$

e

$$\tilde{J}^\perp = \frac{J_1^\perp J_3^\perp}{J_2^\perp + J_2^z}. \quad (2.22)$$

Definindo $\Delta_n = \frac{J_n^z}{J_n^\perp}$, podemos re-escrever a regra de dizimação como

$$\tilde{\Delta} = \Delta_1 \Delta_3 \left(\frac{1 + \Delta_2}{2} \right), \quad (2.23)$$

onde o último passo vale para uma anisotropia fraca.

Como mostrado em [12], à medida que o GRDF flui, o acoplamento anisotrópico é assintoticamente irrelevante, indo a zero. Este comportamento é válido na região $\Delta_n \in [-1/2, 1)$. Assim, nessa região, o modelo apresenta o mesmo comportamento assintótico do modelo XX .

2.3 Modelo $S = 1$

Agora, apresentaremos os resultados do método aplicado ao modelo mais geral possível, com simetria $SU(2)$, para spin $\mathbf{S} = 1$. O hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_i [J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + D_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2], \quad (2.24)$$

onde J_i e D_i são os acoplamentos obtidos a partir de distribuições $P_J(J)$ e $P_D(D)$. Os resultados foram obtidos por V. L. Quito e colaboradores [21]. Para o problema de dois sítios, se trabalharmos na base da soma de momento angular $\mathbf{S}_T = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$, fica claro que o spin total desses dois sítios pode ser $S = 0, 1, 2$. Portanto, os níveis desse problema local são um singlete, um tripleto e um quintupeto, conforme mostrado no Apêndice B. Como obtido por [21], uma escolha melhor para estudar o diagrama de fases do modelo é trabalhar com variáveis radiais e angulares

$$r_i = \sqrt{J_i^2 + D_i^2}, \quad (2.25)$$

$$\theta = \arctan\left(\frac{D_i}{J_i}\right). \quad (2.26)$$

Nessas novas variáveis o hamiltoniano pode ser re-escrito como

$$H = \sum_i r_i [\cos \theta_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \sin \theta_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2]. \quad (2.27)$$

Com essa escolha, utiliza-se o GRDF para obter as propriedades do modelo. Para isso, fixa-se o ângulo inicial $\theta_i = \theta_0$ e a desordem inicial está presente apenas no raio. Supondo que o par mais fortemente acoplado é o 2 e 3, temos que na região $-\frac{3\pi}{4} < \theta_2 < \arctan\left(\frac{1}{3}\right)$, o estado fundamental é um singlete. Assim, ambos os sítios são congelados nesse estado e os sítios 1 e 4 são conectados por novos acoplamentos dados por

$$\tilde{J} = \frac{4(J_1 - D_1/2)(J_3 - D_3/2)}{3(J_2 - 3D_2)} - \frac{D_1 D_3}{9(J_2 - D_2)}, \quad (2.28)$$

$$\tilde{D} = -\frac{2D_1 D_3}{9(J_2 - D_2)}. \quad (2.29)$$

Na região $\arctan\left(\frac{1}{3}\right) < \theta_2 < \pi/2$, o estado fundamental dos sítios 2 e 3 é um tripleto. Para reproduzir esse comportamento, podemos substituir ambos os sítios por um novo spin efetivo $\tilde{S} = 1$ que possui acoplamentos com os sítios vizinhos 1 e 4, dados por

$$\tilde{J}_i = \frac{1}{2}J_i + \frac{1}{4}D_i, \quad (2.30)$$

$$\tilde{D}_i = -\frac{1}{2}D_i. \quad (2.31)$$

A Fig. 2.4 mostra o processo de dizimação para os dois casos mostrados.

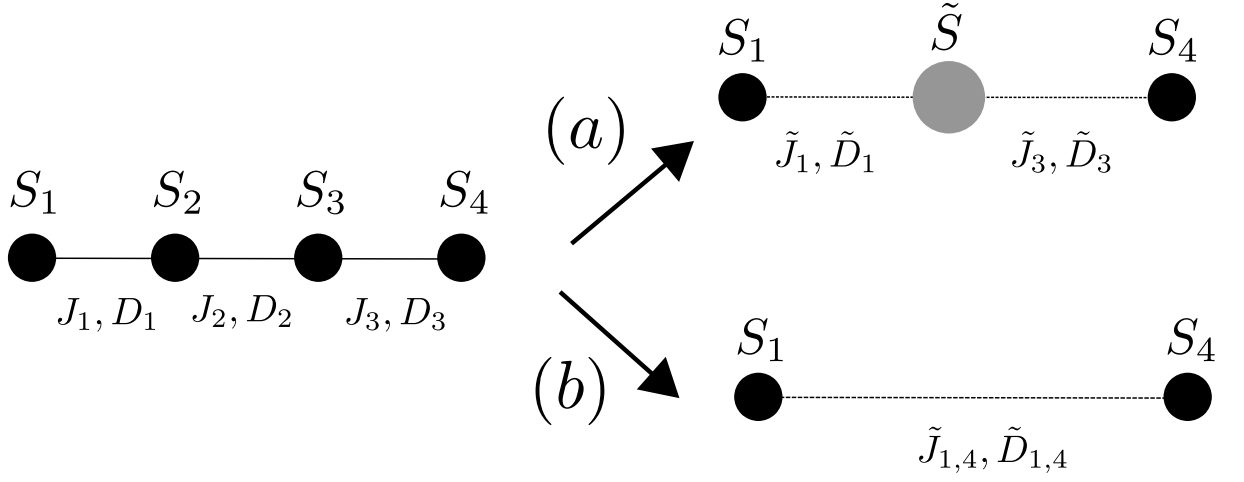


Figura 2.4: Representação esquemática do processo de dizimação quando o estado fundamental é o tripleto (a) e quando é o singlete (b).

Na região $\pi/2 < \theta_2 < 5\pi/4$, o estado fundamental é um quintupletto e podemos representar esse comportamento por um novo spin efetivo $\tilde{S} = 2$, o que leva, a medida que o método é iterado, a um aumento do tamanho dos spins, o que não é de interesse nesse projeto. O diagrama de fases é apresentado na Fig.2.5.

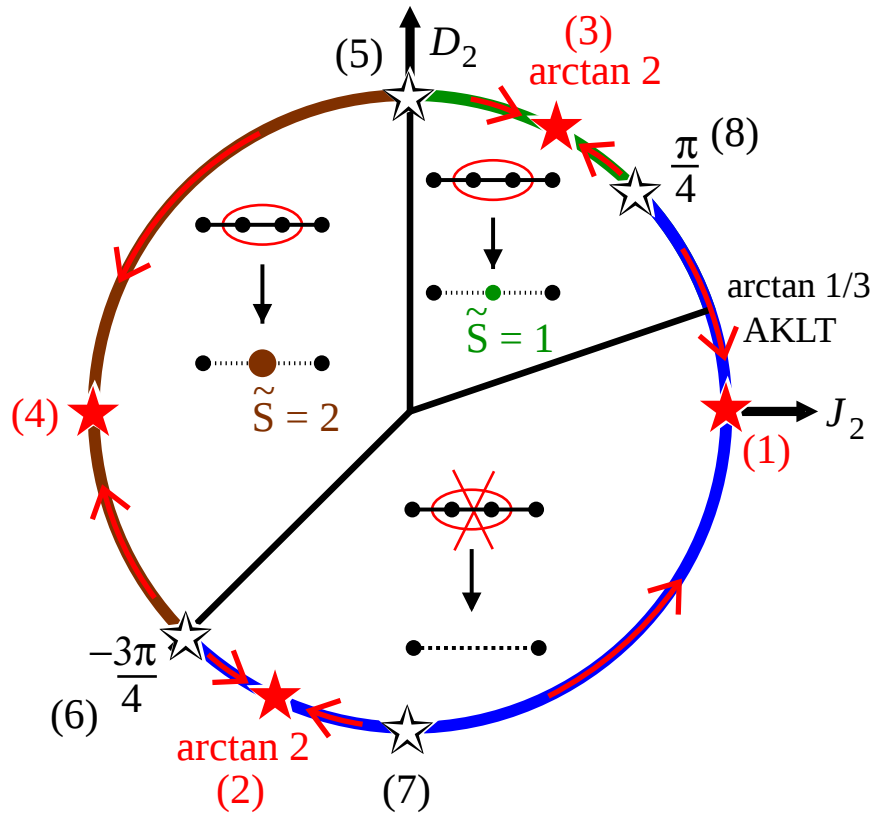


Figura 2.5: Diagrama de fases para o modelo $S = 1$. Retirado da Ref. [21].

No diagrama são mostrados os pontos fixos angulares, representados pelas estrelas hachuradas e as suas bacias de atração, indicadas pelas setas. Assim, ao se iniciar o fluxo num determinado ângulo inicial fixado, o mesmo irá fluir para 0 ou $\arctan 2$ [(2) ou (3)], conforme o ponto em que iniciarmos. É importante frisar que na região em que a dizimação é do singlete, o expoente dinâmico $\psi = \frac{1}{2}$ e na região em que a dizimação é de tripleto, o mesmo é dado por $\psi = \frac{1}{3}$.

3

Condutividade no modelo XX e a localização de Anderson

Neste capítulo, serão apresentados alguns resultados já existentes a cerca do transporte de spin no modelo de Heisenberg desordenado. O procedimento a seguir foi proposto por [17]. Além disso, apresenta-se a localização de Anderson para um hamiltoniano de férmions livres sem spin, com simetria partícula buraco.

3.1 Condutividade no modelo XX

Inicialmente, precisa-se esclarecer o que se quer dizer com condutividade de spin. A ideia aqui é que num determinado ponto da cadeia surja uma excitação de spin e que essa excitação pode se propagar pela cadeia. O foco é entender como se dá essa propagação, podendo caracterizar o modelo como tendo um comportamento isolante ou metálico. No caso do modelo de Heisenberg, o mesmo pode ser mapeado num hamiltoniano de elétrons sem spin e, portanto, esta condutividade corresponde à condutividade elétrica usual. Porém, em cadeias de spin S ($S \neq 1/2$) este mapeamento não é possível e, assim, é importante estar claro o que se entende por condutividade de spin.

O modelo proposto por [17] para ser estudado é o XX, cujo hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_i J_i (S_i^x S_{i+1}^y + S_i^y S_{i+1}^x), \quad (3.1)$$

onde os acoplamentos J_i 's são variáveis aleatórias descorrelacionadas, tomadas a partir de uma distribuição $P(J)$.

A fim de se obter uma expressão para a condutividade, parte-se da fórmula de Kubo [22]

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\omega L} \sum_m \left| \left\langle m \left| \sum_k \tau_{k,k+1} \right| 0 \right\rangle \right|^2 \delta(\omega - E_m) \quad (3.2)$$

onde L é o tamanho da cadeia, $|0\rangle$ e $|m\rangle$ indicam o estado fundamental e os excitados, respectivamente. O operador $\tau_{k,k+1}$ é o operador corrente de spin e precisa ser calculado para o modelo em questão.

Pela estrutura do hamiltoniano, pode-se perceber que S_T^z , ou seja o spin total na direção z , é conservado, já que comuta com o hamiltoniano

$$[H, S_T^z] = 0, \quad (3.3)$$

sendo possível escrever uma equação da continuidade para a densidade dessa quantidade. De fato,

$$\frac{\partial n(x)}{\partial t} + \frac{\partial \tau(x)}{\partial x} = 0, \quad (3.4)$$

que está escrita em termos de variáveis contínuas e $n(x)$ é a densidade e $\tau(x)$ a corrente. Como o sistema é uma rede discreta, deve-se discretizar (3.4), através de um índice k discreto, que indexa os sítios da rede. Assim

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} + \frac{\partial \tau_{k,k+1}}{\partial x} = 0, \quad (3.5)$$

onde $n_k = \frac{S_k^z}{a}$ e a é o parâmetro de rede. Nesse caso, a derivada espacial pode ser escrita como

$$\frac{\partial \tau}{\partial x} \rightarrow \frac{\tau_{k,k+1} - \tau_{k-1,k}}{a}. \quad (3.6)$$

Através da representação de Heisenberg [23], a derivada temporal pode ser escrita como um comutador com o hamiltoniano

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} = i [H, n_k]. \quad (3.7)$$

De maneira que

$$\frac{\tau_{k,k+1} - \tau_{k-1,k}}{a} = -i [H, n_k] = -\frac{i}{a} [H, S_k^z]. \quad (3.8)$$

Como

$$[H, S_k^z] = \frac{J_k}{2} [(S_k^+ S_{k+1}^- - S_{k+1}^+ S_k^-) + (S_{k-1}^+ S_k^- - S_k^+ S_{k-1}^-)], \quad (3.9)$$

chegamos a [17]

$$\tau_{k,k+1} = i \frac{J_k}{2} (S_k^+ S_{k+1}^- - h.c.). \quad (3.10)$$

É importante frisar que este operador "vive" nas ligações entre os sítios da rede. Agora, devemos obter como o operador se renormaliza numa dizimação. Suponha que os sítios dizimados são 2 e 3, vide Fig.3.1.

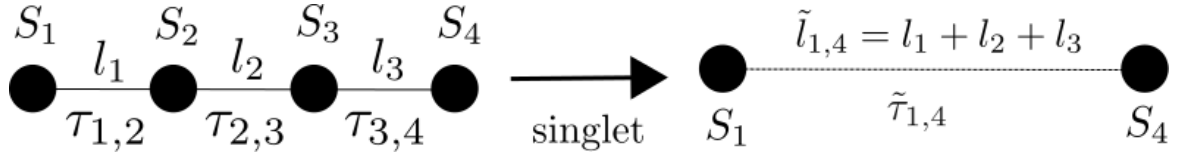


Figura 3.1: Representação da dizimação.

No início as distâncias entre os sítios são todas iguais a 1, porém, à medida que o método é iterado estes tamanhos são renormalizados, e, por isso, já colocamos estes valores como l'_k s. O hamiltoniano não perturbado é dado por

$$H_0 = J_2 (S_2^x S_3^x + S_2^y S_3^y), \quad (3.11)$$

e a perturbação é dada pelo acoplamento com os sítios adjacentes

$$V = J_1 (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + J_3 (S_3^x S_4^x + S_3^y S_4^y). \quad (3.12)$$

De maneira geral, o espaço de Hilbert é truncado em cada dizimação retendo, apenas, o espectro de baixas energias. Assim, a princípio, os sítios 1 e 4 não teriam nenhuma corrente direta entre eles. Porém, vamos utilizar teoria de perturbação para calcular os efeitos da dizimação no operador corrente. De fato, o novo operador, renormalizado, é dado por

$$\tilde{\tau}_{1,4} = \langle l_1 \tau_{1,2} + l_2 \tau_{2,3} + l_3 \tau_{3,4} \rangle \quad (3.13)$$

onde o valor esperado é calculado no estado perturbado

$$|\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + |\psi^{(2)}\rangle, \quad (3.14)$$

onde os estados $|\psi^{(1)}\rangle$ e $|\psi^{(2)}\rangle$ são dados segundo teoria de perturbação de 1ª e 2ª ordem, respectivamente, [23]

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{S \neq 0, M} \frac{\langle SM | V | 00 \rangle}{(E_{00}^{(0)} - E_{SM}^{(0)})} |SM\rangle, \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} |\psi^{(2)}\rangle &= \sum_{S \neq 0, S' \neq 0, M, M'} \frac{\langle SM | V | S' M' \rangle \langle S' M' | V | 00 \rangle}{(E_{00}^{(0)} - E_{SM}^{(0)}) (E_{00}^{(0)} - E_{S' M'}^{(0)})} |SM\rangle \\ &- \sum_{S \neq 0, M} \frac{\langle 00 | V | 00 \rangle \langle SM | V | 00 \rangle}{(E_{00}^{(0)} - E_{SM}^{(0)})^2} |SM\rangle \\ &- \frac{1}{2} \sum_{S \neq 0, M} \frac{\langle 00 | V | SM \rangle \langle SM | V | 00 \rangle}{(E_{00}^{(0)} - E_{SM}^{(0)})^2} |00\rangle, \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde $|00\rangle$ é o singlete entre os sítios 2 e 3, $|SM\rangle$ são os estados excitados, $E_{00}^{(0)}$ é a energia do estado fundamental dada pela diagonalização de (3.11) e $E_{SM}^{(0)}$ a energia dos estados excitados.

Substituindo (3.12) em (3.15) e (3.16), posteriormente em (3.13), obtemos que cada termo deste último nos leva a

$$\langle l_k \tau_{k,k+1} \rangle = i \frac{l_k J_1 J_3}{4 J_2} (S_1^+ S_4^- - h.c.), \quad (3.17)$$

de maneira que somando a renormalização dos três operadores

$$\tilde{\tau}_{1,4} = i \tilde{l} \frac{\tilde{J}}{2} (S_1^+ S_4^- - h.c.) \quad (3.18)$$

onde definimos $\tilde{l} = l_1 + l_2 + l_3$ e \tilde{J} é dado pela Eq. (2.22). No Apêndice D é apresentada uma demonstração geral para essa renormalização. Portanto, pode-se ver que o operador renormalizado retém a mesma forma do operador da cadeia original, com o acoplamento renormalizado e a nova distância entre os sítios 1 e 4.

Agora, voltando à Eq. (3.2) pode-se perceber que, quando a cadeia é dizimada até uma escala ω , a soma dentro do elemento de matriz é feita nos sítios ativos da cadeia, de maneira que

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\omega L} \sum_m \left| \left\langle m \left| \sum_k \tilde{l}_k \tilde{\tau}_k \right| 0 \right\rangle \right|^2 \delta(\omega - \tilde{E}_m). \quad (3.19)$$

A soma (3.19) nos diz que para calcular $\sigma(\omega)$ na escala ω , devemos dizimar a cadeia até essa escala $\Omega = \omega$, e levamos em consideração todos os acoplamentos J_i no intervalo $(\omega, \omega - d\omega)$, com o respectivo tamanho efetivo, \tilde{l} . Os estados com energia $\tilde{E}_m = \omega$ dominam a soma, correspondendo ao fato do operador corrente quebrar os singletos desses estados e levá-los aos estados de tripleto[17]. O elemento de matriz dessa transição é dado por

$$\left| \left\langle m \left| \sum_k \tilde{l}_k \tilde{\tau}_k \right| 0 \right\rangle \right| = \frac{\tilde{l}\Omega}{2}. \quad (3.20)$$

Como o sistema é desordenado, este procedimento deve ser feito para diferentes cadeias, com diferentes acoplamentos iniciais gerados aleatoriamente, obtendo-se $\sigma(\omega)$ para cada cadeia, o que gera uma distribuição para $\sigma(\omega)$. A partir dessa distribuição, podem-se determinar valores médios, variâncias e outros momentos da distribuição.

Analiticamente, o valor médio da condutividade pode ser escrito, no limite termodinâmico, a partir da Eq. (3.19), na qual numa dada escala $\omega = \Omega$ devemos levar em consideração o elemento de matriz da transição, Eq. (3.20) [17]

$$\sigma_{\text{av}}(\omega) \sim \frac{n(\Gamma_\omega)}{\omega} \int dl d\zeta l^2 \omega^2 P(\zeta, l|\Gamma_\omega) \delta(\omega - \Omega e^{-\zeta}), \quad (3.21)$$

onde $\zeta = \ln(\frac{\Omega}{J})$, $\Gamma_\omega = \ln(\frac{\Omega_0}{\Omega})$ e $P(\zeta, l|\Gamma_\omega)$ é a distribuição de acoplamentos e tamanhos[12]. Utilizando a transformação

$$\delta(\omega - \Omega e^{-\zeta}) = \frac{1}{\omega} \delta(\zeta - 0), \quad (3.22)$$

chegamos a

$$\sigma_{\text{av}}(\omega) \sim n_\omega \int dl P(0, l|\Gamma_\omega) l^2. \quad (3.23)$$

Da ref. [12], sabe-se que $P(\eta, l|\Gamma_\omega)$ tem assintoticamente uma forma de escala

$$P(\zeta, l) = \frac{1}{\Gamma_\omega^3} Q(\zeta/\Gamma_\omega, l/\Gamma_\omega^2). \quad (3.24)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{av}}(\omega) &\sim n_\omega \Gamma_\omega^3 \int \frac{dl}{\Gamma_\omega^2} \left(\frac{l^2}{\Gamma_\omega^2} \right) Q\left(0, \frac{l}{\Gamma_\omega^2}\right) \\ &= n_\Omega \Gamma_\Omega^3 \int dx x^2 Q(0, x), \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde a integral fornece apenas um fator numérico e $n_\omega \sim \Gamma_\omega^{-2}$. Finalmente,

$$\sigma_{\text{av}}(\omega) \sim \Gamma_{\omega} = \ln \left(\frac{\Omega_0}{\omega} \right). \quad (3.26)$$

Pela expressão anterior, pode-se ver que no $\lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma_{\text{av}}(\omega) \rightarrow \infty$, sugerindo um comportamento metálico.

Com base no método descrito, [17] calculou numericamente a condutividade. Este cálculo foi feito para 10^5 realizações de desordem, e para tamanhos limitados, $L = 128$ a $L = 512$. A mesma quantidade foi calculada através de diagonalização exata e o resultado de ambos comparadas, vide Fig. 3.2.

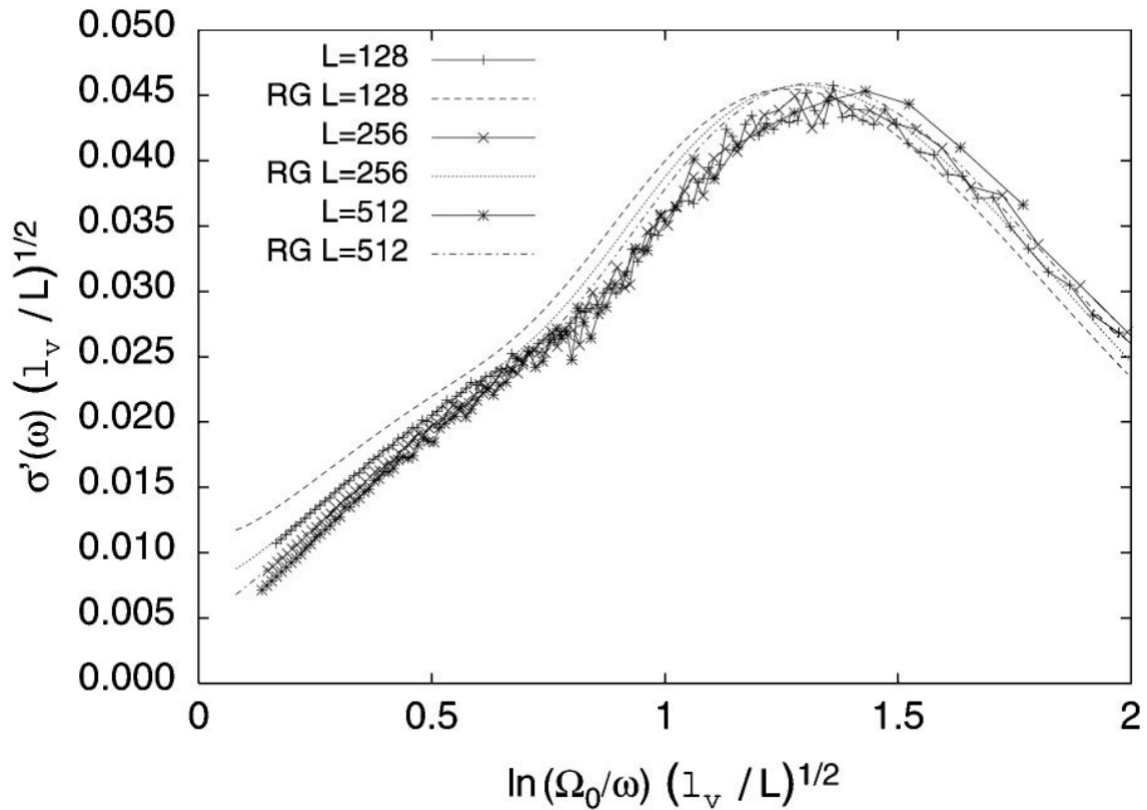


Figura 3.2: Condutividade média para o modelo XX . Linhas cheias representam os resultados obtidos a partir do GRDF e as linhas tracejadas mostram o resultado obtido a partir de diagonalização exata. As curvas foram re-escaladas por \sqrt{L} . O parâmetro l_v é um tamanho de referência, tomado como igual a 1. Retirado da Ref. [17].

