

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Algoritmo computacional para o grupo de
renormalização para desordem forte aplicado à
cadeia de spin 1 com simetria $SU(2)$

Maruan Jabbar Drehmer

Orientador: Prof. Dr. Andre de Pinho Vieira

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. André de Pinho Vieira (Orientador) - IFUSP

Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto - IFSC USP

Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade - UFBA

São Paulo

2022

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Drehmer, Maruan Jabbar

Algoritmo computacional para o grupo de renormalização para desordem forte aplicado à cadeia de spin 1 com simetria SU(2). São Paulo, 2022.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Faculdade de Educação, Instituto de Física, Instituto de Química e Instituto de Biociências

Orientador (a): Prof. Dr. Andre de Pinho Vieira

Área de Concentração: Ensino de Física.

Unitermos: 1. Física – Estudo e ensino; 2. Sistema quântico; 3. Física computacional; 4. Física teórica.

USP/IF/SBI-72/2022

University of São Paulo
Physics Institute

Computational algorithm for the strong-disorden
renormalization group applied to the spin-1 chain
with $SU(2)$ symmetry

Maruan Jabbar Drehmer

Supervisor: Prof. Dr. Andre de Pinho Vieira

Dissertation submitted to the Physics Institute of the
University of São Paulo in partial fulfillment of the re-
quirements for the degree of Master of Science.

Examining Committee:

Prof. Dr. André de Pinho Vieira (Supervisor) - IFUSP

Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto - IFSC USP

Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade - UFBA

São Paulo

2022

Agradecimentos

Deixo meu agradecimento a todos os colegas que contribuíram para a conclusão da dissertação, também agradeço imensamente a dedicação e apoio do André, meu orientador, que sem todo tempo e esforço investido aqui, este trabalho não seria possível.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, a qual deixo meu agradecimento.

“It is better to have a bad plan than no plan.”

(Garry Kasparov)

Resumo

Esta dissertação apresenta um algoritmo para implementação numérica do grupo de renormalização para desordem forte na cadeia quântica de spin 1 com simetria $SU(2)$, em sua forma mais geral, com acoplamentos bilineares e biquadráticos que variam de sítio para sítio. O algoritmo, escrito na linguagem Wolfram, do software Mathematica, funciona tanto para o caso em que a desordem nos acoplamentos é aleatória quanto para o caso em que os acoplamentos são distribuídos de acordo com sequências aperiódicas determinísticas, caso em que é preciso lidar com a renormalização de blocos contendo um número arbitrário de spins (restrito, por limitações computacionais, a 9 sítios). Como teste, determina-se o diagrama de fases da cadeia de spin 1 com acoplamentos distribuídos de acordo com a sequência aperiódica de Fibonacci.

Palavras-chaves: Cadeias quânticas de spins. Sistemas aperiódicos. Grupo de renormalização.

Abstract

This work introduces an algorithm implementing a numerical version of the strong-disorder renormalization-group scheme for the $SU(2)$ -symmetric spin-1 quantum chain in its most general form, with both bilinear and biquadratic couplings varying from site to site. The algorithm, written in the Wolfram language, used by Mathematica, is applicable both in the case of random couplings as well as when couplings are distributed according