Os resultados numéricos obtidos indicam que, de fato, a condutividade tem um comportamento linear com $\ln\left(\frac{\Omega_0}{\omega}\right)$. Como o cálculo analítico foi feito no limite termodinâmico, e os dados numéricos são obtidos de cadeias de tamanho finito, temos que este último começa a desviar da reta quando começam a aparecer efeitos de tamanho finito, lado direito do pico da Fig. 3.2. Assim, estamos interessados no comportamento do lado esquerdo do gráfico, até pouco antes do cume, que corresponde ao limite termodinâmico.

As curvas foram re-escaladas por \sqrt{L} , obtendo-se, assim, um comportamento de escala universal para a condutividade média. Se tomarmos o limite de baixas frequências, $\omega \rightarrow 0$,

o valor médio de $\sigma(\omega)$ diverge no limite termodinâmico, confirmando a previsão analítica de haver um comportamento metálico para este sistema.

3.2 Localização de Anderson

O modelo (3.1) pode ser mapeado através de uma transformação de Jordan-Wigner[22] em um hamiltoniano de férmions livres com simetria partícula buraco

$$H = \sum_i t_i \left(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i \right), \quad (3.27)$$

onde $c_i(c_i^\dagger)$ é o operador de aniquilação (criação) no sítio i e $t_i = J_i/2$ é a amplitude *hopping* entre sítios adjacentes.

O modelo anterior já foi vastamente estudado na literatura, ver [24, 25], e é bem conhecido que ele apresenta o fenômeno de localização de Anderson de maneira anômala. A localização de Anderson foi descrita por P. W. Anderson em 1958 para modelos com desordem intra sítio [2]

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + t \sum_i \left(c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i \right), \quad (3.28)$$

onde ε_i é a energia do sítio i . Nesse caso, a função de onda é caracterizada por um envelope exponencial com um dado comprimento de localização, ξ

$$\psi \sim e^{-r/\xi}. \quad (3.29)$$

Para o caso de interesse, a desordem está presente apenas no *hopping*, e há a presença de simetria partícula-buraco. A função de onda também apresenta um envelope exponencial, porém com uma raiz quadrada no argumento

$$\psi \sim e^{-\sqrt{r/\xi}}. \quad (3.30)$$

Assim, o sistema ainda apresenta um comportamento isolante, mas chamado de anômalo [24]. Muitas referências antigas assumiram um comportamento exponencial usual, Eq. (3.29), e obtiveram, incorretamente, que o comprimento de localização diverge e os estados são estendidos [26, 17].

Transporte de spin: Modelo XX

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos para o transporte de spin para o modelo XX. Inicia-se retomando o modelo utilizado, o operador corrente e a fórmula de Kubo. Em seguida, são mostrados as previsões analíticas e os resultados numéricos obtidos para a condutividade óptica. A fim de se obter um entendimento maior, mostram-se as distribuições da condutividade para alguns valores de frequência. Finalmente, são apresentados os gráficos do desvio padrão, comparando com a previsão analítica, e a condutividade para diferentes larguras da representação da delta de Dirac escolhida.

4.1 Previsão analítica

A partir da discrepância existente entre os resultados da literatura, decidimos investigar o mesmo sistema, Eq. (3.1), dentro do método do GRDF. O operador corrente é dado pela Eq. (3.10) e a Fórmula de Kubo pelas expressões (3.19) e (3.20). Partindo destas últimas, podemos escrever uma expressão analítica para a distribuição de $\sigma(\omega)$

$$S(\sigma) = \int \left[\prod_{i=1}^N dl_i dJ_i P(J_i, l_i | \omega) \right] \delta \left[\sigma - \sum_{i=1}^N \frac{\omega}{4L} l_i^2 \delta(\omega - J_i) \right], \quad (4.1)$$

onde $P(J, l|\omega)$ é a distribuição de acoplamentos e tamanhos. Escrevemos $\sigma(\omega)$ como σ para tornar a notação menos pesada. O produtório nos dá a probabilidade de haver uma determinada distribuição de acoplamentos na cadeia e a delta de Dirac garante que temos a combinação que fornece a expressão da condutividade.

Utilizando a representação integral da delta de Dirac

$$\delta(x - x_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda(x-x_0)} \quad (4.2)$$

para a delta externa, tem-se que

$$\delta\left[\sigma - \sum_{i=1}^N \frac{\omega}{4L} l_i^2 \delta(\omega - J_i)\right] = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda\sigma} \prod_{i=1}^N e^{-i\lambda\omega l_i^2 \delta(\omega - J_i)/4L}, \quad (4.3)$$

onde re-escreveu-se a soma no expoente como um produto. Voltando à distribuição, Eq. (4.1)

$$\begin{aligned} S(\sigma) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda\sigma} \int \left[\prod_{i=1}^N dl_i dJ_i P(J_i, l_i|\omega) e^{-i\lambda\omega l_i^2 \delta(\omega - J_i)/4L} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\lambda}{2\pi} e^{i\lambda\sigma} [R(\lambda)]^N, \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde definimos a seguinte quantidade para facilitar a notação

$$R(\lambda) = \int dl dJ P(J, l|\omega) e^{-i\lambda\omega l^2 \delta(\omega - J)/4L}. \quad (4.5)$$

Devemos fazer uma escolha sobre a forma da função delta de Dirac no expoente. Para o cálculo analítico, optou-se por uma forma do tipo caixa, i.e.

$$\delta(x) = \frac{1}{\Delta} \theta\left(\frac{\Delta}{2} - |x|\right), \quad (4.6)$$

onde

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x - \frac{\Delta}{2} < x < x + \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (4.7)$$

onde Δ é a largura escolhida para a função teste. No limite $\Delta \rightarrow 0$, recuperamos a delta de Dirac. Esta largura se mostrará uma característica física importante nas quantidades de interesse. No Apêndice C, fazemos uma derivação alternativa usando uma forma lorentziana para a função delta.

Como será melhor explicado na discussão dos resultados numéricos, esta escolha leva a uma anomalia numérica que será resolvida utilizando uma outra representação para a delta. É conveniente trabalhar a Eq. (4.5) a fim de se obter uma forma mais simples para o cálculo das quantidades físicas de interesse. Utilizando a propriedade da delta de Dirac, temos que

$$\begin{aligned}
R(\lambda) &\approx \int_0^\infty dl \left[\left(\int_{-\infty}^{\omega-\Delta/2} + \int_{\omega+\Delta/2}^\infty \right) dJP(J, l|\omega) + P(\omega, l|\omega) \Delta e^{-i\lambda\omega l^2/4L\Delta} \right] \\
&= \int_0^\infty dl \left[\left(\int_{-\infty}^{+\infty} - \int_{\omega-\Delta/2}^{\omega+\Delta/2} \right) dJP(J, l|\omega) + P(\omega, l|\omega) \Delta e^{-i\lambda\omega l^2/4L\Delta} \right] \\
&= \int_0^\infty dl \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dJP(J, l|\omega) + P(\omega, l|\omega) \Delta \left(e^{-i\lambda\omega l^2/4L\Delta} - 1 \right) \right] \\
&= \int_0^\infty dl \left[P_l(l|\omega) + P(\omega, l|\omega) \Delta \left(e^{-i\lambda\omega l^2/4L\Delta} - 1 \right) \right] \\
&= 1 - \frac{\Delta}{\omega\Gamma_\omega} + \Delta \int_0^\infty dl P(\omega, l|\omega) e^{-i\lambda\omega l^2/4L\Delta}, \tag{4.8}
\end{aligned}$$

onde utilizou-se que $\int dl dJP(J, l|\omega) = 1$ que retrata a normalização da distribuição e $P_l(l|\omega) = \int dJP(J, l|\omega)$, que é a distribuição de tamanhos apenas. Para distribuições iniciais do tipo lei de potência, a distribuição assintótica de acoplamentos e tamanhos no *cutoff*, $J = \Omega = \omega$, pode ser calculada analiticamente [27], cuja expressão é dada por

$$P(\omega, l|\omega) = \frac{2\pi^2}{\omega a^2 \Gamma^3} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} n^2 e^{-\left(\frac{n\pi}{a\Gamma}\right)^2 l}, \tag{4.9}$$

onde para o caso de uma distribuição inicial do tipo caixa $a = \sqrt{2}$.

Assim, podemos substituir (4.9) em (4.8). Começamos verificando se a distribuição da condutividade está normalizada.

$$\begin{aligned}
\int d\sigma S(\sigma) &= R^N(\lambda = 0) \\
&= \left[1 - \frac{\Delta}{\omega \Gamma_\omega} + \Delta \int dl P(\omega, l|\omega) \right]^N \\
&= \left[1 - \frac{\Delta}{\omega \Gamma_\omega} + \frac{\Delta}{\omega \Gamma_\omega} \right]^N \\
&= 1,
\end{aligned} \tag{4.10}$$

como deve-se esperar. O valor médio da condutividade é obtido através da primeira derivada no espaço de Fourier.

$$\begin{aligned}
\sigma_{av}(\omega) &= \int d\sigma S(\sigma) \sigma \\
&= i \left. \frac{d[R^N(\lambda)]}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \\
&= iN R^{N-1}(\lambda = 0) \left. \frac{dR(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \\
&= iN \left. \frac{dR(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0}.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Calculando a derivada

$$\begin{aligned}
N \left. \frac{dR(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} &= -iN\Delta\alpha \frac{2\pi^2}{\omega a^2 \Gamma_\omega^3} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} n^2 \int dl l^2 e^{-(\frac{n\pi}{a\Gamma_\omega})^2 l} \\
&= -iN\Delta\alpha \frac{2\pi^2}{\omega a^2 \Gamma_\omega^3} \frac{2a^6 \Gamma^6}{\pi^6} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^4} \\
&= -i \frac{2a^4}{\pi^4} \Gamma \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^4},
\end{aligned} \tag{4.12}$$

onde usou-se que $\int dx x^2 e^{-ax} = \frac{2}{a^3}$, $N = \frac{L}{\Gamma_\Omega^2}$. Agora, usando que $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^4} = \frac{7\pi^4}{720}$, chegamos

a

$$\sigma_{av}(\omega) = \frac{7a^4}{720}\Gamma_\omega, \quad (4.13)$$

que confirma a dependência linear obtida por [17] com o devido pré fator. Uma característica pertinente nesse cálculo é que o valor médio não depende da largura, Δ , escolhida para a delta de Dirac. Para a variância temos, por definição

$$Var(\sigma) = \langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2. \quad (4.14)$$

Calculando a média do quadrado de $\sigma(\omega)$ a partir da segunda derivada de $R(\lambda)$

$$\begin{aligned} \langle \sigma^2 \rangle &= \int d\sigma S(\sigma) \sigma^2 \\ &= - \left. \frac{d^2 [R^N(\lambda)]}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} \\ &= - \left\{ N(N-1) R^{N-2}(\lambda=0) \left[\left. \frac{dR(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \right]^2 + N R^{N-1}(\lambda=0) \left. \frac{d^2 R(\lambda)}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} \right\} \\ &= -N(N-1) \left[\left. \frac{dR(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \right]^2 - N \left. \frac{d^2 R(\lambda)}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

chegamos a

$$\begin{aligned} Var(\sigma) &= \langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2 \\ &= -N(N-1) \left[\left. \frac{dR(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \right]^2 - N \left. \frac{d^2 R(\lambda)}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} - \left[iN \left. \frac{dR(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \right]^2 \\ &= N \left[\left[\left. \frac{dR(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} \right]^2 - \left. \frac{d^2 R(\lambda)}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} \right]. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Utilizando os seguintes resultados

$$\int dx x^4 e^{-ax} = \frac{24}{a^5} \quad (4.17)$$

e

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^8} = \frac{127\pi^8}{1209600}, \quad (4.18)$$

obtemos que

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2 R(\lambda)}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} &= -\Delta \left(\frac{\omega}{4L\Delta} \right)^2 \frac{127a^8\Gamma_{\omega}^7}{12600\omega} \\ &= -\frac{127}{12600} \frac{a^8\omega\Gamma_{\omega}^7}{L^2\Delta}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Substituindo os resultados em (4.14)

$$\begin{aligned} Var(\sigma) &= \frac{L}{\Gamma_{\omega}^2} \left(-\frac{49}{129600} \frac{a^8\Gamma_{\omega}^6}{L^2} + \frac{127}{12600} \frac{a^8\omega\Gamma_{\omega}^7}{L^2\Delta} \right) \\ &= \frac{a^8\Gamma_{\omega}^4}{L} \left(\frac{127}{1209600} \frac{\omega\Gamma_{\omega}}{\Delta} - \frac{49}{129600} \right). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Percebamos que o primeiro termo de (4.20) possui a razão ω/Δ . A largura escolhida para a delta de Dirac, Δ , é da ordem da frequência ω . Isto é feito para não privilegiar nenhuma frequência em particular. Com essa escolha, no limite de $\Gamma_{\omega} \rightarrow \infty$ o primeiro termo domina sobre o segundo, mostrando que

$$\Delta\sigma = \sqrt{Var(\sigma)} \sim \Gamma_{\omega}^{5/2}. \quad (4.21)$$

A Eq. (4.21) nos mostra que à medida que o método flui, o desvio padrão cresce cada vez mais, divergindo no limite $\omega \rightarrow 0$

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_{av}} \sim \Gamma_{\Omega}^{3/2} \rightarrow \infty. \quad (4.22)$$

Este fato indica que as distribuições tendem a ficar muito largas e, portanto, deve existir uma grande discrepância entre a média aritmética e a média geométrica de $\sigma(\omega)$.

Outra característica importante é que, ao contrário da média, a variância depende da largura escolhida da delta, Δ , e isso vale para todos os momentos superiores da distribuição. Este fato

não é restrito à representação caixa da delta de Dirac. Para ver isso, voltemos à Eq. (4.5), na qual não escolheremos nenhuma representação específica para a delta de Dirac. A variância depende de $\left. \frac{d^2 R(\lambda)}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0}$, de maneira que

$$\left. \frac{d^2 R(\lambda)}{d\lambda^2} \right|_{\lambda=0} \sim -\frac{\omega^2}{L^2} \int d\mathbf{l} l^4 \int dJ P(J, l|\omega) \delta^2(\omega - J). \quad (4.23)$$

Uma escolha para a quantidade $\delta^2(\omega - J)$ seria fazer

$$\delta^2(\omega - J) \rightarrow \delta(0)\delta(\omega - J), \quad (4.24)$$

onde $\delta(0)$ é exatamente o inverso da largura da representação escolhida. Assim, fica claro que esta dependência é inerente à escolha da delta de Dirac.

Em particular, no Apêndice C calculamos o valor médio da condutividade e a variância para uma representação do tipo lorentziana. Comparando as expressões obtidas nas duas escolhas, vemos que os valores médio coincidem e que a variância possui o mesmo comportamento, com a dependência esperada com a largura da delta.

4.2 Comparação entre valor médio e valor típico

Suponha que exista uma amostra de 1.000 números, dos quais 999 são da ordem de 10^{-5} e apenas um deles é dado por 10^5 . A média destes números é da ordem de 10^2 , claramente dominada pela única exceção 10^5 . Por outro lado, o valor mais provável de se obter ao se pegar aleatoriamente um deles é 10^{-5} . Neste sentido, quando se trabalha com distribuições muito largas o valor médio pode não ser uma boa quantidade para caracterizá-las. Assim, costuma-se tomar o valor mais provável para estudar tais distribuições. Este valor é dado pela posição do pico da distribuição. Em aplicações numéricas o valor mais provável não é o mais conveniente de se calcular.

Em alguns tipos de distribuições, como a log-normal, o valor mais provável é igual à média geométrica, definida como a exponencial da média do log da quantidade:

$$x_{typ} = e^{\langle \ln x \rangle}. \quad (4.25)$$

Mesmo em distribuições em que estas quantidades não são idênticas, a média geométrica é uma excelente aproximação para o valor mais provável. Assim, costuma-se utilizar a média geométrica como o valor mais provável. Toda essa discussão tem um impacto importante na condutividade em sistemas desordenados unidimensionais. No caso DC , σ possui grandes flutuações em 1 dimensão [19]:

$$\sigma_{av} \gg \sigma_{typ} \sim e^{\langle \ln \sigma \rangle}. \quad (4.26)$$

Por isso, decidimos investigar numericamente a média geométrica de $\sigma(\omega)$ e compará-la ao valor médio de $\sigma(\omega)$ a fim de caracterizar o modelo em relação a suas propriedades de transporte.

4.3 Resultados numéricos

Nesta seção apresentam-se os resultados numéricos obtidos através do GRDF. Os acoplamentos iniciais são gerados a partir de uma distribuição uniforme, i.e., do tipo caixa no intervalo $[0, 1]$. Os dados são gerados para diferentes tamanhos L e para cada tamanho são geradas 100.000 cadeias, através de diferentes realizações de desordem, e as médias de interesse são calculadas. Em particular, calculam-se a média aritmética e a média geométrica, Eq. (4.25). O cálculo é feito discretizando o eixo de frequências e calculando as devidas contribuições da condutividade em cada intervalo de frequência.

Antes porém, de apresentar os dados, deve-se discutir a questão da representação da delta de Dirac. No cálculo analítico, utilizou-se uma representação do tipo caixa, que implica que quando se calcula a contribuição de $\sigma(\omega)$, procura-se em que intervalo esta frequência ω está e acrescenta-se o valor da condutividade naquele intervalo. Contudo, se em um dado intervalo não houver nenhuma contribuição, então a condutividade naquele intervalo é nula e isso impossibilita o cálculo da média geométrica. Por essa razão, numericamente escolheu-se uma representação lorentziana da função delta, centrada no intervalo de frequência em que a frequência ω se

encontra.

$$\delta(x) = \frac{b}{\pi} \frac{1}{b^2 + x^2}. \quad (4.27)$$

Assim, todos os intervalos de frequência recebem alguma contribuição não nula da condutividade. Esse procedimento abre a possibilidade de calcular a média geométrica. Ainda é preciso fazer um ajuste na representação da função. A lorentziana acima tem suporte para valores negativos do argumento, o que não é conveniente, pois os valores de frequência ficam cada vez menores, porém nunca são menores que zero. Assim, é necessário multiplicar a lorentziana por um fator que, a baixas frequências, faça com que ela tenda a zero e só tenha suporte para $\omega > 0$. Portanto, utiliza-se numericamente a seguinte representação

$$\delta_{\Delta}(\omega - \Omega) = \frac{\kappa}{\Delta^2 + (\omega - \Omega)^2} \left\{ 1 + \left[\left(\frac{\omega}{\Omega} \right)^2 - 1 \right] \Theta(\Omega - \omega) \right\}, \quad (4.28)$$

onde Δ é a largura da função e κ é o fator de normalização. O segundo termo garante que a função vá a zero para $\omega \rightarrow 0$.

A Fig. 4.1 mostra o desvio padrão da distribuição obtido numericamente comparado com a previsão analítica para duas representações da função delta: do tipo caixa e lorentziana, ver Apêndice C. A concordância é muito boa assintoticamente.

É importante esclarecer que, a fim de fazer com que as curvas coincidam, foi necessário corrigir a largura da delta na expressão analítica, Eq.(4.20), por um fator multiplicativo. Para a expressão analítica obtida da representação do tipo caixa, este fator foi de 5,5, enquanto pra lorentziana foi de 0,6. Esta correção é necessária porque a representação da delta de Dirac usada numericamente não é exatamente a mesma expressão usada no cálculo analítico e, o fato de o fator multiplicativo ser menor pra lorentziana, é consequência de que a representação numérica, Eq. (4.28), é mais próxima desta última. Apesar deste fator, a concordância das curvas é bastante satisfatória e a previsão analítica capta a dependência do desvio padrão com a frequência.

Assim, de fato, o desvio padrão aumenta com a diminuição da frequência, indicando que

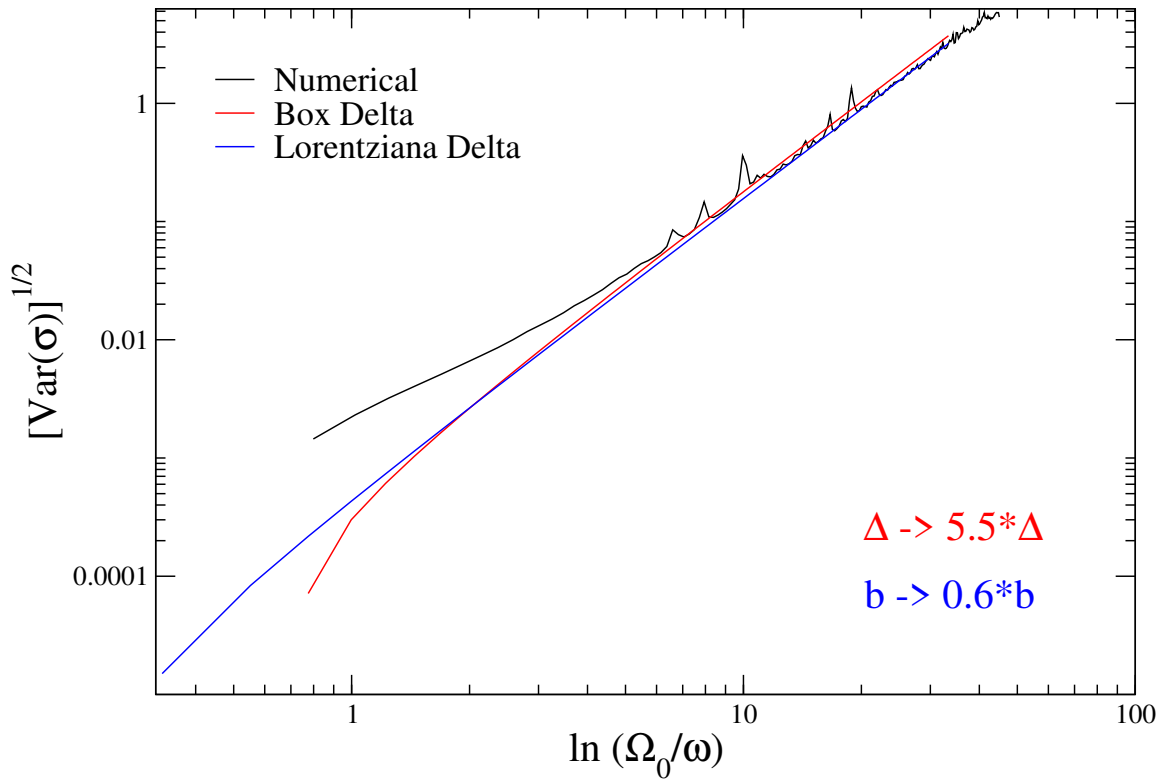


Figura 4.1: Desvio padrão da condutividade como função da frequência obtido numericamente (curva preta), analiticamente com uma função delta do tipo caixa (curva vermelha) e com uma função delta do tipo lorentziana (curva azul). Para que as curvas analíticas e numérica coincidam foi necessário um fator multiplicativo para a largura da função teste. No caso da delta do tipo caixa, este fator foi de 5,5, enquanto para a delta do tipo lorentziana, o fator foi de 0,6.

deve haver uma grande discrepância entre a média aritmética de $\sigma(\omega)$ e a média geométrica de $\sigma(\omega)$, sendo esta muito menor que a anterior. Portanto, calculamos numericamente as duas grandezas para diferentes tamanhos, L , da cadeia e os resultados obtidos são mostrados na Fig. 4.2.

Pode ser visto pelas curvas obtidas que, como obtido por [17], a condutividade média reescala com o tamanho e que seu comportamento é linear com $\ln\left(\frac{\Omega_0}{\omega}\right)$, divergindo para $\omega \rightarrow 0$. A parte direita da curva é devido a efeitos de tamanho finito e não é o foco deste projeto. Como

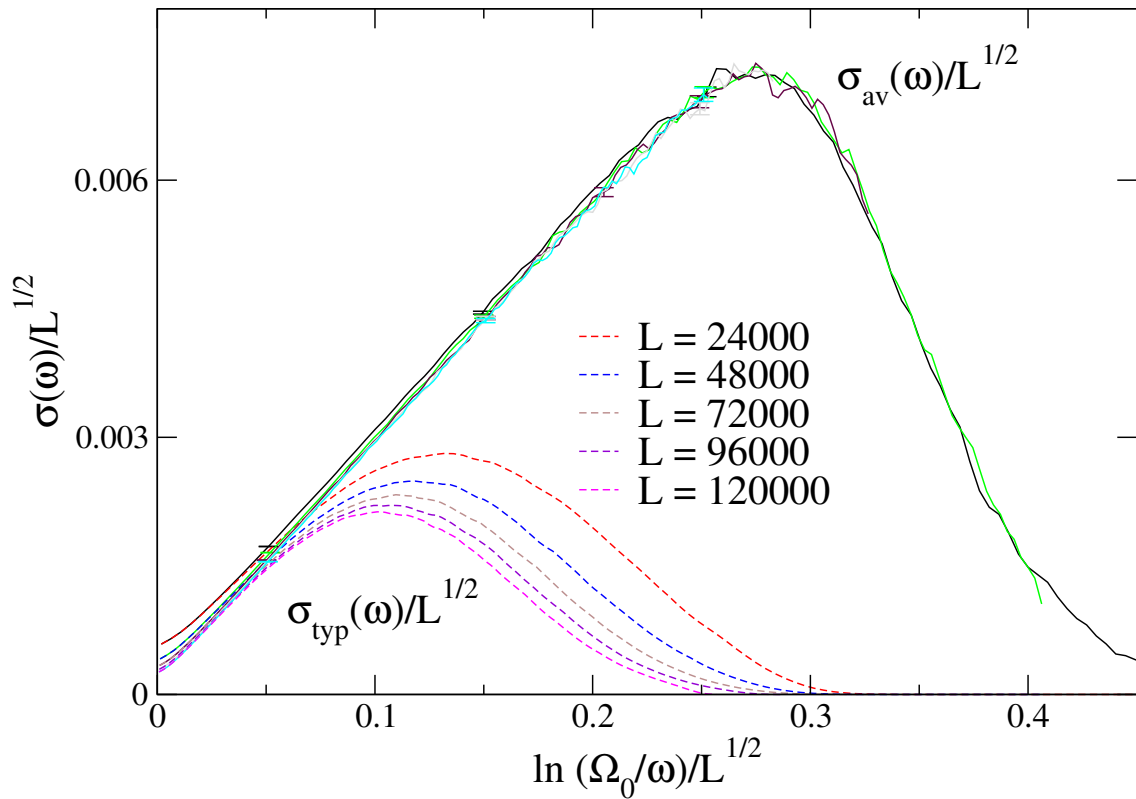


Figura 4.2: Condutividade média e típica para diferentes tamanhos, re-escalonadas por \sqrt{L} . As linhas sólidas são os valores médios e as linhas tracejadas são os valores típicos.

não estamos interessados em comparar os dados obtidos através do GRDF com diagonalização exata, podemos ir até tamanhos bem maiores que os calculados por [17].

Por outro lado, quando plotamos o valor típico devidamente re-escalonado percebamos que o mesmo vai diminuindo à medida que o tamanho aumenta. Portanto, fixando uma determinada frequência, o valor médio re-escalonado não se altera com o tamanho, mas o valor típico diminui com o aumento de L . Tomando o limite termodinâmico, a média geométrica vai a zero, indicando um comportamento isolante para o modelo. Assim, conforme no caso DC [19], o valor típico é muito menor que o valor médio e é a grandeza apropriada para caracterizar esse modelo quanto a suas propriedades de transporte. A razão dessa diferença entre valores médio e típico pode ser compreendida a partir das distribuições de $\sigma(\omega)$ para diferentes valores da

frequência. A Fig. 4.3 apresenta a distribuição de $\log \sigma(\omega)$ para alguns valores da frequência, para $L = 96.000$.

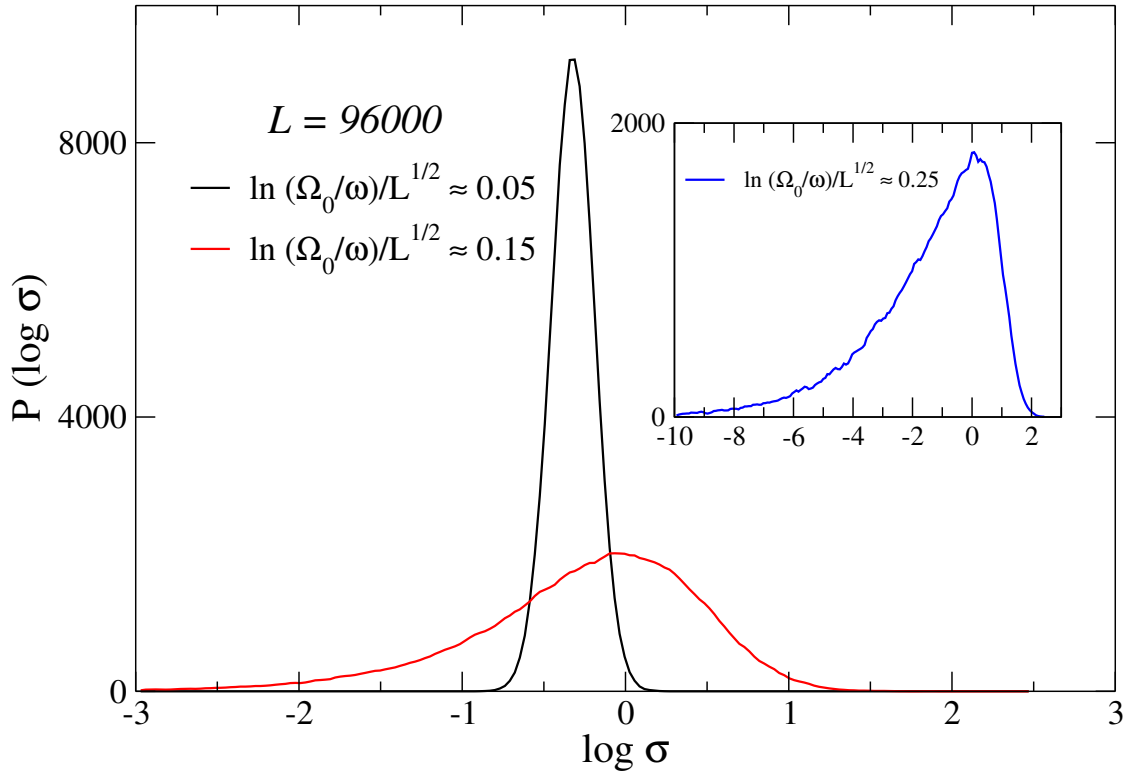


Figura 4.3: Distribuições do logaritmo da condutividade para $\ln \frac{\Omega_0}{\omega} / \sqrt{L} \approx 0.05$, $\ln \frac{\Omega_0}{\omega} / \sqrt{L} \approx 0.15$ e $\ln \frac{\Omega_0}{\omega} / \sqrt{L} \approx 0.25$. O tamanho utilizado para os histogramas foi $L = 96.000$.

Pelos histogramas, pode-se ver que à medida que a frequência dimiu, a largura das distribuições aumenta. De fato, para $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega}) / \sqrt{L} \approx 0,25$, a largura é da ordem de 12 décadas. Com base nisso, a discrepância entre valor médio e típico fica clara, já que o valor médio é dominado pela cauda superior da distribuição, enquanto o valor típico é bem menor, próximo do pico da curva. Por isso esta última é a grandeza mais indicada para caracterizar o comportamento do sistema.

A representação da função delta de Dirac deve ser sempre usada fazendo sua largura tender a zero. Por isso, é importante verificar como os nossos resultados se comportam quando a largura é variada. Com base na Eq. (4.13), vê-se que o valor médio não depende da largura

escolhida, enquanto os momentos superiores da distribuição dependem. Assim, estudamos o comportamento da condutividade média e típica como função da largura da delta. A Fig. 4.4 apresenta os resultados obtidos para $L = 24.000$.

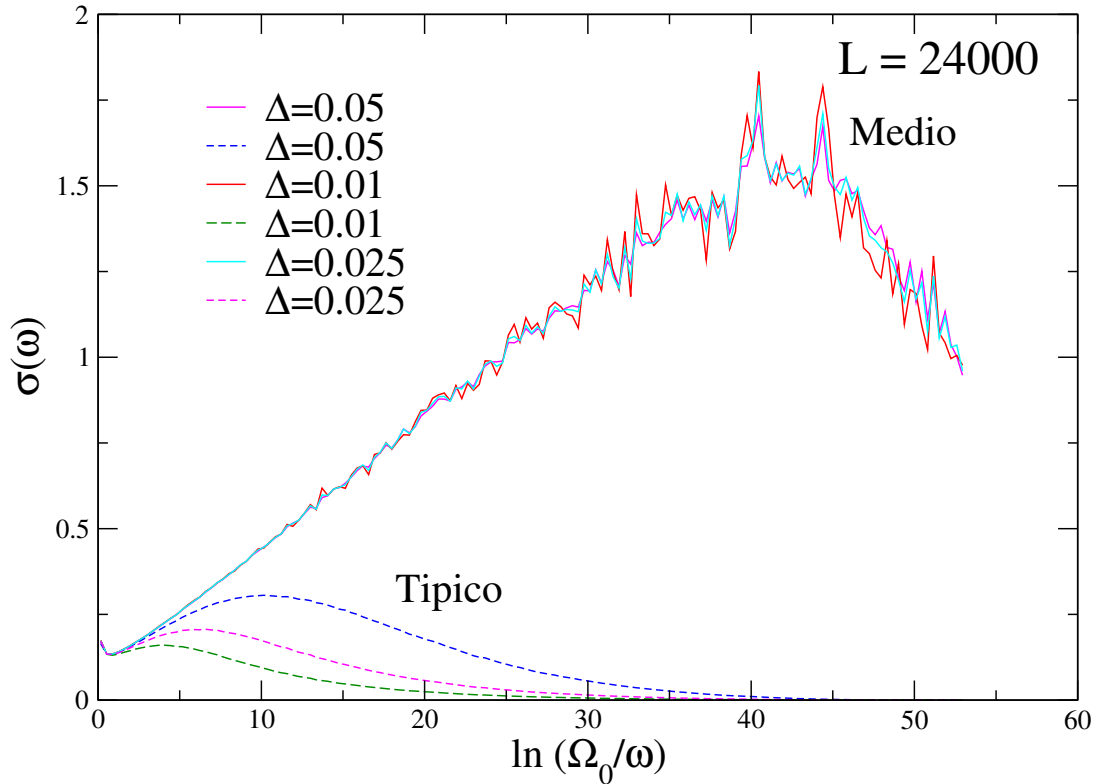


Figura 4.4: Condutividade média (linhas sólidas) e típica (linhas tracejadas) para diferentes larguras, Δ , da função delta utilizadas numericamente. Estes dados foram obtidos para $L = 24.000$.

Com base no resultado anterior, pode-se ver que, de fato, o valor médio da condutividade converge para uma curva universal que não depende da largura utilizada. O aumento da flutuação é explicado pelo fato de que, com a largura menor, a estatística de σ nas diferentes escalas de frequência é afetada. Contudo, o valor típico, que depende de todos os momentos da distribuição, se altera com a mudança da largura, confirmando a previsão analítica. Em sistemas reais, processos inelásticos extrínsecos ao modelo levam ao alargamento da função delta de Dirac

e dão origem a esta dependência com a largura. Para se prever isso com exatidão, deve-se levar em conta fônons, mágnons ou os contatos.

Transporte de spin: Modelo $S=1$

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos para o transporte de spin para a cadeia de spin para $S = 1$. Inicia-se com a retomada do modelo utilizado, já apresentado no Capítulo 2. Calcula-se o operador corrente para este modelo e como ele se renormaliza nas dizimações de 1ª e 2ª ordem. Utiliza-se a fórmula de Kubo para encontrar a expressão da condutividade. Em seguida, apresentam-se os resultados numéricos obtidos para a condutividade nas duas fases de interesse do modelo e as distribuições desta quantidade.

5.1 Modelo

O hamiltoniano utilizado para $S = 1$ é dado por

$$H = \sum_i [J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + D_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2], \quad (5.1)$$

e assim como para o caso XX o spin total na direção z é conservado, já que $[H, S_z^T] = 0$, e o operador corrente é encontrado através da equação da continuidade, Eq.(3.8), já em sua forma discretizada. A densidade se escreve da mesma maneira, $n_k = \frac{1}{a} S_k^z$, de maneira que obtemos

$$\frac{\partial \tau_{k,k+1}}{\partial x} = -\frac{i}{a} [H, S_k^z], \quad (5.2)$$

onde $\frac{\partial \tau_{k,k+1}}{\partial x} \rightarrow \frac{\tau_{k,k+1} - \tau_{k-1,k}}{a}$. Calculando o comutador

$$\begin{aligned}
[H, S_k^z] &= \frac{J_k}{2} (S_k^+ S_{k+1}^- - S_{k+1}^+ S_k^-) - \frac{J_{k-1}}{2} (S_{k-1}^+ S_k^- - S_k^+ S_{k-1}^-) + \\
&+ \frac{D_k}{2} [(S_k^+ S_{k+1}^- - S_{k+1}^+ S_k^-) \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{k+1} + \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{k+1} (S_k^+ S_{k+1}^- - S_{k+1}^+ S_k^-)] - \\
&- \frac{D_{k-1}}{2} [(S_{k-1}^+ S_k^- - S_k^+ S_{k-1}^-) \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{k+1} + \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{k+1} (S_k^+ S_{k+1}^- - S_k^+ S_{k-1}^-)] \quad (5.3)
\end{aligned}$$

Assim, comparando o lado direito de (5.2) com o lado direito de (5.3), vemos que o operador corrente é dado por

$$\begin{aligned}
\tau_{k,k+1} &= i \frac{J_k}{2} (S_k^+ S_{k+1}^- - h.c.) + \\
&+ i \frac{D_k}{2} [(S_k^+ S_{k+1}^- - h.c.) \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{k+1} + \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{k+1} (S_k^+ S_{k+1}^- - h.c.)] \quad (5.4)
\end{aligned}$$

Agora, devemos calcular como o operador corrente se renormaliza numa dizimação. Como foi mostrando no Capítulo 2, há duas regiões. Em uma o estado fundamental do par mais fortemente ligado é um singlete e na outra um tripleto. Começemos pelo caso do singlete. Utilizamos teoria de perturbação para obter como os sítios adjacentes respondem a este processo. Suponha que o par de sítios com o maior gap seja o 2 e 3 e devemos obter um novo operador corrente entre os sítios 1 e 4. Nesse caso, os elementos de matriz do novo operador se escrevem como

$$\tilde{\tau}_{1,4} = \langle l_1 \tau_{1,2} + l_2 \tau_{2,3} + l_3 \tau_{3,4} \rangle \quad (5.5)$$

onde o valor esperado é calculado pelo estado perturbado

$$|\psi\rangle = |\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + |\psi^{(2)}\rangle, \quad (5.6)$$

onde os estados $|\psi^{(1)}\rangle$ e $|\psi^{(2)}\rangle$ são dados segundo teoria de perturbação de 1ª e 2ª ordem, respectivamente, [23]

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{S \neq 0, M \neq 0} \frac{\langle SM | V | 00 \rangle}{(E_{00}^{(0)} - E_{SM}^{(0)})} |SM\rangle, \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} |\psi^{(2)}\rangle &= \sum_{S \neq 0, S' \neq 0, M, M'} \frac{\langle SM | V | S' M' \rangle \langle S' M' | V | 00 \rangle}{(E_{00}^{(0)} - E_{SM}^{(0)}) (E_{00}^{(0)} - E_{S' M'}^{(0)})} |SM\rangle \\ &- \sum_{S \neq 0, M} \frac{\langle 00 | V | 00 \rangle \langle SM | V | 00 \rangle}{(E_{00}^{(0)} - E_{SM}^{(0)})^2} |SM\rangle \\ &- \frac{1}{2} \sum_{S \neq 0, M} \frac{\langle 00 | V | SM \rangle \langle SM | V | 00 \rangle}{(E_{00}^{(0)} - E_{SM}^{(0)})^2} |00\rangle, \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde $|00\rangle$ é o singlete entre os sítios 2 e 3, $|SM\rangle$ são os estados excitados, $E_{00}^{(0)}$ é a energia do estado fundamental dada pela diagonalização de (3.11) e $E_{SM}^{(0)}$ a energia dos estados excitados.

Nessa região o singlete é dado por

$$|S = 0, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|1, -1\rangle - |0, 0\rangle + |-1, 1\rangle), \quad (5.9)$$

cuja energia é $4D_2 - 2J_2$.

Os estados e energias não perturbados são calculados da diagonalização de

$$H_0 = \frac{J_2}{2} (S_2^+ S_3^- + S_2^- S_3^+ + 2S_2^z S_3^z) + \frac{D_2}{4} (S_2^+ S_3^- + S_2^- S_3^+ + 2S_2^z S_3^z)^2, \quad (5.10)$$

onde já escrevemos os operadores de spin nas direções x, y em termos dos operadores escada.

A perturbação é dada por

$$\begin{aligned} V &= \frac{J_1}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + 2S_1^z S_2^z) + \frac{J_3}{2} (S_3^+ S_4^- + S_3^- S_4^+ + 2S_3^z S_4^z) \\ &+ \frac{D_1}{4} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+ + 2S_1^z S_2^z)^2 + \frac{D_3}{4} (S_3^+ S_4^- + S_3^- S_4^+ + 2S_3^z S_4^z)^2. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Calculando o estado perturbado e posteriormente substituindo em (5.5), obtemos que, conforme demonstrado no Apêndice D, o operador corrente entre os sítios 1 e 4 é dado por

$$\begin{aligned}\tilde{\tau} &= \tilde{l}i\frac{\tilde{J}}{2}(S_1^+S_4^- - h.c.) \\ &+ \tilde{l}i\frac{\tilde{D}}{2}[(S_1^+S_4^- - h.c.)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4(S_1^+S_4^- - h.c.)],\end{aligned}\quad (5.12)$$

onde $\tilde{l} = l_1 + l_2 + l_3$.

Quando o multipleteo fundamental é o tripleto, temos que

$$|\psi\rangle = |S = 1, M\rangle + |\psi^{(1)}\rangle, \quad (5.13)$$

onde $|S = 1, M\rangle$ indica os estados de tripleto do problema não perturbado. Neste caso, basta ir até 1ª ordem em teoria de perturbação no estado, ver Apêndice D, e a perturbação é a mesma, Eq. (5.11). Porém, aqui os sítios 2 e 3 são congelados no estado de tripleto, sendo, portanto, representados de maneira efetiva por um spin de $S = 1$. Assim, há dois operadores corrente, entre o spin 1 e o novo spin e entre o mesmo e o spin 4. A expressão é dada pela Eq. (5.5), de maneira que:

$$\begin{aligned}\tilde{\tau}_1 &= \tilde{l}_1i\frac{\tilde{J}_1}{2}(S_1^+\tilde{S}^- - h.c.) \\ &+ \tilde{l}_1i\frac{\tilde{D}_1}{2}[(S_1^+\tilde{S}^- - h.c.)\mathbf{S}_1 \cdot \tilde{\mathbf{S}} + \mathbf{S}_1 \cdot \tilde{\mathbf{S}}(S_1^+\tilde{S}^- - h.c.)]\end{aligned}\quad (5.14)$$

e

$$\begin{aligned}\tilde{\tau}_4 &= \tilde{l}_3i\frac{\tilde{J}_4}{2}(S_4^+\tilde{S}^- - h.c.) \\ &+ \tilde{l}_3i\frac{\tilde{D}_4}{2}[(S_4^+\tilde{S}^- - h.c.)\mathbf{S}_4 \cdot \tilde{\mathbf{S}} + \mathbf{S}_4 \cdot \tilde{\mathbf{S}}(S_4^+\tilde{S}^- - h.c.)],\end{aligned}\quad (5.15)$$

onde, nesse caso, os tamanhos efetivos se escrevem como $\tilde{l}_1 = l_1 + l_2/2$ e $\tilde{l}_3 = l_3 + l_2/2$, vide Apêndice D.

A Fig. 5.1 mostra esquematicamente o processo de dizimação nos dois casos. Fica claro pelas expressões acima que, assim como no caso XX , após a dizimação há um operador corrente

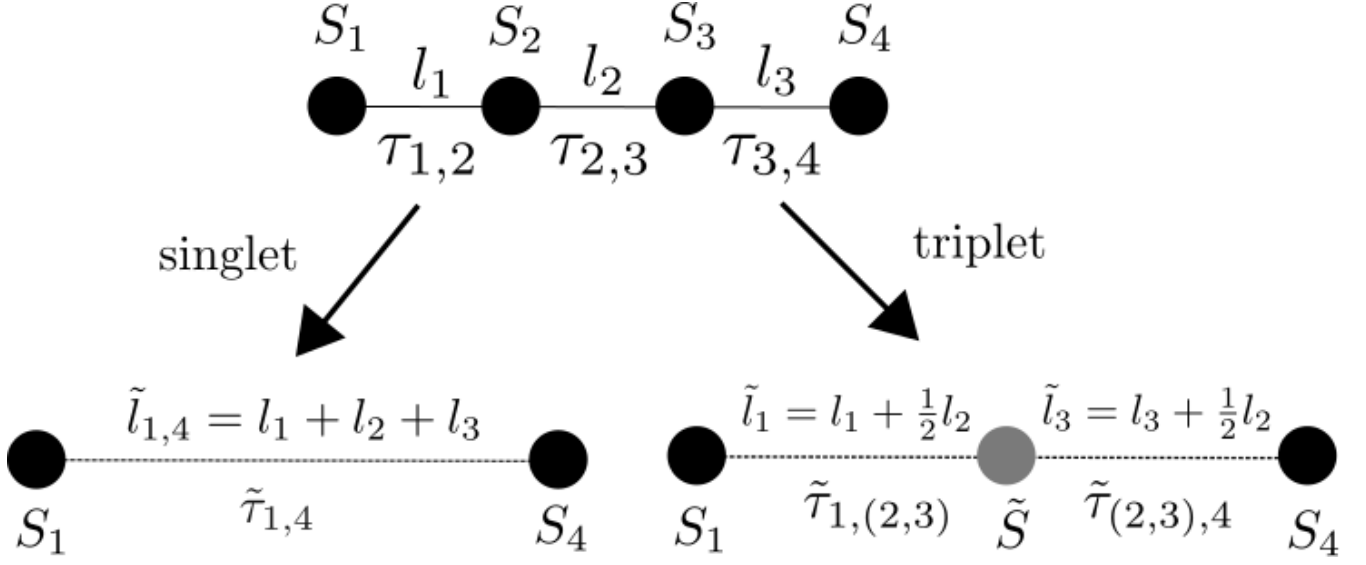


Figura 5.1: Esquema representando a renormalização dos operadores corrente nas dizimações.

entre os sítios adjacentes, com os devidos acoplamentos renormalizados e com a distância efetiva entre os sítios. O Apêndice D também apresenta o cálculo geral da renormalização do operador corrente quando o estado fundamental é um multipletto com spin total S_G . Portanto, pode-se escrever que a medida que o método flui os operadores se renormalizam como

$$\tau \rightarrow \tilde{l}\tilde{\tau}. \quad (5.16)$$

Com base nisso, pode-se calcular a expressão da condutividade a partir da fórmula de Kubo

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{\omega L} \sum_m \left| \left\langle m \left| \sum_k \tau_{k,k+1} \right| 0 \right\rangle \right|^2 \delta(\omega - E_m). \quad (5.17)$$

Começamos pela região em que o estado fundamental é o singlete. Calcularemos a atuação do operador corrente de spin no par de sítios adjacentes. Assim, denotamos $|M_1, M_2\rangle$ como a componente z de cada sítio, $|S, M\rangle$ como o momento angular total do par de sítios e sua componente em z e $|S_G, M_G\rangle$ denota o multipletto fundamental do par de sítios. Temos que

$$\begin{aligned}
\tau_1 |S_G = 0, M = 0\rangle &= \tau_1 \frac{1}{\sqrt{3}} (|1, -1\rangle - |0, 0\rangle + |-1, 1\rangle) \\
&= \frac{i}{\sqrt{3}} (3D_1 - J_1) (|1, -1\rangle - |-1, 1\rangle).
\end{aligned} \tag{5.18}$$

O único estado excitado que contribui na soma é dado por

$$|S_G = 1, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, -1\rangle - |-1, 1\rangle), \tag{5.19}$$

ver Apêndice B. Como o operador corrente é um operador vetorial, ou seja, um tensor de ordem 1, pela relação triangular de soma de momento angular somente os estados de tripleto poderiam ser acessados [23]. Assim, nesse caso

$$\left| \left\langle m \left| \sum_j \tilde{l}_j \tilde{\tau}_j \right| 0 \right\rangle \right|^2 = \frac{2\tilde{l}^2}{3} (3D - J)^2 = \frac{2\tilde{l}^2}{3} \omega^2, \tag{5.20}$$

onde ω representa o gap entre o singleto e o tripleto.

Para a região em que o multiplete fundamental é o tripleto, a relação triangular de soma de momento angular [23] permite que haja excitações tanto para singleto quanto para quintuplete. De fato, aplicando o operador corrente nos estados de $M = \pm 1$ do tripleto

$$|S_G = 1, M_G = \pm 1\rangle = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (|\pm 1, 0\rangle - |0, \pm 1\rangle), \tag{5.21}$$

tem-se que

$$\tau_1 |S_G = 1, M = \pm 1\rangle = -\frac{iJ_1}{\sqrt{2}} (|\pm 1, 0\rangle + |0, \pm 1\rangle). \tag{5.22}$$

Para cada estado desses, o único elemento de matriz não nulo é dado pelos estados

$$|S = 2, M = \pm 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\pm 1, 0\rangle + |0, \pm 1\rangle), \tag{5.23}$$

do qual obtém-se

$$\left\langle m \left| \sum_j \tilde{l}_j \tilde{\tau}_j \right| 0 \right\rangle = -iJ_1 = -i\frac{\omega}{2}. \quad (5.24)$$

Aplicando agora o operador no estado de tripleto de $M_G = 0$:

$$|S_G = 1, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, -1\rangle - |-1, 1\rangle), \quad (5.25)$$

obtemos

$$\tau_1 |S_G = 1, M_G = 0\rangle = i\sqrt{2} [(D_1 - J_1) |0, 0\rangle - D_1 (|1, -1\rangle + |-1, 1\rangle)]. \quad (5.26)$$

Assim, há contribuições não nulas de $|S = 0, M = 0\rangle$ e $|S = 2, M = 0\rangle$

$$\langle S = 2, M = 0 | \tau_1 | S_G = 1, M_G = 0 \rangle = -i\frac{2}{\sqrt{3}}J_1 = -i\frac{\omega}{\sqrt{3}}, \quad (5.27)$$

$$\langle S = 0, M = 0 | \tau_1 | S_G = 1, M_G = 0 \rangle = -i\sqrt{\frac{2}{3}}(3D_1 - J_1) = i\sqrt{\frac{2}{3}}\omega. \quad (5.28)$$

No Apêndice E os elementos de matriz são obtidas de forma genérica, para a transição entre o multipletto fundamental e qualquer estado excitado. Assim, quando o estado fundamental é um singlete o elemento de matriz da transição é dado por

$$\left| \left\langle m \left| \sum_j \tilde{l}_j \tilde{\tau}_j \right| 0 \right\rangle \right|^2 = \frac{2\tilde{l}^2}{3} (3D - J)^2 = \frac{2\tilde{l}^2}{3} \omega^2, \quad (5.29)$$

onde ω é o gap o singlete e o tripleto.

Quando o multipletto fundamental é o tripleto, o elemento de matriz para o singlete é dado por

$$\left| \left\langle m \left| \sum_j \tilde{l}_j \tilde{\tau}_j \right| 0 \right\rangle \right|^2 = \frac{2\tilde{l}^2}{3} (J - 3D)^2 = \frac{2\tilde{l}^2}{3} \omega^2, \quad (5.30)$$

enquanto para o quintupletto é

$$\left| \left\langle m \left| \sum_j \tilde{l}_j \tilde{\tau}_j \right| 0 \right\rangle \right|^2 = \frac{5\tilde{l}^2}{3} (2J)^2 = \frac{2\tilde{l}^2}{6} \omega^2. \quad (5.31)$$

5.2 Resultados numéricos

Nesta seção, serão apresentados os resultados numéricos para as duas fases de interesse do modelo. Para a região $-\frac{3\pi}{4} \leq \theta \leq \arctan(\frac{1}{3})$, na qual as dizimações são apenas de singlete, utilizaram-se tamanhos entre $L = 6.000$ e $L = 12.000$, com 50.000 realizações de desordem. O ângulo inicial foi de $\theta_i = -\frac{\pi}{4}$ e a desordem está nos raios r_i gerados a partir de uma distribuição tipo lei de potência com expoente $\alpha = 0.5$

$$P(r) = \frac{1}{\alpha} r^{1-\frac{1}{\alpha}}. \quad (5.32)$$

A representação numérica para a delta de Dirac utilizada é a mesma do caso anterior, Eq. (4.28). Na Fig. 5.2 são apresentados os resultados para o valor médio e o valor típico da condutividade, de maneira análoga ao modelo XX .

Nessa região do diagrama de fases, $\psi = \frac{1}{2}$ e por isso o re-escalonamento foi feito com \sqrt{L} , ver [17]. Com esse re-escalonamento, $\sigma_{av}(\omega)$ descreve uma curva universal. Assim, no limite de baixas frequências, $\omega \rightarrow 0$, a condutividade diverge, $\sigma_{av}(\omega) \sim \Gamma_\omega \rightarrow \infty$. O lado direito da curva apresenta efeitos de tamanho finito, que não são de interesse nessa tese. Por outro lado, o valor típico, à medida que L aumenta, tende a zero, mostrando que no limite termodinâmico o modelo é um isolante. Portanto, esta região do modelo apresenta o mesmo comportamento do modelo XX . Este fato poderia ter sido antecipado uma vez que nesta região do diagrama de fases o modelo apresenta $\theta = 0$ como ponto fixo, de maneira que o comportamento ao longo de toda região é similar a este ponto. Entretanto, este ponto é justamente o ponto de Heisenberg, cujo comportamento é análogo ao modelo XX .

A grande diferença entre valores médio e típico é explicada pelo aumento da largura das distribuições da condutividade à medida que a frequência diminui. A Fig. 5.3 apresenta o histograma para alguns valores de ω .

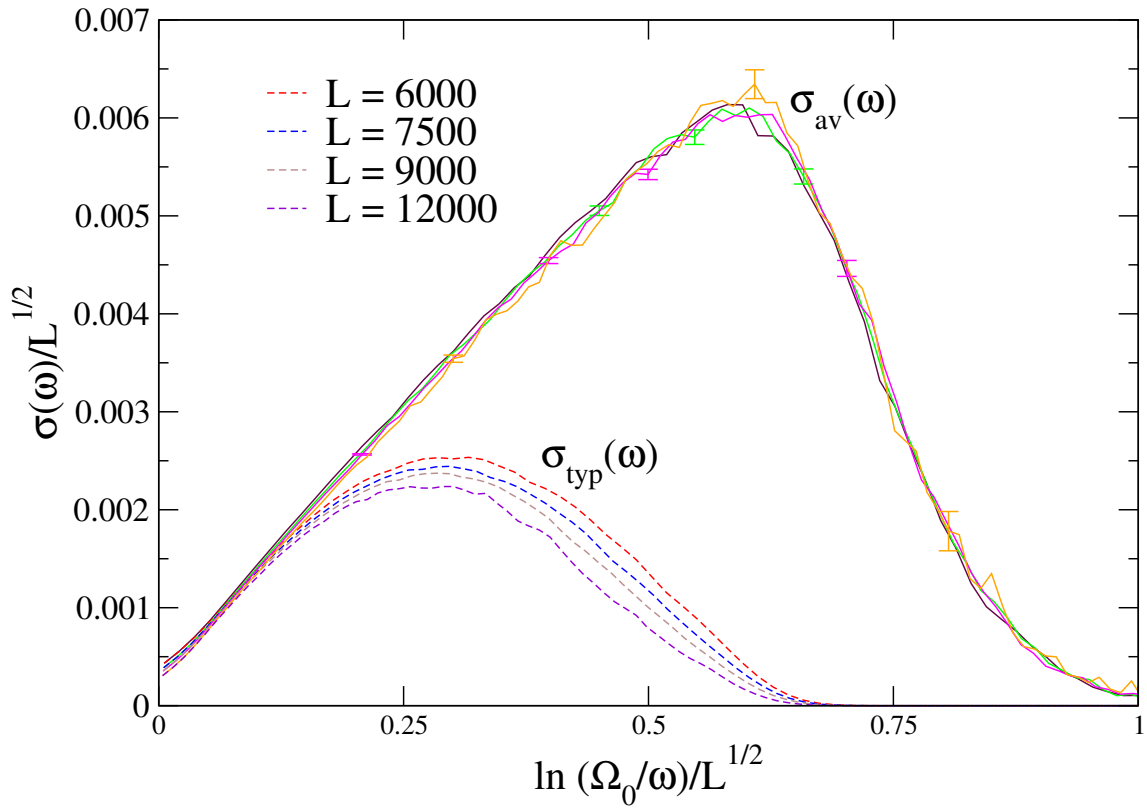


Figura 5.2: Condutividade média (linhas sólidas) e típica (linhas tracejadas) para $\theta_i = -\frac{\pi}{4}$ do diagrama de fases do modelo. O tamanho variou entre $L = 6.000$ e $L = 12.000$.

Da mesma maneira, o método foi também aplicado à região $\frac{\pi}{2} \leq \theta \leq \arctan(\frac{1}{3})$. Nesta região, fixou-se o ângulo inicial em $\theta = \arctan 2$ e variaram-se os tamanhos de $L = 90.000$ até $L = 270.000$. Neste caso, a desordem nos raios r_i foi obtida a partir de uma distribuição do tipo caixa, $r_i \in [0, 1]$. As curvas obtidas para as condutividades média e típica são apresentadas na Fig. 5.4.

Nessa região, o expoente dinâmico é dado por $\psi = \frac{1}{3}$ e, por isso, o re-escalamento é feito com $L^{1/3}$, ver [17]. O valor médio re-escalado da condutividade possui um comportamento universal, havendo efeitos de tamanho finito no lado direito da curva. No limite termodinâmico, $\sigma_{av}(\omega)$ diverge para $\omega \rightarrow 0$. Contudo, o valor típico parece diminuir à medida que L aumenta, o que indica um comportamento isolante. Ao contrário da outra região do modelo, as curvas

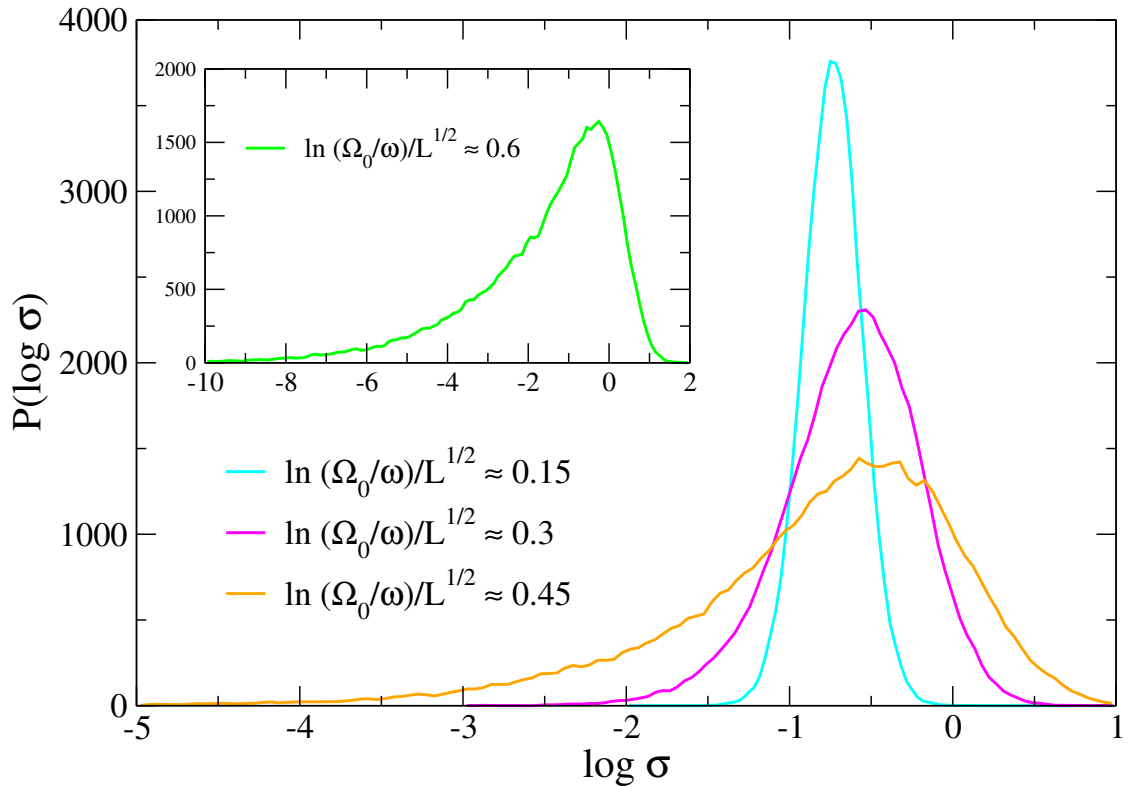


Figura 5.3: Distribuições de $\sigma(\omega)$ para alguns valores de frequência, $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega})/L^{1/2} \approx 0.15$, $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega})/L^{1/2} \approx 0.3$, $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega})/L^{1/2} \approx 0.45$ e $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega})/L^{1/2} \approx 0.6$. Estes histogramas foram obtidos para $L = 9.000$.

dependem mais fracamente de L , devido ao expoente ψ ser menor. Isso é explicado porque o fluxo do GRDF é mais lento e para se verem alterações apreciáveis foi necessário utilizar tamanhos bem maiores. Na Fig. 5.5 são mostradas as distribuições para alguns valores da frequência. Como nos casos anteriores, à medida que a frequência diminui as larguras das distribuições são cada vez maiores, chegando a varrer décadas de tamanho.

Assim, podemos ver que para este modelo de $S = 1$, os resultados obtidos são análogos ao caso XX. Em ambas as regiões de interesse do diagrama de fases do modelo, Fig. ??, a desordem leva a um alargamento das distribuições, o que implica que a média geométrica de $\sigma(\omega)$ seja bem menor que a média aritmética de $\sigma(\omega)$. Ao contrário do valor médio da

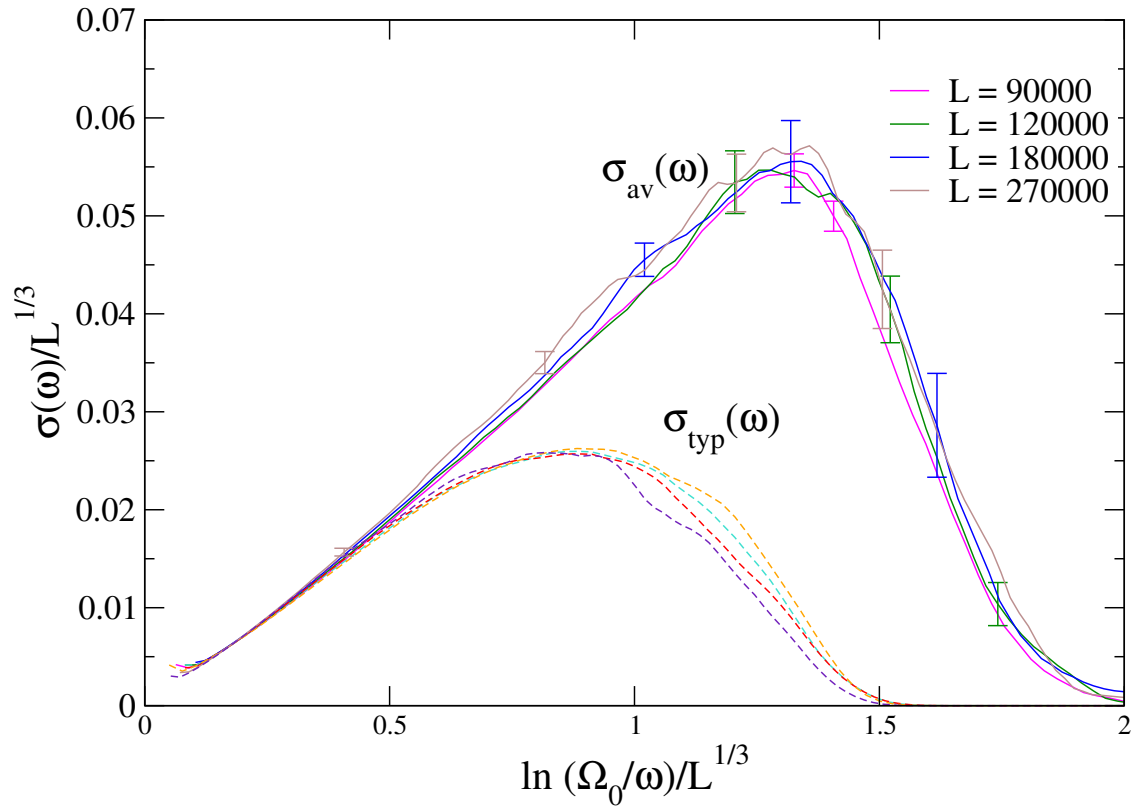


Figura 5.4: Condutividade média (linhas sólidas) e típica (linhas tracejadas) para $\theta = \arctan 2$ do diagrama de fases do modelo. As curvas foram re-escaladas por $L^{1/3}$. Os tamanhos foram variados de $L = 90.000$ até $L = 270.000$.

condutividade, o valor típico tende a zero, indicando um comportamento isolante para o modelo em questão. A diferença apreciável entre as duas regiões estudadas está no fato de o re-escalamento das curvas serem diferentes, $\psi = \frac{1}{2}$ para o caso em que o estado fundamental é o singlete, e $\psi = \frac{1}{3}$ quando o multiplete fundamental é o triplete.

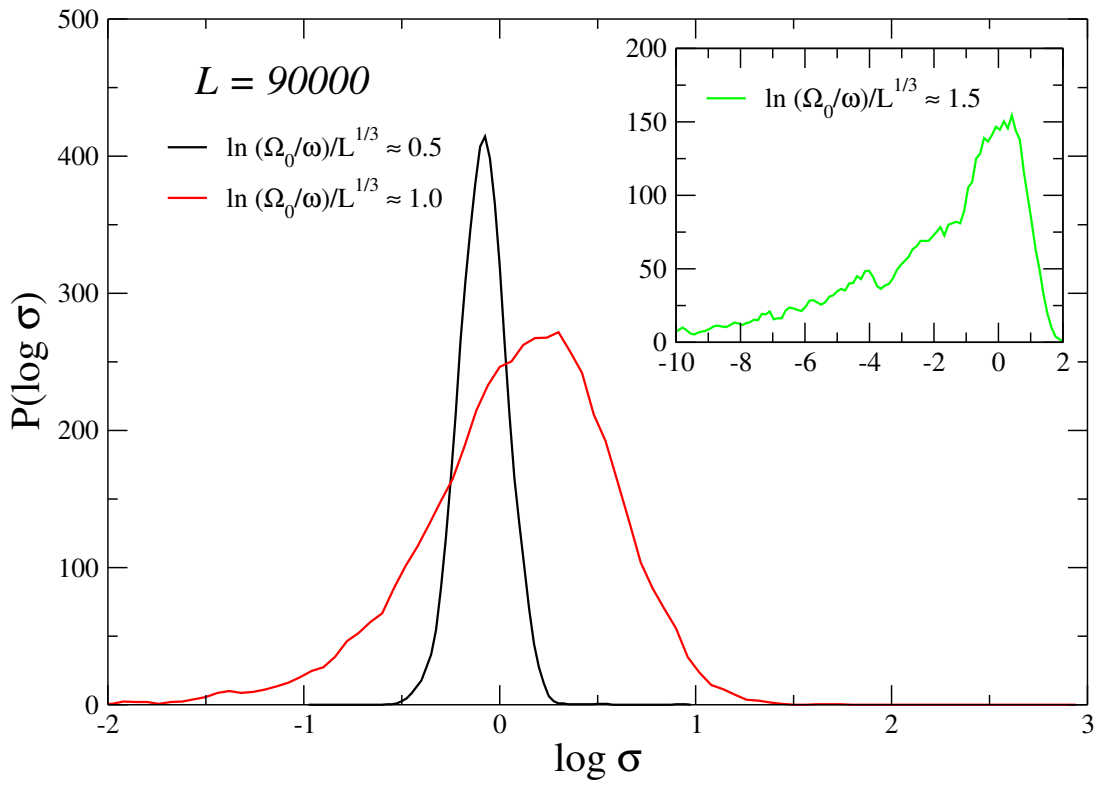


Figura 5.5: Distribuições de $\sigma(\omega)$ para alguns valores de frequência, $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega})/L^{1/3} \approx 0.5$, $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega})/L^{1/3} \approx 1.0$ e $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega})/L^{1/3} \approx 1.5$. Estes histogramas foram obtidos para $L = 90.000$.

Transporte térmico: Modelo XX

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos para o transporte térmico para o modelo XX. Inicia-se calculando o operador corrente e a fórmula de Kubo para este caso. Em seguida, são mostrados as previsões analíticas e os resultados numéricos obtidos para a condutividade térmica. A fim de se obter um entendimento maior, mostram-se as distribuições da condutividade para alguns valores de frequência.

6.1 Modelo

Estudaremos as propriedades de transporte térmico do modelo XX para uma cadeia de spin $1/2$, cujo hamiltoniano é dado pela Eq. (3.1). O hamiltoniano não depende do tempo e, portanto, a energia total do sistema é uma grandeza conservada e há uma equação da continuidade associada, que é escrita como

$$\frac{\partial \rho(x)}{\partial t} + \frac{\partial j(x)}{\partial x} = 0, \quad (6.1)$$

onde $\rho(x)$ é a densidade de energia e $j(x)$ é o operador corrente térmica do modelo.

A densidade de energia em uma ligação da rede é justamente o termo correspondente do hamiltoniano dividido pelo parâmetro de rede, a , e pode ser escrita como

$$\rho_{k,k+1} = \frac{J_k}{a} (S_k^x S_{k+1}^x + S_k^y S_{k+1}^y), \quad (6.2)$$

onde ela está escrita de forma discretizada. Percebamos que a densidade está localizada na ligação entre dois sítios e isso irá se refletir na estrutura do operador corrente.

Portanto, a equação da continuidade na sua forma discretizada é

$$\frac{\partial \rho_{k,k+1}}{\partial t} + \frac{\partial j_k}{\partial x} = 0, \quad (6.3)$$

onde

$$\frac{\partial j_k}{\partial x} \rightarrow \frac{j_k - j_{k-1}}{a}. \quad (6.4)$$

Utilizando a representação de Heisenberg, escreve-se a derivada temporal como o comutador com o hamiltoniano

$$\frac{\partial \rho_{k,k+1}}{\partial t} = i [H, \rho_{k,k+1}], \quad (6.5)$$

de maneira que

$$\frac{j_k - j_{k-1}}{a} = -i [H, \rho_{k,k+1}]. \quad (6.6)$$

O comutador é dado por

$$[H, J_k (S_k^x S_{k+1}^x + S_k^y S_{k+1}^y)] = J_k J_{k-1} (S_{k-1}^+ S_k^z S_{k+1}^-) - J_{k+1} J_k (S_k^+ S_{k+1}^z S_{k+2}^-) \quad (6.7)$$

Assim, obtemos que o operador corrente térmico é dado por

$$j_k = i \frac{J_{k-1} J_k}{2} (S_{k-1}^- S_k^z S_{k+1}^+ - S_{k-1}^+ S_k^z S_{k+1}^-). \quad (6.8)$$

Pela estrutura do operador fica claro que, ao contrário do operador corrente no transporte de spin, este pode ser encarado como estando centrado no sítio e não na ligação entre os sítios.

Além disso, ele envolve 3 sítios adjacentes, diferentemente do caso de transporte de spin que envolvia 2 sítios. Por essa razão, é conveniente definir uma variável de distância dada por

$$w_k = \frac{l_{k-1} + l_k}{2}, \quad (6.9)$$

onde l'_k s são as distâncias entre os sítios, inicialmente iguais a 1. Isso é feito pois, como o operador está centrado no sítio, é necessário relacionar os tamanhos adjacentes ao sítio em que o operador está e a escolha anterior é a mais conveniente.

Agora, é preciso obter a renormalização do operador numa dizimação. Suponha que os sítios dizimados são o 3 e o 4. Tratamos

$$H_0 = J_3 (S_3^x S_4^x + S_3^y S_4^y) \quad (6.10)$$

como o hamiltoniano não perturbado. Como o operador corrente térmico conecta três sítios adjacentes, a perturbação deve levar em consideração os segundos vizinhos do par mais fortemente acoplado

$$\begin{aligned} V = & J_1 (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + J_2 (S_2^x S_3^x + S_2^y S_3^y) \\ & + J_4 (S_4^x S_5^x + S_4^y S_5^y) + J_5 (S_5^x S_6^x + S_5^y S_6^y). \end{aligned} \quad (6.11)$$

A Fig. 6.1 mostra esquematicamente o processo de dizimação no qual os sítios 3 e 4 são congelados num estado de singleto e, utilizando teoria de perturbação, calcula-se como os operadores corrente dos sítios adjacentes se renormalizam neste processo.

Como feito em detalhes no Apêndice F, o operador renormalizado se escreve como

$$\tilde{j}_2 = \langle w_3 \tau_3 + w_4 \tau_4 \rangle \quad (6.12)$$

e

$$\tilde{j}_5 = \langle w_3 \tau_3 + w_4 \tau_4 \rangle, \quad (6.13)$$

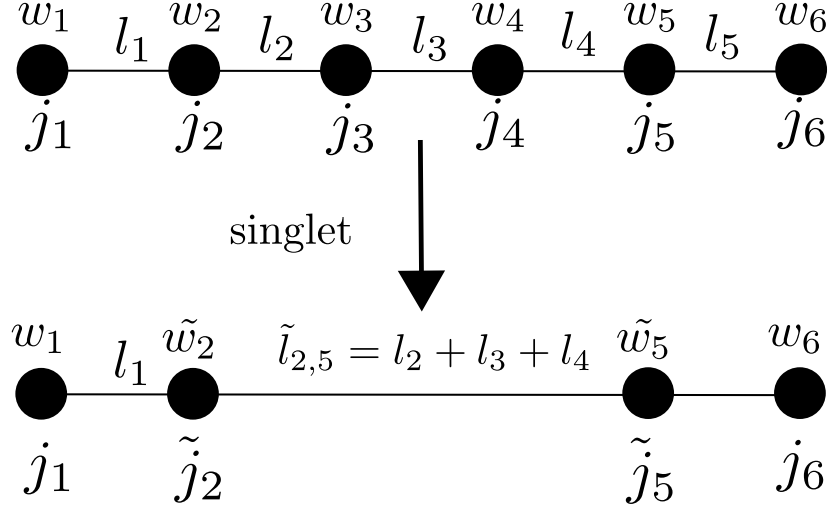


Figura 6.1: Processo de dizimação dos sítios 3 e 4.

onde essas quantidades são calculadas no estado perturbado, (3.14), (3.15) e (3.16). Ao final, obtém-se que os operadores renormalizados são dados por

$$\tilde{j}_2 = i\tilde{w}_2 \frac{J_1 \tilde{J}}{2} (S_1^- S_2^z S_5^+ - S_1^+ S_2^z S_5^-), \quad (6.14)$$

onde $\tilde{w}_2 = w_2 + w_3$ e

$$\tilde{j}_5 = i\tilde{w}_5 \frac{\tilde{J} J_5}{2} (S_2^- S_5^z S_6^+ - S_2^+ S_5^z S_6^-), \quad (6.15)$$

onde $\tilde{w}_5 = w_4 + w_5$. Assim, pode-se perceber que o operador retém a sua forma com o devido acoplamento renormalizado e com uma renormalização da variável w .

6.2 Fórmula de Kubo

A fórmula de Kubo para o caso de transporte de spin é bem estabelecida, ao contrário do caso térmico. Isto acontece pois para o primeiro é bem claro o termo no hamiltoniano que deve ser colocado para acoplar-se com a corrente de spin. Assim, através de teoria de resposta linear pode-se obter a fórmula de Kubo para este problema. Por outro lado, no caso térmico não há um termo que gere um gradiente de temperatura que possa ser levado em conta no modelo. Neste caso é necessário recorrer a argumentos estísticos a fim de se obter uma expressão para

a corrente térmica. Assim, para o caso térmico utilizamos a abordagem apresentada em [28].

A expressão para a condutividade a temperatura finita pode ser escrita como [28]

$$\kappa = \frac{L}{TZ} \sum_m \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle m | e^{-\beta H} e^{\lambda H} J e^{-\lambda H} e^{-iHt} J e^{iHt} | m \rangle, \quad (6.16)$$

onde J é o operador corrente total da cadeia, Z a função de partição e $\eta = 0^+$.

Vamos acrescentar a unidade $\mathbf{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$, onde $|n\rangle$ são autoestados de H e obter a representação de Lehmann [29] para a condutividade.

$$\kappa_{\mu\nu} = \frac{V}{TZ} \sum_{mn} \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle m | e^{-\beta H} e^{\lambda H} J e^{-\lambda H} | n \rangle \langle n | e^{-iHt} J e^{iHt} | m \rangle. \quad (6.17)$$

Como $H |k\rangle = E_k |k\rangle$ obtemos

$$\kappa = \frac{L}{TZ} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} \int_0^\beta d\lambda \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} e^{i(E_m-E_n)t} e^{\lambda(E_m-E_n)} \langle m | J | n \rangle \langle n | J | m \rangle. \quad (6.18)$$

A integral em λ é dada por

$$\int_0^\beta d\lambda e^{\lambda(E_m-E_n)} = \frac{1}{E_m - E_n} [e^{\beta(E_m-E_n)} - 1], \quad (6.19)$$

de maneira que

$$\kappa = \frac{L}{TZ} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} e^{-i(E_m-E_n)t} \frac{1}{E_m - E_n} [e^{\beta(E_m-E_n)} - 1] \langle m | J | n \rangle \langle n | J | m \rangle. \quad (6.20)$$

Agora, a integral temporal é dada por

$$\int_0^\infty dt e^{i[\omega+i\eta-(E_n-E_m)]t} = \frac{i}{\omega - (E_n - E_m) + i\eta}. \quad (6.21)$$

O lado direito de (6.21) pode ser escrito como [29]

$$\frac{i}{\omega - (E_n - E_m) + i\eta} = i \left[P \left\{ \frac{1}{\omega - (E_n - E_m)} \right\} - i\pi \delta[\omega - (E_n - E_m)] \right]. \quad (6.22)$$

Estamos interessados na parte real da condutividade e, portanto, no segundo termo da Eq. (6.22). Ele impõe que $\omega \equiv E_n - E_m$. Portanto

$$\kappa = \frac{\pi L}{TZ} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} \frac{1}{\omega} [1 - e^{-\beta\omega}] \langle m | J | n \rangle \langle n | J | m \rangle \delta[\omega - (E_n - E_m)]. \quad (6.23)$$

Finalmente

$$T \times \kappa = \frac{\pi L}{Z} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} \frac{1}{\omega} [1 - e^{-\beta\omega}] \langle m | J | n \rangle \langle n | J | m \rangle \delta[\omega - (E_n - E_m)], \quad (6.24)$$

onde passamos a temperatura, T , para o lado esquerdo.

No limite de $T \rightarrow 0$ temos que $\beta \rightarrow \infty$ e o único estado que sobre na soma sobre os estados $|m\rangle$ é o estado fundamental, $|0\rangle$

$$\lim_{T \rightarrow 0} [T \times \kappa(\omega)] = \frac{\pi L}{\omega} \sum_n |\langle n | J | 0 \rangle|^2 \delta[\omega - (E_n - E_0)], \quad (6.25)$$

onde usamos que $\lim_{T \rightarrow 0} Z = e^{-\beta E_0}$. Utilizando que $J = \frac{1}{L} \sum_k j_k$, obtemos

$$\lim_{T \rightarrow 0} [T \times \kappa(\omega)] = \frac{\pi}{\omega L} \sum_n \left| \left\langle n \left| \sum_k j_k \right| 0 \right\rangle \right|^2 \delta[\omega - (E_n - E_0)], \quad (6.26)$$

onde $E_n - E_0$ é o gap entre o estado fundamental e o estado excitado do elemento de matriz. Como no caso de transporte de spin fazemos $\sum_k j_k \rightarrow \sum_k w_k j_k$, onde w_k são iguais a 1 no início, mas a medida que o GRDF flui este parâmetro é renormalizado e deve ser levado em conta.

Analogamente ao caso de transporte de spin, quando queremos obter a quantidade $T\kappa$ numa escala ω rodamos o método até chegar a escala $\Omega = \omega$. Nesta escala, calculamos a contribuição de todos os acoplamentos J_i no intervalo $[\Omega, \Omega - d\Omega]$ com os tamanhos w_i respectivos. A soma

é dominada pelos estados com energia $\tilde{E}_n - \tilde{E}_0 = \omega$. Assim, numa dada escala Ω a soma dos operadores corrente na Eq. (6.26) é sobre os sítios ativos

$$\sum_k w_k \tau_k \rightarrow \sum_k \tilde{w}_k \tilde{\tau}_k. \quad (6.27)$$

Vamos assumir que o par de sítios sendo dizimado é formado pelos sítios 3 e 4. Aplicando o operador corrente térmico j_3 no estado fundamental

$$\begin{aligned} j_3 (| M_2, 1/2, -1/2, M_5 \rangle - | M_2, -1/2, 1/2, M_5 \rangle) &= \frac{iJ_2\Omega}{4\sqrt{2}} (\delta_{M_2, -1/2} | 1/2, -1/2, -1/2, M_5 \rangle \\ &- \delta_{M_2, 1/2} | -1/2, 1/2, 1/2, M_5 \rangle). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Analogamente para j_4

$$\begin{aligned} j_4 (| M_2, 1/2, -1/2, M_5 \rangle - | M_2, -1/2, 1/2, M_5 \rangle) &= \frac{iJ_4\Omega}{4\sqrt{2}} (\delta_{M_5, -1/2} | M_2, -1/2, -1/2, 1/2 \rangle \\ &- \delta_{M_5, 1/2} | M_2, 1/2, 1/2, -1/2 \rangle). \end{aligned} \quad (6.29)$$

Calculando o elemento de matriz de (6.28) e (6.29) com os estados excitados, obtém-se que a contribuição é

$$\frac{\omega}{16L} (w_3^2 J_2^2 + w_4^2 J_4^2) \delta(\omega - \Omega), \quad (6.30)$$

onde, ao contrário do caso de spin, aqui aparecem os acoplamentos adjacentes aos sítios dizimados. Isso irá alterar bastante o comportamento da condutividade térmica.

6.3 Previsão analítica

Com base na Eq. (6.30), o valor médio da condutividade térmica é escrita, no limite termodinâmico, como

$$\begin{aligned}
[T\kappa(\omega)]_{\text{av}} &= n(\Gamma_\omega) \int d\zeta dl \, \omega \delta(\omega - \omega e^{-\zeta}) P(\zeta, l | \Gamma_\omega) \\
&\times \int dl_{i-1} dl_{i+1} \int d\zeta_{i-1} d\zeta_{i+1} P(\zeta_{i-1}, l_{i-1} | \Gamma_\omega) P(\zeta_{i+1}, l_{i+1} | \Gamma_\omega) \times \\
&\times \mathcal{F}(\omega e^{-\zeta_{i-1}}, \omega e^{-\zeta_{i+1}}, l_{i-1}, l_{i+1}),
\end{aligned} \tag{6.31}$$

onde

$$\mathcal{F}(\omega e^{-\zeta_{i-1}}, \omega e^{-\zeta_{i+1}}, l_{i-1}, l_{i+1}) = w_i^2 J_{i-1}^2 + w_{i+1}^2 J_{i+1}^2, \tag{6.32}$$

em analogia ao caso de transporte de spin.

Assim

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(\omega e^{-\zeta_{i-1}}, \omega e^{-\zeta_{i+1}}, l_{i-1}, l_{i+1}) &= w_i^2 J_{i-1}^2 + w_{i+1}^2 J_{i+1}^2 \\
&= \frac{1}{4} [(l_{i-1} + l_i)^2 J_{i-1}^2 + (l_i + l_{i+1})^2 J_{i+1}^2] \\
&= \frac{1}{4} [l_{i-1}^2 J_{i-1}^2 + l_i^2 J_{i-1}^2 + 2l_{i-1}l_i J_{i-1}^2 + \\
&\quad + l_i^2 J_{i+1}^2 + l_{i+1}^2 J_{i+1}^2 + 2l_i l_{i+1} J_{i+1}^2]
\end{aligned} \tag{6.33}$$

Quando substituimos a Eq. (6.33) em (6.31), precisaremos calcular integrais do tipo

$$\int d\zeta_i dl_j P(\zeta_i, l_m | \Gamma_\omega) l_j^{\{0,1,2\}} (\omega e^{-\zeta_i})^{\{0,1,2\}} \tag{6.34}$$

onde os números entre chaves indicam os possíveis expoentes e combinações entre l e J . No Apêndice G são apresentados os resultados dessas integrais. Finalmente, chegamos a uma previsão analítica para o valor médio da condutividade térmica

$$[T\kappa(\omega)]_{\text{av}} = n(\Gamma_\omega) \Gamma_\omega^3 \omega^2 \left\{ \left[\frac{68\Gamma_\omega^2 + 84\Gamma_\omega + 35}{180(1 + 2\Gamma_\omega)^3} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{(1 + 2\Gamma_\omega)} \right] + \frac{7}{180} \left[\frac{1}{1 + 2\Gamma_\omega} \right] \right\} \tag{6.35}$$

Vemos que no caso térmico mesmo a média aritmética vai a zero quando $\omega \rightarrow 0$, já indicando um comportamento isolante. O fator ω^2 que diferencia esse caso do caso de transporte de spin é

devido aos acoplamentos adjacentes que aparecem no elemento de matriz da fórmula de Kubo, que têm origem na própria estrutura do operador corrente. Este fato explica a mudança de comportamento em relação aos casos anteriores.

6.4 Resultados

Com base na Eq. (6.30) e na Eq. (6.35), foram obtidos os valores médios, numérico e analítico, e também o valor típico da condutividade térmica. Numericamente, o sistema tinha $L = 24.000$ para uma distribuição inicial de J_i do tipo caixa com 50.000 realizações de desordem. A Fig. 6.2 apresenta as curvas obtidas.

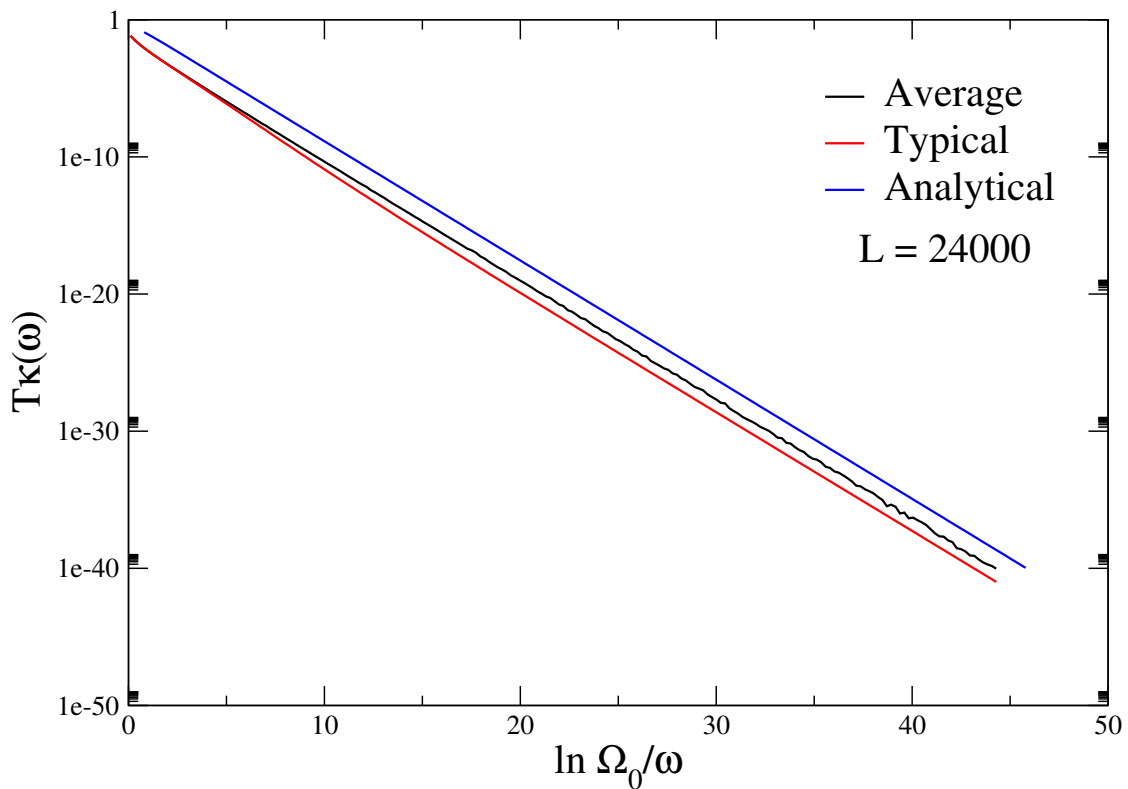


Figura 6.2: Valor médio (curva preta) calculado numericamente e previsão analítica (curva azul), e valor típico (curva vermelha) para $T\kappa(\omega)$. O tamanho utilizado foi de $L = 24.000$.

Pelos resultados obtidos, pode-se ver que a previsão analítica coincidiu bem com a calculada

numericamente, apresentando a mesma lei de potência com a frequência mais uma correção logarítmica. O valor típico também vai a zero, com valores um pouco menores em relação à média aritmética, mas não tão discrepante como no caso do transporte de spin. Para entender um pouco melhor este fato, obtivemos as distribuições da condutividade para alguns valores da frequência, Fig. 6.3.

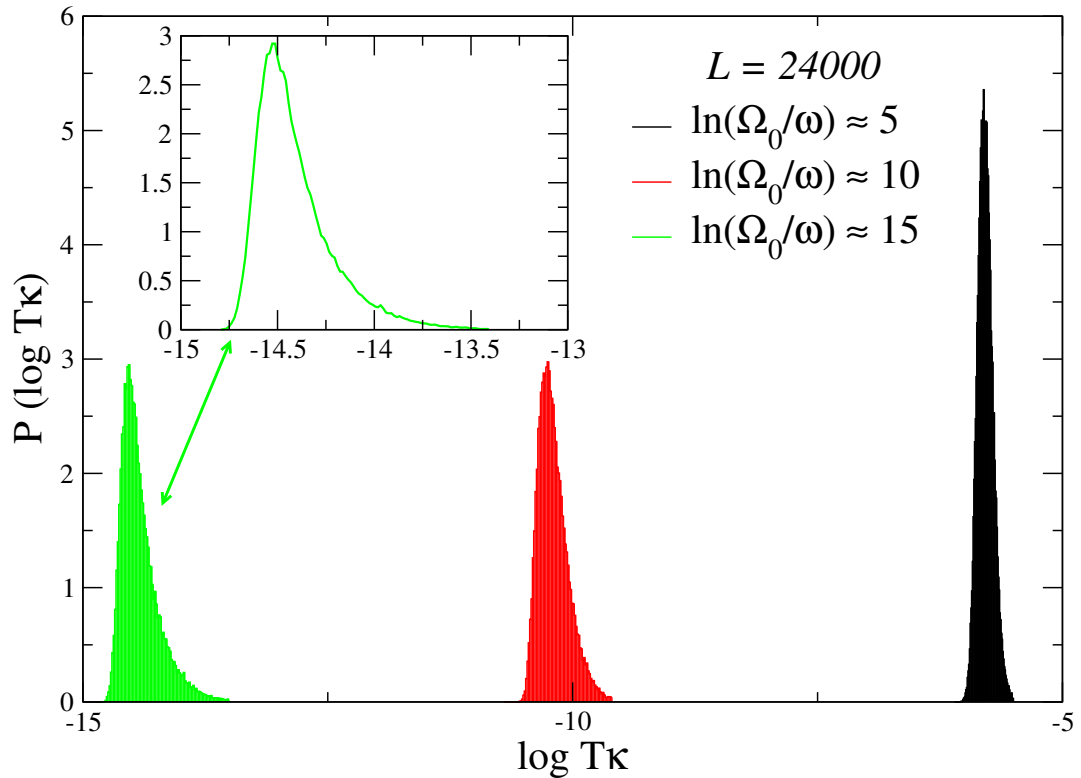


Figura 6.3: Distribuições de $T\kappa(\omega)$ para alguns valores da frequência, $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega}) \approx 5$, $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega}) \approx 10$ e $\ln(\frac{\Omega_0}{\omega}) \approx 15$.

Os histogramas apresentados mostram que as larguras das distribuições de $T\kappa(\omega)$ são bem menores quando comparadas ao caso do transporte de spin, explicando, assim, o fato de os valores médio e típico não serem tão discrepantes.

Quando comparamos o caso de transporte de spin com o transporte térmico, percebemos que no primeiro caso a escala dominante para o valor médio é a escala de comprimento, $\sigma_{av}(\omega) \sim l^2$. Como $l^2 \sim \Gamma_\omega$, obtemos o comportamento linear em Γ_ω para o valor médio da condutividade.

Este fato não ocorre no caso térmico que apresenta $[T\kappa(\omega)]_{av} \sim (J_i J_{i+1})^2$ que dá origem a ω^2 . Isto acontece porque estes acoplamentos existem na estrutura do operador corrente térmico. Deste modo, fica claro que há uma maior dificuldade em transportar calor, já que este transporte depende de dois acoplamentos e as flutuações devido a desordem são bem grandes.

Conclusões

Este trabalho focou-se nas propriedades de transporte de sistemas de spins desordenados unidimensionais. Em particular, obtivemos resultados para cadeias de spin $1/2$ e de spin 1 , para o transporte de spin. Já para o transporte de calor, obtemos resultados para o modelo XX de spin $1/2$.

Para o problema de transporte de spin no modelo XX , havia um resultado anterior na literatura usando o GRDF que indicava um comportamento metálico para a cadeia em questão. Entretanto, este problema pode ser mapeado num problema de férmions livres sem spin, que é um isolante de Anderson com localização anômala. Esta aparente discrepância foi resolvida estudando-se o comportamento de duas quantidades: a média aritmética da condutividade e a média geométrica da mesma. Confirmamos a previsão de que a média aritmética indica um comportamento metálico, mas mostramos que esta quantidade não é o melhor indicador das propriedades do modelo. As distribuições de $\sigma(\omega)$ se tornam extremamente largas para baixas frequências e o uso da média geométrica (ou valor típico) é mais acurado. De fato, vimos que o valor típico colapsa a zero no limite termodinâmico, indicando um comportamento isolante para o modelo, como esperado. Também, fizemos previsões analíticas para a condutividade média e o seu desvio padrão, que foram confirmadas pelos dados numéricos.

Com essa metodologia, ampliamos o estudo para o modelo mais geral com simetria $SU(2)$ de spin 1, nas duas fases em que o GRDF é controlado. Também para este modelo, a média aritmética indica um comportamento metálico para a condutividade de spin. No entanto, o valor típico colapsa a zero para $L \rightarrow \infty$, indicando que este modelo é também um isolante. Assim como no caso anterior, as distribuições ficam bastante largas para baixas frequências, justificando a diferença de comportamento das duas quantidades para $\sigma(\omega)$.

A partir dos resultados anteriores, decidimos ampliar o estudo da condutividade para o transporte de calor em cadeias de spin. Vimos, para este caso, que a condutividade média já vai a zero para baixas frequências e o valor típico segue a mesma tendência. Assim, a localização de energia para este modelo é diferente do transporte de spin. Esta diferença de comportamento se deve à diferença estrutural que há no operador corrente nos dois casos. A nossa previsão analítica para o valor médio de $\sigma(\omega)$ apresenta uma concordância satisfatória com os dados numéricos. Pretendemos futuramente fazer o mesmo estudo para o modelo de $S = 1$.

O trabalho desenvolvido e os resultados obtidos nos mostram que em sistemas desordenados a análise das quantidades físicas deve ser feita com cuidado. O estudo das distribuições pode ser bastante importante para se caracterizar corretamente as propriedades físicas destes sistemas. Nestes casos, muitas vezes, a grandeza física não é autopromediável e o valor típico pode ser muito diferente do valor médio.

Generalizamos o cálculo do operador corrente e sua renormalização para qualquer cadeia de spin S . Neste caso, o operador corrente é dado em termos de comutadores e, usando as propriedades de operadores tensoriais, o cálculo é bastante facilitado. Também obtemos os elementos de matriz da fórmula de Kubo de maneira genérica. Portanto, dado um modelo de spin com simetria $SU(2)$, resultados similares podem ser obtidos.

Com base no trabalho desenvolvido, consideramos que esta metodologia pode ser ampliada para qualquer grandeza conservada, de maneira que seja possível escrever uma equação da continuidade e obter uma expressão para o operador corrente. Também, a metodologia pode ser facilmente generalizada para outros modelos, bem como dimensões superiores.

Apêndices

A

Equação do fluxo

Neste apêndice, mostramos a derivação da equação do fluxo, Eq.(2.11), bem como o esboço de sua solução de ponto fixo. Iniciamos escrevendo a distribuição de acoplamentos na escala Ω como $P(J, \Omega)$. Numa dizimação, quando a escala de energia é diminuída de Ω para $\Omega - d\Omega$, três acoplamentos são removidos da cadeia e um novo renormalizado é acrescentado. Assim

$$\begin{aligned}
 P(J, \Omega - d\Omega) &= \{P(J, \Omega) - d\Omega P(J = \Omega)\} \times \\
 &\times \left[- \int dJ_1 P(J_1) \delta(J - J_1) - \int dJ_3 P(J_3) \delta(J - J_3) \right. \\
 &\left. + \int dJ_1 dJ_3 P(J_1) P(J_3) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{2\Omega}\right) \right] \frac{1}{N},
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

onde

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{1 + d\Omega 2P(J = \Omega)} \simeq 1 - d\Omega 2P(J = \Omega) \tag{A.2}$$

garante a normalização da distribuição após a dizimação.

Re-escrevendo a expressão anterior, no lim $d\Omega \rightarrow 0$, chegamos à expressão procurada

$$\frac{\partial P}{\partial \Omega} = -P(J = \Omega) \int dJ_1 dJ_3 P(J_1) P(J_3) \delta\left(J - \frac{J_1 J_3}{2\Omega}\right). \tag{A.3}$$

A análise de ponto fixo é melhor definida em variáveis logarítmicas. Assim, definamos

$$\zeta = \ln \left(\frac{\Omega}{J} \right), \quad (\text{A.4})$$

$$\Gamma = \ln \left(\frac{\Omega_0}{\Omega} \right), \quad (\text{A.5})$$

onde $\rho(\zeta)$ é a distribuição da nova variável. A transformação entre as duas distribuições é feita através da relação

$$P(J)dJ = \rho(\zeta)d\zeta, \quad (\text{A.6})$$

de maneira que

$$\begin{aligned} P(J) &= \rho(\zeta) \left| \frac{d\zeta}{dJ} \right| \\ &= \frac{1}{J} \rho(\zeta) \\ &= \frac{e^{\Gamma+\zeta}}{\Omega_0} \rho(\zeta). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

A derivada se re-escreve como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Omega} &= \frac{\partial \Gamma}{\partial \Omega} \frac{\partial}{\partial \Gamma} + \frac{\partial \zeta}{\partial \Omega} \frac{\partial}{\partial \zeta} \\ &= \frac{e^\Gamma}{\Omega_0} \left(\frac{\partial}{\partial \zeta} - \frac{\partial}{\partial \Gamma} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Substituindo (A.7) e (A.8) em (A.3), chegamos a

$$\frac{\partial \rho}{\partial \Gamma} = \frac{\partial \rho}{\partial \zeta} + \rho(0) \int d\zeta_1 \rho(\zeta_1) \rho(\zeta - \zeta_1). \quad (\text{A.9})$$

No ponto fixo $\frac{\partial \rho}{\partial \Gamma} = 0$, de maneira que

$$\frac{\partial \rho}{\partial \zeta} + \rho(0) \int d\zeta_1 \rho(\zeta_1) \rho(\zeta - \zeta_1) = 0. \quad (\text{A.10})$$

Supondo uma solução do tipo

$$\rho(\zeta) = \frac{e^{-\zeta/\Gamma}}{\Gamma}, \quad (\text{A.11})$$

obtém-se a solução de ponto fixo (2.12).

B

Espectro de dois sítios do modelo (2.24)

Neste apêndice, apresentamos o espectro de dois sítios do hamiltoniano utilizado para $S = 1$, Eq. (2.24)

$$H = J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + D (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2. \quad (\text{B.1})$$

Este cálculo é facilitado trabalhando-se na base de momento angular total dos sítios

$$\mathbf{S}_T = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \quad (\text{B.2})$$

de maneira que

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} (\mathbf{S}_T^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2). \quad (\text{B.3})$$

Com isso obtemos os estados e energias listados na Tabela B.1.

Energia	Estado
$4D - 2J$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(1, -1\rangle - 0, 0\rangle + -1, 1\rangle)$
$D - J$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 0\rangle - 0, 1\rangle)$
$D - J$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(0, -1\rangle - -1, 0\rangle)$
$D - J$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, -1\rangle - -1, 1\rangle)$
$D + J$	$ 1, 1\rangle$
$D + J$	$ -1, -1\rangle$
$D + J$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 0\rangle + 0, 1\rangle)$
$D + J$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(0, -1\rangle + -1, 0\rangle)$
$D + J$	$\frac{1}{\sqrt{6}}(1, -1\rangle + 2 0, 0\rangle + -1, 1\rangle)$

Tabela B.1: Espectro de dois sítios do modelo utilizado.

Percebamos que, como devíamos esperar pela simetria do problema, a estrutura dos estados é de singleto, tripleto e quintuplete.

Forma lorentziana para a delta de Dirac

Neste apêndice, utilizamos uma forma lorentziana para obtermos a distribuição da condutividade, Eq. (4.4). Começando pela Eq. (4.5)

$$\begin{aligned}
 R(\lambda) &= \int dl dJ P(J, l | \omega) e^{-i\lambda\omega l^2 \delta(\omega-J)/4L}, \\
 &= 1 + \int dl dJ P(J, l | \omega) \left[e^{-i\lambda\omega l^2 \delta(\omega-J)/4L} - 1 \right] \\
 &= 1 + \int dl P(\omega, l | \omega) \int dJ \left[e^{-i\lambda\omega l^2 \delta(\omega-J)/4L} - 1 \right].
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

Agora, utilizando a representação lorentziana para a $\delta(x)$

$$\delta(x) = \frac{b/\pi}{x^2 + b^2}, \tag{C.2}$$

onde $b \rightarrow 0$, podemos escrever

$$\begin{aligned}
\int dJ \left[e^{-i\lambda\omega l^2 \delta(\omega-J)/4L} - 1 \right] &= \int dJ \left(\exp \left\{ \frac{-ib\gamma}{[(\omega-J)^2 + b^2]} \right\} - 1 \right) \\
&\approx \int_{-\infty}^{+\infty} dJ \left\{ \exp \left[\frac{-ib\gamma}{(J^2 + b^2)} \right] - 1 \right\} \\
&= 2 \int_0^{+\infty} dJ \left\{ \exp \left[\frac{-ib\gamma}{(J^2 + b^2)} \right] - 1 \right\}, \tag{C.3}
\end{aligned}$$

onde $\gamma = \lambda\omega l^2/4\pi L$. Fazendo a seguinte mudana de variaveis $t = b^2/(J^2 + b^2)$,

$$\begin{aligned}
\int dJ \left[e^{-i\lambda\omega l^2 \delta(\omega-J)/4L} - 1 \right] &= b \int_0^1 \frac{dt}{t^{3/2}\sqrt{1-t}} (e^{-i\gamma t/b} - 1) \\
&= b \int_0^1 \frac{dt}{t^{3/2}\sqrt{1-t}} \left(\cos \frac{\gamma t}{b} - 1 - i \sin \frac{\gamma t}{b} \right). \tag{C.4}
\end{aligned}$$

Usando $y \equiv \gamma/b$

$$\begin{aligned}
\int_0^1 \frac{dt}{t^{3/2}\sqrt{1-t}} \begin{Bmatrix} \cos yt - 1 \\ \sin yt \end{Bmatrix} &= \pi y \left[\begin{Bmatrix} \cos y/2 \\ \sin y/2 \end{Bmatrix} J_1 \left(\frac{y}{2} \right) \right. \\
&\quad \left. + \begin{Bmatrix} -\sin y/2 \\ \cos y/2 \end{Bmatrix} J_0 \left(\frac{y}{2} \right) \right], \tag{C.5}
\end{aligned}$$

obtemos

$$\begin{aligned}
\int dJ \left[e^{-i\lambda\omega l^2 \delta(\omega-J)/4L} - 1 \right] &= \pi\gamma \left[e^{-iy/2} J_1 \left(\frac{y}{2} \right) - i e^{-iy/2} J_0 \left(\frac{y}{2} \right) \right] \\
&= -i\pi\gamma e^{-iy/2} \left[J_0 \left(\frac{y}{2} \right) + i J_1 \left(\frac{y}{2} \right) \right] \\
&= -i \frac{\lambda\omega l^2}{4L} e^{-i\lambda\omega l^2/8\pi bL} \left[J_0 \left(\frac{\lambda\omega l^2}{8\pi bL} \right) + i J_1 \left(\frac{\lambda\omega l^2}{8\pi bL} \right) \right]. \tag{C.6}
\end{aligned}$$

Finalmente

$$R(\lambda) = 1 + \frac{\lambda\omega}{4L} \int dl P(\omega, l|\omega) l^2 e^{-i\lambda\omega l^2/8\pi bL} \left[J_1 \left(\frac{\lambda\omega l^2}{8\pi bL} \right) - i J_0 \left(\frac{\lambda\omega l^2}{8\pi bL} \right) \right]. \tag{C.7}$$

Utilizando a Eq. (4.9)

$$\begin{aligned}
R(\lambda) &= 1 + \frac{\lambda}{2L\Gamma_\omega} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} n^2 \int d\ell \beta^2 e^{-n^2 \beta^2 \ell} \ell^2 e^{-i\lambda\omega\ell^2/8\pi bL} \left[J_1\left(\frac{\lambda\omega\ell^2}{8\pi bL}\right) - iJ_0\left(\frac{\lambda\omega\ell^2}{8\pi bL}\right) \right] \\
&= 1 + \frac{\lambda}{2L\beta^4\Gamma_\omega} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^4} \int d\ell e^{-\ell} \ell^2 e^{-i\lambda\omega\ell^2/8\pi n^4\beta^4 bL} \left[J_1\left(\frac{\lambda\omega\ell^2}{8\pi n^4\beta^4 bL}\right) - iJ_0\left(\frac{\lambda\omega\ell^2}{8\pi n^4\beta^4 bL}\right) \right] \\
&= 1 + \frac{1}{2L\beta^4\Gamma_\omega} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^4} \int d\ell e^{-\ell} \ell^2 f(\lambda, \alpha\ell^2), \tag{C.8}
\end{aligned}$$

onde $\alpha = \frac{\omega}{8\pi n^4\beta^4 bL}$ e

$$f(x, \alpha\ell^2) = x \exp(-i\alpha\ell^2 x) [J_1(x\alpha\ell^2) - iJ_0(x\alpha\ell^2)]. \tag{C.9}$$

Usando

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0} = -i, \tag{C.10}$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial \lambda^2} \right|_{\lambda=0} = \alpha(\ell^2 - 2), \tag{C.11}$$

obtemos

$$\begin{aligned}
R'(0) &= -i \frac{1}{2L\beta^4\Gamma_\omega} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^4} \int d\ell e^{-\ell} \ell^2, \\
&= -i \frac{7\pi^4}{720} \frac{1}{L\beta^4\Gamma_\omega} \tag{C.12}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R''(0) &= -i \frac{1}{2L\beta^4\Gamma_\omega} \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n^4} \times \left(\frac{\lambda\omega}{8\pi n^4\beta^4 bL} \right) \times \int d\ell e^{-\ell} (\ell^2 - 2), \\
&\sim \frac{\omega}{\beta^8\Gamma_\omega}. \tag{C.13}
\end{aligned}$$

Utilizando as Eqs. (4.11) e (4.16), chegamos a

$$\langle \sigma \rangle = \frac{7a^4\Gamma}{720} \quad (\text{C.14})$$

$$\text{Var } \sigma = \frac{a^8\Gamma^4}{L} \left(-\frac{49}{518400} + \frac{127}{806400} \frac{\Gamma\omega}{\pi b} \right). \quad (\text{C.15})$$

O valor médio é o mesmo obtido com a delta tipo caixa, mostrando que ele é independente da forma da função delta. A variância, entretanto, é ligeiramente diferente. Notemos também que ela depende da largura, b , da lorentziana.

D

Renormalização do operador corrente de spin

Neste apêndice queremos calcular o operador corrente de spin e sua renormalização numa discretização para o modelo mais geral de spin- S com simetria $SU(2)$

$$H = \sum_j \sum_{k=1}^{2S} J_j^k (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1})^k, \quad (\text{D.1})$$

onde J_j^k são variáveis aleatórias independentes. A soma sobre k varia de 1 a $2S$, permitindo todos os termos linearmente independentes [30].

Com isso em mente, deixaremos o operador corrente na forma de um comutador da densidade da grandeza conservada com o Hamiltoniano. Utilizaremos as propriedades gerais dos operadores de momento angular encontradas na ref. [31]. O spin total na direção z é conservado e, portanto, a equação da continuidade pode ser escrita como

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial \tau(x, t)}{\partial x} = 0, \quad (\text{D.2})$$

onde, escrevendo em termos dos operadores na rede e utilizando a forma discretizada da derivada espacial, $\frac{\partial \tau(x, t)}{\partial t} \rightarrow \frac{\tau_{j,j+1} - \tau_{j-1,j}}{a}$, chegamos a

$$\frac{\partial n_j}{\partial t} + \frac{\tau_{j,j+1} - \tau_{j-1,j}}{a} = 0, \quad (\text{D.3})$$

onde $n_j = \frac{1}{a} S_j^z$ é a densidade de spin, com a o parâmetro de rede. A partir da Equação de movimento de Heisenberg, temos que

$$\frac{\tau_{j,j+1} - \tau_{j-1,j}}{a} = i [n_j, H]. \quad (\text{D.4})$$

Como o hamiltoniano tem a seguinte forma $H = \sum_j H_{j,j+1}$, obtemos que

$$\begin{aligned} \frac{\tau_{j,j+1} - \tau_{j-1,j}}{a} &= i [n_j, H] \\ &= \frac{i}{a} \left[S_j^z, \sum_k H_{k,k+1} \right] \\ &= \frac{i}{a} [S_j^z, H_{j,j+1} + H_{j-1,j}]. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Comparando o lado esquerdo e direito de D.5 chegamos a

$$\begin{aligned} \tau_{j,j+1} &= i [S_j^z, H_{j,j+1}] \\ &= -i [S_{j+1}^z, H_{j,j+1}], \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

onde a segunda parte é obtida do fato de que $[S_j^z + S_{j+1}^z, H_{j,j+1}] = 0$ devido à simetria $SO(2)$. Assim, a Eq. (D.6) é a expressão geral que procurávamos.

Agora, precisamos calcular como o processo de dizimação afeta tal operador. Para isso, devemos começar escrevendo o estado perturbado até 2ª ordem em teoria de perturbação. Suponhamos que os sítios 2 e 3 sejam os dizimados. Seja S_G o estado fundamental deste par de sítios, que pode ser um singleto $S_G = 0$ ou um multiplete fundamental de spin finito $S_G \neq 0$. O hamiltoniano não perturbado é dado por

$$H_0 = \sum_{k=1}^{2S} J_2^k (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3)^k, \quad (\text{D.7})$$

enquanto a perturbação é dada por

$$V = \sum_{k=1}^{2S} J_1^k (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^k + \sum_{k=1}^{2S} J_3^k (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4)^k. \quad (\text{D.8})$$

Até segunda ordem, temos que

$$|S_G M\rangle_{cor} = |\psi^{(0)}\rangle + |\psi^{(1)}\rangle + |\psi^{(2)}\rangle, \quad (\text{D.9})$$

onde

$$|\psi^{(0)}\rangle = |S_G, M\rangle \quad (\text{D.10})$$

$$|\psi^{(1)}\rangle = \sum_{S \neq S_G, M'} \frac{\langle S, M' | V | S_G, M \rangle}{\Delta E(S_G, S)} |S, M'\rangle \quad (\text{D.11})$$

$$\begin{aligned} |\psi^{(2)}\rangle = & \sum_{S, S' \neq S_G, M', M''} \frac{\langle S, M'' | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | S_G, M \rangle}{\Delta E(S_G, S) \Delta E(S_G, S')} \times \\ & \times |S, M''\rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

Definimos $\Delta E(S_G, S) = E_{S_G} - E_S$ como a diferença de energia entre o estado fundamental S_G e o estado excitado de spin S . Os outros termos de 2ª ordem não contribuem para a renormalização, o que será mostrado na Seção D.3. Termos de ordem superior, $|\psi^{(2)}\rangle$, são desprezados pois geram correções de ordem $\frac{1}{\Omega^m}$ com $m > 1$, que são sub-dominantes. A Tabela D.1 mostra todos os termos que precisam ser calculados até a ordem dominante.

$S_G = 0$	
$\tilde{\tau}_{1,2/3,4}$	$\langle \psi^{(1)} \tau_{1,2/3,4} \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} \tau_{1,2/3,4} \psi^{(1)} \rangle \sim \mathcal{O} \left(\frac{1}{\Omega} \right)$
$\tilde{\tau}_{2,3}$	$\langle \psi^{(2)} \tau_{2,3} \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} \tau_{2,3} \psi^{(2)} \rangle \sim \mathcal{O} \left(\frac{1}{\Omega} \right) = \tilde{\tau}_{1,2/3,4}$
$S_G \neq 0$	
$\tilde{\tau}_{1,2/3,4}$	$\langle \psi^{(0)} \tau_{1,2/3,4} \psi^{(0)} \rangle \sim \mathcal{O} (\Omega^0)$
$\tilde{\tau}_{2,3}$	$\langle \psi^{(1)} \tau_{2,3} \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(1)} \tau_{2,3} \psi^{(0)} \rangle \sim \mathcal{O} (\Omega^0) = \tilde{\tau}_{1,2/3,4}$

Tabela D.1: Termos necessários para se obter todas as contribuições de ordem $\frac{1}{\Omega}$ no operador corrente. Correções de ordem superiores são sub-dominantes.

D.1 Renormalização de $\tau_{1,2}$ e $\tau_{3,4}$

Calcularemos as expressões para o operador $\tau_{1,2}$ apenas. As expressões para o operador $\tau_{3,4}$ são análogas devido à simetria da cadeia. Iniciemos com o termo

$$\tilde{\tau}_{1,2} = \langle \psi^{(0)} | \tau_{1,2} | \psi^{(0)} \rangle. \quad (\text{D.13})$$

Se o estado fundamental é um singleto, este termo é zero. Por outro lado, se o multipletto fundamental possui um spin total $S_G \neq 0$, a contribuição é não-nula. Para discutir isso, os índices do sítio 4 serão omitidos pois não é necessário utilizá-los em todos os passos do cálculo e, assim, não carregamos a notação. Portanto, temos que

$$\langle m_1 | \tilde{\tau}_{1,2} | m'_1 \rangle \equiv i \langle m_1, \psi^{(0)} | [S_1^z, H_{1,2}] | m'_1, \psi^{(0)} \rangle. \quad (\text{D.14})$$

Atuando com S_1^z nos estados,

$$\langle m_1 | \tilde{\tau}_{1,2} | m'_1 \rangle \equiv i (m_1 - m'_1) \langle m_1, \psi^{(0)} | H_{1,2} | m'_1, \psi^{(0)} \rangle. \quad (\text{D.15})$$

O elemento de matriz obtido é o mesmo para a renormalização do hamiltoniano em 1ª ordem, assim

$$\begin{aligned}
\langle m_1 | \tilde{\tau}_{1,2} | m'_1 \rangle &\equiv i (m_1 - m'_1) \langle m_1, \psi^{(0)} | H_{1,2} | m'_1, \psi^{(0)} \rangle \\
&= i \langle m_1 | [S_1^z, \tilde{H}] | m'_1 \rangle,
\end{aligned} \tag{D.16}$$

no qual $\tilde{H} = \langle \psi^{(0)} | H_{1,2} + H_{3,4} | \psi^{(0)} \rangle$. Podemos colocar o termo $H_{3,4}$ no comutador pois o mesmo comuta com S_1^z . Este novo operador age apenas nos sítios 1 e 4. Como isso foi calculado para um par arbitrário de estados, concluimos que

$$\tilde{\tau}_{1,2} = i [S_1^z, \tilde{H}]. \tag{D.17}$$

Para um multiplete fundamental com spin finito, este é o resultado final. De maneira similar para $\tau_{3,4}$

$$\tilde{\tau}_{3,4} = -i [S_4^z, \tilde{H}]. \tag{D.18}$$

Se o estado fundamental for um singlete, devemos ir até ordem superior, corrigindo o estado até 1ª ordem

$$\begin{aligned}
\tau_{1,2} &= \langle \psi^{(1)} | \tau_{1,2} | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | \tau_{1,2} | \psi^{(1)} \rangle, \\
&= \tilde{\tau}_{1,2a} + \tilde{\tau}_{1,2b}.
\end{aligned} \tag{D.19}$$

Como $[S_1^z, H_{3,4}] = 0$, podemos re-escrever $\tau_{1,2}$ como

$$\tau_{1,2} = i [S_1^z, V]. \tag{D.20}$$

Explicitamente

$$\begin{aligned}
\tilde{\tau}_{1,2a} &= \sum_{S \neq 0, M', m_1''} \frac{\langle m_1, 00 | \tau_{1,2} | m_1'', SM' \rangle \langle m_1'', SM' | V | m_1', 00 \rangle}{\Delta E(0, S)} \\
&= i \sum_{S \neq 0, M', m_1''} \left[(m_1 - m_1'') \frac{\langle m_1, 00 | V | m_1'', SM' \rangle}{\Delta E(0, S)} \times \right. \\
&\quad \left. \times \langle m_1'', SM' | V | m_1', 00 \rangle \right].
\end{aligned} \tag{D.21}$$

O termo $\tilde{\tau}_{1,2b}$ é obtido de maneira similar

$$\begin{aligned}
\tilde{\tau}_{1,2b} &= \sum_{S \neq 0, M', m_1''} \frac{\langle m_1, 00 | V | m_1'', SM' \rangle \langle m_1'', SM' | \tau_{1,2} | m_1', 00 \rangle}{\Delta E(0, S)} \\
&= i \sum_{S \neq 0, M', m_1''} \left[(m_1'' - m_1') \frac{\langle m_1, 00 | V | m_1'', SM' \rangle}{\Delta E(0, S)} \times \right. \\
&\quad \left. \times \langle m_1'', SM' | V | m_1', 00 \rangle \right].
\end{aligned} \tag{D.22}$$

Quando somamos os dois, os termos proporcionais a m_1'' se cancelam, restando apenas

$$\begin{aligned}
\langle m_1 | \tilde{\tau}_{1,2} | m_1' \rangle &= i (m_1 - m_1') \langle m_1 | \tilde{H} | m_1' \rangle \\
&= \langle m_1 | -i [S_1^z, \tilde{H}] | m_1' \rangle,
\end{aligned} \tag{D.23}$$

de maneira que

$$\tilde{\tau}_{1,2} = i [S_1^z, \tilde{H}]. \tag{D.24}$$

As regras de dizimação para os acoplamentos são as mesmas obtidas em [30]. Para o operador $\tilde{\tau}_{3,4}$, o resultado é análogo

$$\tilde{\tau}_{3,4} = -i [S_4^z, \tilde{H}]. \tag{D.25}$$

Assim, fica claro que no processo de dizimação, o operador corrente retém a sua forma sendo calculado com o hamiltoniano efetivo, \tilde{H} , que age no espaço de Hilbert truncado. Também, percebemos que $\tilde{\tau}_{1,2} = \tilde{\tau}_{3,4}$. Note que, quando o estado fundamental é um singlete, os acoplamentos em \tilde{H} são proporcionais a $\frac{1}{\Omega}$, enquanto no caso de $S_G \neq 0$, eles são independentes de Ω , como deve ser segundo as regras de dizimação mostradas no Cap. 2.

D.2 Renormalização de $\tau_{2,3}$

Nesta seção, queremos calcular a renormalização do operador $\tau_{2,3}$ numa dizimação e pretendemos mostrar que o resultado final é igual ao de $\tilde{\tau}_{1,2}$. O operador é dado por

$$\tau_{2,3} = i [S_2^z, H_{2,3}]. \quad (\text{D.26})$$

Na base de momento angular total nos sítios 2 e 3, $\mathbf{S}_T = \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$, os elementos de matriz são obtidos facilmente, de maneira que

$$\langle S, M | \tau_{2,3} | S', M' \rangle = -i \Delta E(S, S') \langle S, M | S_2^z | S', M' \rangle \delta_{MM'}, \quad (\text{D.27})$$

onde a delta de Kröneckel aparece devido ao Teorema de Wigner-Eckart [31].

Percebamos que o elemento de matriz é proporcional a Ω quando calculado entre o estado fundamental e os excitados, devido ao termo ΔE . A contribuição mais baixa é dada por

$$\tilde{\tau}_{2,3}^{(0)} = -i \langle \psi^{(0)} | [S_2^z, H_{2,3}] | \psi^{(0)} \rangle = 0, \quad (\text{D.28})$$

onde usamos que $H_{2,3} | \psi^{(0)} \rangle = E_{S_G} | \psi^{(0)} \rangle$.

A contribuição seguinte é dada por

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{2,3}^{(1)} &= \langle \psi^{(1)} | \tau_{2,3} | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | \tau_{2,3} | \psi^{(1)} \rangle \\ &= \tilde{\tau}_{2,3a} + \tilde{\tau}_{2,3b}. \end{aligned} \quad (\text{D.29})$$

Usando (D.27), podemos re-escrever $\tilde{\tau}_{2,3a}$ como

$$\begin{aligned}\tilde{\tau}_{2,3a} &= \sum_{S \neq S_G, M} \frac{\langle S_G M' | V | S, M \rangle}{\Delta E(S_G, S)} \langle S, M | \tau_{2,3} | S_G M'' \rangle \\ &= i \sum_{S \neq S_G, M} \langle S_G M' | V | S, M \rangle \langle S, M | S_2^z | S_G M'' \rangle.\end{aligned}\quad (\text{D.30})$$

Usando a relação de completeza $1 = P_0 + \sum_{S \neq S_G, M} |S, M\rangle \langle S, M|$ nos sítios 2 e 3, onde P_0 é o projetor no multiplete fundamental, temos que

$$\tilde{\tau}_{2,3a} = -i \langle S_G M' | V (1 - P_0) S_2^z | S_G M'' \rangle. \quad (\text{D.31})$$

Somando $\tilde{\tau}_{2,3a}$ e $\tilde{\tau}_{2,3b}$, obtemos

$$\begin{aligned}\tilde{\tau}_{2,3} &= -i P_0 [V (1 - P_0) S_2^z - S_2^z (1 - P_0) V] P_0 \\ &= -i (P_0 [S_2^z, V] P_0 + [P_0 S_2^z P_0, P_0 V P_0]),\end{aligned}\quad (\text{D.32})$$

onde usamos o fato de que $P_0^2 = P_0$ no segundo termo da segunda linha. Quando o estado fundamental é o singleto, a quantidade $P_0 S_2^z P_0$ é zero devido ao Teorema de Wigner-Eckart. Quando o estado fundamental é um multiplete $S_G \neq 0$, $P_0 S_2^z P_0 = \tilde{S}_{23}^z$ é o operador S^z do novo spin efetivo, que comuta com o hamiltoniano efetivo, $P_0 V P_0 = \tilde{H}_{1,23} + \tilde{H}_{23,4}$, i.e., no espaço de Hilbert truncado

$$[\tilde{S}_{23}^z, \tilde{H}_{1,23} + \tilde{H}_{23,4}] = 0, \quad (\text{D.33})$$

devido à conservação da simetria $SO(2)$ numa dizimação.

Para o primeiro termo de (D.32)

$$\begin{aligned}\tilde{\tau}_{2,3} &= -i P_0 [H_{1,2}, S_1^z] P_0 \\ &= \langle \psi^{(0)} | \tau_{1,2} | \psi^{(0)} \rangle\end{aligned}\tag{D.34}$$

$$= \tilde{\tau}_{1,2}, \text{ para multipletos de } S_G \neq 0\tag{D.35}$$

finalizando o cálculo para o caso $S_G \neq 0$: $\tilde{\tau}_{2,3} = \tilde{\tau}_{1,2}$. Agora, queremos mostrar que $\tilde{\tau}_{2,3} = \tilde{\tau}_{3,4}$. De fato,

$$\begin{aligned}\tilde{\tau}_{2,3} &= -i \langle S_G M' | [S_3^z, V] | S_G M'' \rangle \\ &= \langle \psi^{(0)} | \tau_{3,4} | \psi^{(0)} \rangle\end{aligned}\tag{D.36}$$

$$= \tilde{\tau}_{3,4}, \text{ para multipletos de } S_G \neq 0\tag{D.37}$$

Precisamos fazer uma escolha para $\tilde{\tau}_{2,3}$. Usaremos a forma simétrica

$$\tilde{\tau}_{2,3} = \frac{1}{2} (\tilde{\tau}_{1,2} + \tilde{\tau}_{3,4}),\tag{D.38}$$

para que não se introduza uma assimetria não justificada.

Quando o estado fundamental é um singlete, $S_G = 0$, devemos ir até 2ª ordem nos estados

$$\tilde{\tau}_{2,3c} = \langle \psi^{(1)} | \tau_{2,3} | \psi^{(1)} \rangle,\tag{D.39}$$

$$\tilde{\tau}_{2,3d} = \langle \psi^{(0)} | \tau_{2,3} | \psi^{(2)} \rangle,\tag{D.40}$$

$$\tilde{\tau}_{2,3e} = \langle \psi^{(2)} | \tau_{2,3} | \psi^{(0)} \rangle.\tag{D.41}$$

Começemos mostrando que o primeiro termo é zero.

$$\begin{aligned}\tilde{\tau}_{2,3c} &= \sum_{S', S, M'} \frac{\langle 00 | V | S', M' \rangle \langle S, M' | V | 00 \rangle}{\Delta E(0, S')} \times \\ &\times \langle S', M' | \tau_{2,3} | S, M' \rangle,\end{aligned}\tag{D.42}$$

onde usamos que $M'' = M'$ devido ao Teorema de Wigner-Eckart. No caso em que $S = S'$

$$\langle S, M | \tau_{2,3} | S, M \rangle = 0, \quad (\text{D.43})$$

conforme Eq. (D.27).

Quando $S \neq S'$, consideremos o par de termos $S = S_a, S' = S_b$ e $S = S_b, S' = S_a$. O denominador de energia é o mesmo, e $\langle S_a, M | \tau_{2,3} | S_b, M \rangle = -\langle S_b, M | \tau_{2,3} | S_a, M \rangle$, de maneira que resta o termo

$$\begin{aligned} & \langle 00 | V | S_a, M \rangle \langle S_b, M | V | 00 \rangle \\ & - \langle 00 | V | S_b, M \rangle \langle S_a, M | V | 00 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.44})$$

Percebamos que o segundo termo é o complexo conjugado do primeiro e como V é hermitiano e real eles se cancelam.

Continuemos, então, com os termos (D.40) e (D.41). Usando que (D.27), o denominador de energia cancela e obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{2,3d} = i \sum_{S, S' \neq 0, M', M''} & \frac{\langle 00 | S_2^z | S, M'' \rangle \langle S, M'' | V | S', M' \rangle}{\Delta E(0, S')} \times \\ & \times \langle S', M' | V | 00 \rangle \end{aligned} \quad (\text{D.45})$$

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{2,3e} = i \sum_{S, S' \neq 0, M', M''} & \frac{\langle 00 | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | S, M'' \rangle}{\Delta E(0, S')} \times \\ & \times \langle S, M | S_2^z | 00 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.46})$$

A soma sobre S pode ser retirada utilizando a completeza e percebendo que $\langle 00 | S_2^z | 00 \rangle = 0$.

$$\tilde{\tau}_{2,3d} = i \sum_{S' \neq 0, M'} \frac{\langle 00 | S_2^z V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | 00 \rangle}{\Delta E(0, S')}, \quad (\text{D.47})$$

$$\tilde{\tau}_{2,3e} = i \sum_{S' \neq 0, M'} \frac{\langle 00 | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V S_2^z | 00 \rangle}{\Delta E(0, S')}. \quad (\text{D.48})$$

Definindo o operador R

$$R = \sum_{S' \neq 0, M'} \frac{|S', M'\rangle \langle S', M'|}{\Delta E(0, S')}, \quad (\text{D.49})$$

as expressões podem re-escritas como

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{2,3d} + \tilde{\tau}_{2,3e} &= i \langle \psi^{(0)} | S_2^z V R V - V R V S_2^z | \psi^{(0)} \rangle, \\ &= i \langle \psi^{(0)} | [S_2^z, V R V] | \psi^{(0)} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{D.50})$$

Agora, podemos utilizar a seguinte identidade

$$[S_2^z, V R V] = [S_2^z, V] R V + V R [S_2^z, V] + V [S_2^z, R] V. \quad (\text{D.51})$$

O último termo é zero, como será mostrado a seguir. Usando que $[S_2^z, V] = -i\tau_{1,2}$, somando os dois primeiros termos, chegamos a

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{2,3d} + \tilde{\tau}_{2,3e} &= \langle \psi^{(0)} | \tau_{1,2} R V + V R \tau_{1,2} | \psi^{(0)} \rangle, \\ &= \langle \psi^{(0)} | \tau_{1,2} | \psi^{(1)} \rangle + \langle \psi^{(1)} | \tau_{1,2} | \psi^{(0)} \rangle \end{aligned} \quad (\text{D.52})$$

$$= \tilde{\tau}_{1,2} \quad (\text{D.53})$$

Da primeira para a segunda linha, usando a expressão explícita de R , obtemos

$$R V | \psi^{(0)} \rangle = \sum_{S' \neq 0, M'} \frac{\langle S' M' | V | \psi^{(0)} \rangle}{\Delta E(0, S')} | S' M' \rangle, \quad (\text{D.54})$$

que é justamente a expressão de $| \psi^{(1)} \rangle$, Eq. (D.11). Já da segunda para a terceira linha, podemos identificar $\tilde{\tau}_{1,2}$ a partir de (D.24). Assim, mostramos que a renormalização de $\tau_{2,3}$ é igual à de $\tau_{1,2}$, calculada explicitamente na seção anterior.

Agora, precisamos mostrar que o último termo de (D.51) é, de fato, nulo. Definamos $B = [S_2^z, R]$ e calculemos o complexo conjugado de $V B V$

$$(VBV)^\dagger = V^\dagger B^\dagger V^\dagger = -VBV, \quad (\text{D.55})$$

onde usamos que $B^\dagger = -B$. Como VBV é real, então seus elementos diagonais devem ser zero

$$\langle \psi^{(0)} | VBV | \psi^{(0)} \rangle = 0. \quad (\text{D.56})$$

Portanto, o compêndio dos resultados é o seguinte. Quando o estado fundamental do par a ser dizimado é o singleto, a renormalização dos três operadores é igual

$$\tilde{\tau}_{2,3} = \tilde{\tau}_{1,2} = \tilde{\tau}_{3,4} = -i \left[S_1^z, \tilde{H} \right], \quad (\text{D.57})$$

com \tilde{H} conectando os sítios 1 e 4, após a dizimação de 2 e 3. Ao somar os três termos aparece o fator de distância efetiva, \tilde{l} . Quando o estado fundamental dos par de sítios a ser dizimado for um multipleteo

$$\tilde{\tau}_{2,3} = \frac{1}{2} (\tilde{\tau}_{1,2} + \tilde{\tau}_{3,4}), \quad (\text{D.58})$$

onde

$$\tilde{\tau}_{1,2} = -i \left[S_1^z, \tilde{H} \right], \quad (\text{D.59})$$

$$\tilde{\tau}_{3,4} = -i \left[S_3^z, \tilde{H} \right]. \quad (\text{D.60})$$

com \tilde{H} conectando os sítios 1 e 4 com o novo spin efetivo, colocado entre eles. Justamente pela estrutura de (D.58), as distâncias efetivas são dadas por

$$\tilde{l}_1 = l_1 + \frac{l_2}{2}, \quad (\text{D.61})$$

$$\tilde{l}_3 = l_3 + \frac{l_2}{2}. \quad (\text{D.62})$$

D.3 Outras correções de 2ª ordem

Nesta seção, mostramos que há outros termos de segunda ordem na correção dos estados, mas que eles são zero e por isso não os levamos em consideração no cálculo anterior. Os termos são

$$\begin{aligned} |\psi_a^{(2)}\rangle &= \sum_{S' \neq 0, M'} \frac{\langle S_G, M | V | S_G, M \rangle \langle S', M' | V | S_G, M \rangle}{[\Delta E(S_G, S')]^2} \times \\ &\quad \times |S', M'\rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.63})$$

$$|\psi_b^{(2)}\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{S' \neq 0, M'} \frac{\langle S_G, M | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | S_G, M \rangle}{[\Delta E(S_G, S')]^2} \times \quad (\text{D.64})$$

$$\times |S_G, M\rangle. \quad (\text{D.65})$$

Lembremos que as correções de segunda ordem só são necessárias quando o estado fundamental é o singlete, $S_G = 0$ e $M = 0$.

O termo $|\psi_a^{(2)}\rangle$ claramente é zero pois a perturbação V leva o estado fundamental para o tripleto e o elemento de matriz

$$\langle S_G M'' | V | S_G M \rangle = 0. \quad (\text{D.66})$$

Já o segundo termo é um pouco mais sutil. Estamos interessados nas correções de ordem $\frac{1}{\Omega}$ e, como este termo tem no denominador a diferença de energia ao quadrado, i.e., $|\psi_b^{(2)}\rangle \sim \frac{1}{\Omega^2}$, ele só é relevante no cálculo do seguinte elemento de matriz de $\tau_{2,3}$

$$\delta\tau_2 = \langle S_G, M | \tau_2 | \psi_b^{(2)} \rangle \propto \langle S_G, M | \tau_2 | S_G, M'' \rangle. \quad (\text{D.67})$$

Como o operador corrente é um tensor de ordem 1, seu valor esperado com o estado fundamental é zero.

E

Elementos de matriz do operador corrente

Neste apêndice, calculamos os elementos de matriz do operador corrente $\tau_{2,3}$. Neste caso, estamos interessados em obter uma expressão geral para os elementos de matriz que entram na fórmula de Kubo. Usaremos as variáveis S e S' para os multipletos de spin total dos sítios 2 e 3. Este elemento de matriz de interesse é dado por

$$\begin{aligned}\langle S' M' | \tau_{2,3} | S, M \rangle &= i \langle S', M' | [S_2^z, H_{2,3}] | S, M \rangle, \\ &= i \Delta E(S, S') \langle S', M' | S_2^z | S, M \rangle,\end{aligned}\tag{E.1}$$

onde $\Delta E(S, S')$ é a diferença de energia entre os estados de momento angular S e S' . A tarefa é computar o valor do termo $\langle S', M' | S_2^z | S, M \rangle$ de maneira genérica. Em seguida, com esta expressão, iremos particularizar para os casos de $S = 1/2$ e $S = 1$ a fim de confirmar os resultados apresentados nos capítulos.

Denotemos o elemento de matriz a ser calculado por $f(S_2 S_3; S S', M M')$. Usamos o Teorema de Wigner-Eckart e o fato de que S_2^z é a componente zero de um tensor de ordem 1. Assim, pelas regras de seleção $M' = M$ e $S' = S \pm 1$

$$\begin{aligned}
f(S_2 S_3; S S', M M') &= \langle S_2 S_3; S', M | S_2^z | S_2 S_3; S, M \rangle \\
&= \delta_{M, M'} (-1)^{1-S+S'} \frac{\langle 1S; 0M | 1S; S', M \rangle}{\sqrt{2S'+1}} \times \\
&\times \langle S_2 S_3, S' || S_2^z || S_2 S_3, S \rangle,
\end{aligned} \tag{E.2}$$

onde $\langle S_2 S_3, J'_2 || S_2^z || S_2 S_3, J_2 \rangle$ é o chamado elemento de matriz reduzido, que independe de M . Podemos re-escrever este elemento de matriz da seguinte maneira [31]

$$\begin{aligned}
\langle S_2 S_3, S' || S_2^z || S_2 S_3, S \rangle &= (-1)^{S_2+S_3+S+1} \times \\
&\times [(2S+1)(2S'+1)]^{1/2} \times \\
&\times \begin{Bmatrix} S_2 & S' & S_3 \\ S & S_2 & 1 \end{Bmatrix} \langle S_2 || S_2^z || S_2 \rangle,
\end{aligned} \tag{E.3}$$

onde $\begin{Bmatrix} S_2 & S' & S_3 \\ S & S_2 & 1 \end{Bmatrix}$ é o chamado símbolo $6-j$ de Wigner [31]. O outro elemento de matriz pode ser simplificado utilizando o teorema de Wigner Eckart

$$\begin{aligned}
\langle S_2 || S_2^z || S_2 \rangle &= -\frac{\sqrt{2S_2+1} \langle S_2, M_2 | S_2^z | S_2, M_2 \rangle}{\langle 1S_2; 0M_2 | 1S_2; S_2, M_2 \rangle}, \\
&= \sqrt{S_2(S_2+1)(2S_2+1)},
\end{aligned} \tag{E.4}$$

onde usamos

$$\langle 1S_2; 0M_2 | 1S_2; S_2, M_2 \rangle = -\frac{M_2}{\sqrt{S_2(S_2+1)}}, \tag{E.5}$$

$$\langle S_2, M_2 | S_2^z | S_2, M_2 \rangle = M_2. \tag{E.6}$$

Juntando todos os termos

$$\begin{aligned}
f(S_2 S_3 S S', M, M') &= \delta_{M, M'} (-1)^{S_2 + S_3 + S + 1} \times \\
&\quad [S_2 (S_2 + 1) (2S_2 + 1)]^{1/2} \times \\
&\quad \times g(S, S', M) \begin{Bmatrix} S_2 & S' & S_3 \\ S & S_2 & 1 \end{Bmatrix},
\end{aligned} \tag{E.7}$$

onde definimos

$$\begin{aligned}
g(S, S', M) &= \sqrt{2S + 1} \langle 1S; 0M | 1S; S', M \rangle \\
&= \begin{cases} \sqrt{S + 1 - \frac{M^2}{S+1}}, & S' = S + 1 \\ -\sqrt{S - \frac{M^2}{S}}, & S' = S - 1 \end{cases}
\end{aligned} \tag{E.8}$$

Agora, podemos calcular os valores explícitos para os modelos tratados nesta tese. Para o spin 1/2, cuja transição é do singleto para o tripleto

$$f(1/2 \ 1/2, 10, 00) = \frac{1}{2}, \tag{E.9}$$

que confirma o resultado obtido no Capítulo 3, Eq. (3.20).

Já para o caso do spin 1, com a transição do singleto para o tripleto

$$f(11, 01, 00) = \sqrt{\frac{2}{3}}. \tag{E.10}$$

Quando a transição é do tripleto para o singleto ou quintupletto

$$f(11, 10, 00) = \sqrt{\frac{2}{3}}, \tag{E.11}$$

$$f(11, 12, 00) = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \tag{E.12}$$

$$f(11, 12, 11) = -\frac{1}{2}, \tag{E.13}$$

$$f(11, 12, -1 - 1) = -\frac{1}{2}, \tag{E.14}$$

que confirmam os valores obtidos no Capítulo 5, Eqs. (5.20), (5.29), (5.30) e (5.31).

F

Renormalização do operador corrente térmico

Neste apêndice apresentaremos uma derivação geral para a renormalização do operador corrente térmica, de maneira análoga ao que foi feito no caso de spin, Apêndice D. O modelo utilizado é o mesmo do caso de transporte de spin

$$H = \sum_j \sum_{k=1}^{2S} J_j^k (\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1})^k, \quad (\text{F.1})$$

onde J_j^k são variáveis aleatórias descorrelacionadas e a soma sobre k se estende sobre todos os termos linearmente independentes.

Como discutido anteriormente, vamos partir da Eq. da continuidade discretizada

$$\frac{j_{i+1} - j_i}{a} = i [\rho_{i,i+1}, H], \quad (\text{F.2})$$

onde $\rho_{i,i+1} = \frac{H_{i,i+1}}{a}$ é a densidade de energia numa dada ligação.

Como $H = \sum_k H_{k,k+1}$ obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{j_{i+1} - j_i}{a} &= \frac{i}{a} \left[H_{i,i+1}, \sum_k H_{k,k+1} \right] \\
&= \frac{i}{a} \sum_k [H_{i,i+1}, H_{k,k+1}] \\
&= \frac{i}{a} [H_{i,i+1}, H_{i-1,i} + H_{i,i+1} + H_{i+1,i+2}] \\
&= \frac{i}{a} [H_{i,i+1}, H_{i+1,i+2}] - \frac{i}{a} [H_{i-1,i}, H_{i,i+1}].
\end{aligned} \tag{F.3}$$

Comparando o lado esquerdo e o lado direito de (F.3) chegamos a

$$j_i = i [H_{i-1,i}, H_{i,i+1}]. \tag{F.4}$$

Vamos supor que o par mais fortemente acoplado é o 2 e 3, para o qual o hamiltoniano não perturbado é dado por

$$H_0 = \sum_{k=1}^{2S} J_2^k (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3)^k, \tag{F.5}$$

e a perturbação é

$$\begin{aligned}
V &= \sum_{k=1}^{2S} J_0^k (\mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_1)^k + \sum_{k=1}^{2S} J_1^k (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^k \\
&+ \sum_{k=1}^{2S} J_3^k (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4)^k + \sum_{k=1}^{2S} J_4^k (\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_5)^k \\
&= H_{0,1} + H_{1,2} + H_{3,4} + H_{4,5}.
\end{aligned} \tag{F.6}$$

Assim, para os sítios envolvidos, temos que

$$j_1 = i [H_{0,1}, H_{1,2}], \quad (\text{F.7})$$

$$j_2 = i [H_{1,2}, H_{2,3}], \quad (\text{F.8})$$

$$j_3 = i [H_{2,3}, H_{3,4}], \quad (\text{F.9})$$

$$j_4 = i [H_{3,4}, H_{4,5}]. \quad (\text{F.10})$$

Um resumo dos resultados que mostraremos é

$$\tilde{j}_1 = \tilde{j}_2 = i [H_{0,1}, \tilde{H}], \quad (\text{F.11})$$

$$\tilde{j}_3 = \tilde{j}_4 = i [\tilde{H}, H_{4,5}]. \quad (\text{F.12})$$

F.1 Renormalização de j_2 e j_3

O objetivo desta seção é mostrar que a renormalização de j_2 é idêntica a de j_1 , i.e., $\tilde{j}_2 = \tilde{j}_1$ enquanto $\tilde{j}_3 = \tilde{j}_4$. Os elementos de matriz de $j_{2/3}$ são calculados na base de momento angular total dos spins dos sítios 2 e 3, o que fornece

$$\langle S, M | j_2 | S', M' \rangle = i \Delta E (S, S') \langle S, M | H_{1,2} | S', M' \rangle, \quad (\text{F.13})$$

$$\langle S, M | j_3 | S', M' \rangle = -i \Delta E (S, S') \langle S', M | H_{3,4} | S, M \rangle, \quad (\text{F.14})$$

onde $\Delta E (S, S') = E_S - E_{S'}$.

A renormalização em ordem zero de $j_{2/3}$ é zero, já que

$$\tilde{j}_2^{(0)} = i \langle \psi^{(0)} | [H_{1,2}, H_{2,3}] | \psi^{(0)} \rangle = 0, \quad (\text{F.15})$$

$$\tilde{j}_3^{(0)} = i \langle \psi^{(0)} | [H_{2,3}, H_{3,4}] | \psi^{(0)} \rangle = 0, \quad (\text{F.16})$$

onde usamos que $\Delta E (S, S) = 0$.

F.2 Caso $S_G \neq 0$

Comecemos com a contribuição quando corrigimos o bra ou o ket em 1ª ordem, i.e.

$$\begin{aligned}\tilde{j}_{2/3}^{(1)} &= \langle \psi^{(1)} | j_{2/3} | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | j_{2/3} | \psi^{(1)} \rangle, \\ &= \langle j_{2/3,a} \rangle + \langle j_{2/3,b} \rangle.\end{aligned}\tag{F.17}$$

Escrevendo $|\psi^{(1)}\rangle$ explicitamente, Eq. (D.11), e usando a Eq. (F.13)

$$\tilde{j}_{2,a} = \sum_{S \neq S_G, M} \frac{\langle S_G M' | V | S, M \rangle}{\Delta E(S_G, S)} \langle S, M | j_2 | S_G M' \rangle.\tag{F.18}$$

Escrevendo a identidade e explicitando o projetor no multipleteo fundamental, P_0

$$1 = P_0 + \sum_{S' \neq S_G} |S' M'\rangle \langle S' M'|,\tag{F.19}$$

o que implica que a Eq. (F.13) se escreve, após somada com a sua conjugada,

$$\tilde{j}_2 = -i \langle S_G M | V (1 - P_0) H_{1,2} - H_{12} (1 - P_0) V | S_G M' \rangle\tag{F.20}$$

A equação acima possui dois termos, um que envolve a identidade entre os operadores, e a outro que tem P_0 .

Para o termo de Eq.(F.20) que envolve a identidade, temos que

$$\begin{aligned}\tilde{j}_2^{(a)} &= -i \langle S_G M | [H_{1,2}, V] | S_G M' \rangle \\ &= -i \langle S_G M | [H_{1,2}, H_{0,1}] | S_G M' \rangle \\ &= \langle \psi^{(0)} | j_1 | \psi^{(0)} \rangle\end{aligned}\tag{F.21}$$

$$= \tilde{j}_1, \text{ para multipletos de } S_G \neq 0\tag{F.22}$$

O cálculo de \tilde{j}_3 segue de maneira análoga.

Agora, o termo em Eq.(F.20) com o projetor pode ser calculado usando que $P_0^2 = P_0$,

$$\begin{aligned}
\tilde{j}_2^{(b)} &= i \langle S_G M' | V P_0 P_0 H_{1,2} - H_{12} P_0 P_0 V | S_G M' \rangle \\
&= i [P_0 V P_0, P_0 H_{1,2} P_0] \\
&= i [\tilde{H}_{23,4}, \tilde{H}_{1,23}] \\
&= -i [\tilde{H}_{1,23}, \tilde{H}_{23,4}], \text{ para multipletos de } S_G \neq 0
\end{aligned} \tag{F.23}$$

Da segunda para a terceira linha, usamos que $P_0 H_{1,2} P_0$ comuta consigo mesmo.

F.3 Caso $S_G = 0$

Se o estado fundamental é um singleto, as correções de ordem 1ª feita acima são zero. Assim, devemos ir até 2ª ordem

$$\tilde{j}_{2,c} = \langle \psi^{(1)} | j_2 | \psi^{(1)} \rangle, \tag{F.24}$$

$$\tilde{j}_{2,d} = \langle \psi^{(0)} | j_2 | \psi^{(2)} \rangle, \tag{F.25}$$

$$\tilde{j}_{2,e} = \langle \psi^{(2)} | j_2 | \psi^{(0)} \rangle. \tag{F.26}$$

Começemos mostrando que a correção dada pela Eq. (F.24) é zero. Explicitamente,

$$\begin{aligned}
\tilde{j}_{2,c} &= \sum_{S'' \neq 0, S' \neq 0} \frac{\langle 00 | V | S', M' \rangle \langle S'', M'' | V | 00 \rangle}{\Delta E(0, S')} \frac{\langle S'', M'' | V | 00 \rangle}{\Delta E(0, S'')} \times \\
&\times \langle S', M' | \tau_2 | S'', M'' \rangle,
\end{aligned} \tag{F.27}$$

Definindo o operador resolvente

$$R = \sum_{S' \neq 0, M'} \frac{|S', M'\rangle \langle S', M'|}{\Delta E(0, S')} \tag{F.28}$$

$$= \sum_{S' \neq 0} R_{S'}, \tag{F.29}$$

onde

$$R_{S'} = \frac{|S', M'\rangle \langle S', M'|}{\Delta E(0, S')}. \quad (\text{F.30})$$

Em termos do resolvente,

$$\tilde{\tau}_{2,c} = \langle 00 | V R \tau_2 R V | 00 \rangle. \quad (\text{F.31})$$

Tomando explicitamente dois termos das somas sobre S' presentes nos resolventes e denotando-os por S_a and S_b ,

$$\langle 00 | V R_{S_a} \tau_2 R_{S_b} V | 00 \rangle + \langle 00 | V R_{S_b} \tau_2 R_{S_a} V | 00 \rangle. \quad (\text{F.32})$$

Usando a expressão explícita de τ_2 ,

$$\Delta E(S_a, S_b) (\langle 00 | V R_{S_a} H_{1,2} R_{S_b} V | 00 \rangle - \langle 00 | V R_{S_b} H_{1,2} R_{S_a} V | 00 \rangle), \quad (\text{F.33})$$

onde o termo envolvendo $H_{2,3}$ dá origem à diferença de energia. Claramente, se $S_a = S_b$ este termo é zero. Se $S_a \neq S_b$, o segundo termo é o complexo conjugado do primeiro e quando somados o resultado é zero.

Partamos, agora, para o cálculo de (F.25) e (F.26).

$$\tilde{j}_{2,d} = \sum_{S, S' \neq 0} \frac{\langle 00 | j_2 | S, M \rangle \langle S, M | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | 00 \rangle}{\Delta E(0, S') \Delta E(0, S)}, \quad (\text{F.34})$$

$$\tilde{j}_{2,e} = \sum_{S, S' \neq 0} \frac{\langle 00 | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | S, M \rangle \langle S, M | j_2 | 00 \rangle}{\Delta E(0, S') \Delta E(0, S)}. \quad (\text{F.35})$$

Usando a expressão do elemento de matriz do operador corrente, Eq. (F.13), os fatores $\Delta E(0, S)$ se cancelam,

$$\tilde{j}_{2,d} = i \sum_{S,S' \neq 0} \frac{\langle 00 | H_{1,2} | S, M \rangle \langle S, M | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | 00 \rangle}{\Delta E(0, S')}, \quad (\text{F.36})$$

$$\tilde{j}_{2,e} = -i \sum_{S,S' \neq 0} \frac{\langle 00 | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | S, M \rangle \langle S, M | H_{1,2} | 00 \rangle}{\Delta E(0, S')}. \quad (\text{F.37})$$

A soma sobre S pode ser retirada percebendo que $\langle 00 | H_{1,2} | 00 \rangle = \langle 00 | V | 00 \rangle = 0$,

$$\tilde{j}_{2,d} = i \sum_{S',M'} \frac{\langle 00 | H_{1,2} V | S', M' \rangle \langle S', M' | V | 00 \rangle}{\Delta E(0, S')}, \quad (\text{F.38})$$

$$\tilde{j}_{2,e} = -i \sum_{S',M'} \frac{\langle 00 | V | S', M' \rangle \langle S', M' | V H_{1,2} | 00 \rangle}{\Delta E(0, S')}. \quad (\text{F.39})$$

Usando o operador resolvente, chegamos à

$$\begin{aligned} \tilde{j}_{2,d} + \tilde{j}_{2,e} &= i \langle \psi^{(0)} | H_{1,2} V R V - V R V H_{1,2} | \psi^{(0)} \rangle, \\ &= i \langle \psi^{(0)} | [H_{1,2}, V R V] | \psi^{(0)} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{F.40})$$

O comutador pode ser escrito usando a identidade

$$[H_{1,2}, V R V] = [H_{1,2}, V] R V + V R [H_{1,2}, V] + V [H_{1,2}, R] V. \quad (\text{F.41})$$

Assim

$$\begin{aligned} [H_{1,2}, V R V] &= [H_{1,2}, H_{0,1}] R V + V R [H_{1,2}, H_{0,1}] + V [H_{1,2}, R] V \\ &= i (j_1 R V + V R j_1) + V [H_{1,2}, R] V. \end{aligned} \quad (\text{F.42})$$

O terceiro termo é zero. Quanto ao resto

$$\begin{aligned}\tilde{j}_{2,d} + \tilde{j}_{2,e} &= \langle \psi^{(0)} | j_1 R V + V R j_1 | \psi^{(0)} \rangle, \\ &= \langle \psi^{(0)} | j_1 | \psi^{(1)} \rangle + \langle \psi^{(1)} | j_1 | \psi^{(0)} \rangle\end{aligned}\tag{F.43}$$

$$= \tilde{j}_1,\tag{F.44}$$

que será calculado explicitamente na próxima sessão. De maneira similar obtemos, também, que

$$\tilde{j}_{3,d} + \tilde{j}_{3,e} = \tilde{j}_4.\tag{F.45}$$

Assim, concluimos que, quando o estado fundamental é um singlete

$$\tilde{j}_2 = \tilde{j}_1\tag{F.46}$$

$$\tilde{j}_3 = \tilde{j}_4.\tag{F.47}$$

F.4 Renormalização de $j_{1/4}$

A corrente é renormalizada no sítio 1 de acordo com

$$\tilde{j}_1 = \langle \psi^{(0)} | j_1 | \psi^{(0)} \rangle.\tag{F.48}$$

Se o estado fundamental é um singlete, esta quantidade é zero. Caso contrário,

$$\tilde{j}_1 = i \left[H_{0,1}, \tilde{H} \right],\tag{F.49}$$

e o cálculo está terminado.

Para o caso do singlete, usando o resolvente, as próximas ordens são

$$\tilde{j}_1 = \langle \psi^{(0)} | V R j_1 | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | j_1 R V | \psi^{(0)} \rangle\tag{F.50}$$

$$\tilde{j}_1 = \langle \psi^{(1)} | j_1 | \psi^{(0)} \rangle + \langle \psi^{(0)} | j_1 | \psi^{(1)} \rangle.\tag{F.51}$$

Usando a expressão de j_1

$$\begin{aligned} j_1 &= i [H_{0,1}, H_{1,2}], \\ &= i [H_{0,1}, V], \end{aligned} \quad (\text{F.52})$$

Assim,

$$\begin{aligned} j_1 RV + VR j_1 &= i (H_{0,1} V R V - V H_{0,1} R V) + \\ &\quad + i (V R H_{0,1} V - V R V H_{0,1}) \\ &= i [H_{0,1}, V R V], \end{aligned} \quad (\text{F.53})$$

onde usamos que $[R, H_{0,1}] = 0$.

Iremos calcular agora um elemento genérico de \tilde{j}_1 e, para isso, usaremos a base $|\phi_a\rangle$ que diagonaliza H_{01} .

$$\langle \phi_a 00 | \tilde{j}_1 | \phi_b 00 \rangle = i \langle \phi_a, 00 | H_{01} V R V - V R V H_{01} | \phi_b, 00 \rangle \quad (\text{F.54})$$

Os elementos de matriz podem ser calculados explicitamente,

$$\begin{aligned} \langle \phi_a 00 | \tilde{j}_1 | \phi_b 00 \rangle &= (\phi_a - \phi_b) \langle \phi_a, 00 | V R V | \phi_b, 00 \rangle \\ &= (\phi_a - \phi_b) \langle \phi_a, 00 | \tilde{H} | \phi_b, 00 \rangle \end{aligned} \quad (\text{F.55})$$

$$= \langle \phi_a | [H_{0,1}, \tilde{H}] | \phi_b \rangle. \quad (\text{F.56})$$

Já que isso foi feito para um par arbitrário de estados do sítios 0 e 1, concluimos que

$$\tilde{j}_1 = i [H_{0,1}, \tilde{H}]. \quad (\text{F.57})$$

O cálculo de \tilde{j}_4 segue de maneira análoga,

$$\tilde{j}_4 = i \left[\tilde{H}, H_{4,5} \right]. \quad (\text{F.58})$$

F.5 Sumário dos resultados

A corrente antes da dizimação se escreve como

$$j_{1,4} = w_1 j_1 + w_2 j_2 + w_3 j_3 + w_4 j_4. \quad (\text{F.59})$$

Em primeira ordem de teoria de perturbação

$$\begin{aligned} j_{1,4} &= w_1 \tilde{j}_1 + w_2 (\tilde{j}_1 + \tilde{j}_{23}) + w_3 (\tilde{j}_{23} + \tilde{j}_4) + w_4 \tilde{j}_4 \\ &= (w_1 + w_2) \tilde{j}_1 + (w_2 + w_3) \tilde{j}_{23} + (w_3 + w_4) \tilde{j}_4, \end{aligned} \quad (\text{F.60})$$

onde $\tilde{j}_{23} = i [H_{1,23}, H_{23,4}]$.

Em segunda ordem de teoria de perturbação

$$j_{1,4} = (w_1 + w_2) \tilde{j}_1 + (w_3 + w_4) \tilde{j}_4, \quad (\text{F.61})$$

onde $\tilde{j}_1 = i [H_{0,1}, H_{1,4}]$ e $\tilde{j}_4 = i [H_{1,4}, H_{4,5}]$.

Resultados das integrais

Neste apêndice, calculamos as integrais (6.34). De [12], temos que a distribuição de acoplamentos e tamanhos é dada por

$$Q(\eta, y) = \frac{\sqrt{y}}{\sinh \sqrt{y}} e^{-\eta \sqrt{y} \coth \sqrt{y}}, \quad (\text{G.1})$$

onde $\eta = \zeta/\Gamma$. As variáveis ζ e Γ foram definidas nas Eqs. (A.4) e (A.5), respectivamente. A variável y corresponde a transformada de Laplace de $\lambda = l/\Gamma^2$, i.e.

$$Q(\eta, y) = \int_0^\infty e^{-y\lambda} \tilde{Q}(\eta, \lambda) d\lambda. \quad (\text{G.2})$$

A relação entre a distribuição de acoplamentos e tamanhos $P(\zeta, l)$ e $\tilde{Q}(\eta, \lambda)$ é dada por [12]

$$P(\zeta, l) = \frac{1}{\Gamma^3} \tilde{Q}(\eta, \lambda). \quad (\text{G.3})$$

As primeiras integrais de interesse são

$$\int dl P(\zeta_i, l_m | \Gamma_\omega) l = - \left. \frac{dQ}{dy} \right|_{y=0} \times \Gamma, \quad (\text{G.4})$$

e

$$\int dl P(\zeta_i, l_m | \Gamma_\omega) l^2 = \left. \frac{d^2 Q}{dy^2} \right|_{y=0} \times \Gamma^3. \quad (\text{G.5})$$

Como calcularemos as derivadas em $y = 0$, convém expandir $Q(\eta, y)$ em série de Taylor em y

$$\frac{\sqrt{y}}{\sinh \sqrt{y}} e^{-\eta \sqrt{y} \coth \sqrt{y}} \simeq e^{-\eta} \left(1 - \frac{\eta y}{3} + \frac{\eta^2 y^2}{18} + \frac{\eta y^2}{45} + \frac{\eta y^2}{18} - \frac{y}{6} + \frac{7y^2}{360} \right). \quad (\text{G.6})$$

Portanto

$$-\left. \frac{dQ}{dy} \right|_{y=0} = -e^{-\eta} \left(-\frac{1}{3} - \frac{1}{6} \right) = \frac{e^{-\eta}}{2} \quad (\text{G.7})$$

e

$$\left. \frac{d^2 Q}{dy^2} \right|_{y=0} = \frac{e^{-\eta}}{9} \left(\eta^2 + \frac{7}{5} \eta + \frac{7}{20} \right). \quad (\text{G.8})$$

Assim

$$\begin{aligned} \int dl d\zeta P(\zeta, l | \Gamma) l^2 J^2 &= \frac{\omega^2 \Gamma^3}{9} \int d\zeta e^{-2\zeta} e^{-\zeta/\Gamma} \left(\frac{\zeta^2}{\Gamma^2} + \frac{7}{5} \frac{\zeta}{\Gamma} + \frac{7}{20} \right) \\ &= \Gamma^4 \omega^2 \frac{68\Gamma^2 + 84\Gamma + 35}{180(1+2\Gamma)^3}, \end{aligned} \quad (\text{G.9})$$

$$\begin{aligned} \int dl d\zeta P(\zeta, l | \Gamma) l J^2 &= \frac{\Gamma \omega^2}{2} \int d\zeta e^{-2\zeta} e^{-\zeta/\Gamma} \\ &= \frac{\Gamma^2 \omega^2}{2(1+2\Gamma)}, \end{aligned} \quad (\text{G.10})$$

$$\begin{aligned} \int dl d\zeta P(\zeta, l | \Gamma) l J &= \frac{\Gamma \omega}{2} \int d\zeta e^{-\zeta} e^{-\zeta/\Gamma} \\ &= \frac{\Gamma^2 \omega}{2(1+\Gamma)}, \end{aligned} \quad (\text{G.11})$$

$$\begin{aligned}
\int dl P(\zeta, l|\Gamma) &= \frac{1}{\Gamma} \int d\lambda Q(\eta, \lambda) \\
&= \frac{Q(\eta, 0)}{\Gamma} = \frac{e^{-\eta}}{\Gamma},
\end{aligned} \tag{G.12}$$

$$\int d\zeta P(\zeta, l|\Gamma) J = \frac{\omega}{1 + \Gamma}, \tag{G.13}$$

$$\int d\zeta P(\zeta, l|\Gamma) J^2 = \frac{\omega^2}{1 + 2\Gamma}. \tag{G.14}$$

Finalmente

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(l, \omega|\Gamma) &= \int dl_{i-1} dl_{i+1} \int d\zeta_{i-1} d\zeta_{i+1} P(\zeta_{i-1}, l_{i-1}|\Gamma_\omega) P(\zeta_{i+1}, l_{i+1}|\Gamma_\omega) \times \\
&\times \mathcal{F}(\omega e^{-\zeta_{i-1}}, \omega e^{-\zeta_{i+1}}, l_{i-1}, l_{i+1}) \\
&= \left[\Gamma^4 \omega^2 \frac{68\Gamma^2 + 84\Gamma + 35}{180(1 + 2\Gamma)^3} \right] + \left[\frac{\Gamma^2 \omega^2}{2(1 + 2\Gamma)} \right] l + \left[\frac{\omega^2}{2(1 + 2\Gamma)} \right] l^2.
\end{aligned} \tag{G.15}$$

Portanto, obtemos que

$$\begin{aligned}
[T \times \kappa(\omega)]_{av} &= n(\Gamma_\omega) \int dl P(0, l|\Gamma_\omega) \mathcal{L}(l, \omega|\Gamma) \\
&= \frac{n(\Gamma_\omega)}{\Gamma} \int d\lambda \tilde{Q}(0, \lambda|\Gamma_\omega) \mathcal{L}(l, \omega|\Gamma) \\
&= n(\Gamma_\omega) \Gamma^3 \omega^2 \left\{ \left[\frac{68\Gamma^2 + 84\Gamma + 35}{180(1 + 2\Gamma)^3} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{1}{(1 + 2\Gamma)} \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{7}{180} \left[\frac{1}{1 + 2\Gamma} \right] \right\},
\end{aligned} \tag{G.16}$$

que é o resultado procurado, Eq. (6.35).

Referências Bibliográficas

- [1] N. W. Ashcroft and D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, international edition edition, 1976.
- [2] P. W. Anderson. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Phys. Rev.*, 109(5):1492, 1958.
- [3] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 42:673, 1979.
- [4] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D'Iorio. Possible metal-insulator transition at $B=0$ in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 50:8039, 1994.
- [5] S. V. Kravchenko W. E. Mason G. E. Bowker J. E. Furneaux V. M. Pudalov and M. D'Iorio. Scaling of an anomalous metal-insulator transition in a two-dimensional system in silicon at $b = 0$. *Phys. Rev. B*, 51:7038, 1995.
- [6] D. Popović A. B. Fowler and S. Washburn. Metal-insulator transition in two dimensions: effects of disorder and magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 79:1543, 1997.

-
- [7] E. Abrahams, S. V. Kravchenko, and M. P. Sarachik. *Rev. Mod. Phys.*, 73:251, 2001.
 - [8] D. Belitz and T. R. Kirkpatrick. The Anderson-Mott transition. *Rev. Mod. Phys.*, 66:261, 1994.
 - [9] S.-k. Ma, C. Dasgupta, and C.-k. Hu. Random Antiferromagnetic Chain. *Phys. Rev. Lett.*, 43:1434, 5 November 1979.
 - [10] C. Dasgupta and S.-k. Ma. Low-temperature properties of the random Heisenberg antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. B*, 22:1305, 1 August 1980.
 - [11] D. S. Fisher. Random transverse field Ising spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, 69:534, 1992.
 - [12] D. S. Fisher. Random antiferromagnetic quantum spin chains. *Phys. Rev. B*, 50:3799, 1994.
 - [13] D. S. Fisher. Critical behavior of random transverse-field Ising spin chains. *Phys. Rev. B*, 51:6411, 1995.
 - [14] H. Javan Mard, José A. Hoyos, E. Miranda, and V. Dobrosavljević. Strong-disorder renormalization-group study of the one-dimensional tight-binding model. *Phys. Rev. B*, 90:125141, Sep 2014.
 - [15] H. Javan Mard, José A. Hoyos, E. Miranda, and V. Dobrosavljević. Strong-disorder approach for the anderson localization transition. *Phys. Rev. B*, 96(4):045143, jul 2017.
 - [16] K. Damle, O. Motrunich, and D. A. Huse. Dynamics and Transport in Random Antiferromagnetic Spin Chains. *Phys. Rev. Lett.*, 84:3434, 15 November 1999.
 - [17] O. Motrunich, K. Damle, and D. A. Huse. Dynamics and transport in random quantum systems governed by strong-randomness fixed points. *Phys. Rev. B*, 63:134424, 13 March 2001.

-
- [18] Ryogo Kubo. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. i. general theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, 12(6):570–586, 1957.
- [19] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, and D. S. Fisher. New method for a scaling theory of localization. *Phys. Rev. B*, 22(8):3519, 1980.
- [20] C. Dasgupta and S. k. Ma. Low-temperature properties of the random Heisenberg antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. B*, 22:1305, 1980.
- [21] V. L. Quito, José A. Hoyos, and E. Miranda. Emergent $su(3)$ symmetry in random spin-1 chains. *Phys. Rev. Lett.*, 115:167201, Oct 2015.
- [22] G. D. Mahan. *Many-Particle Physics*, chapter 4.2. Plenum, 2nd. edition, 1990.
- [23] Jun John Sakurai. *Modern quantum mechanics; rev. ed.* Addison-Wesley, Reading, MA, 1994.
- [24] M. Inui, S. A. Trugman, and Elihu Abrahams. Unusual properties of midband states in systems with off-diagonal disorder. *Phys. Rev. B*, 49:3190–3196, Feb 1994.
- [25] L Fleishman and D C Licciardello. Fluctuations and localization in one dimension. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 10(6):L125–L126, mar 1977.
- [26] George Theodorou and Morrel H. Cohen. Extended states in a one-demensional system with off-diagonal disorder. *Phys. Rev. B*, 13:4597–4601, May 1976.
- [27] J. A. Hoyos, A. P. Vieira, N. Laflorencie, and E. Miranda. Correlation amplitude and entanglement entropy in random spin chains. *Phys. Rev. B*, 76:174425, 2007.
- [28] Philip B. Allen and Joseph L. Feldman. Thermal conductivity of disordered harmonic solids. *Phys. Rev. B*, 48:12581–12588, Nov 1993.

- [29] A.L. Fetter and J.D. Walecka. *Quantum Theory of Many-Particle Systems*. Mc Graw Hill, Boston, 1971.
- [30] V. L. Quito, José A. Hoyos, and E. Miranda. Random $\text{su}(2)$ -symmetric spin- s chains. *Phys. Rev. B*, 94:064405, Aug 2016.
- [31] A. R. EDMONDS. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Princeton University Press, 1985.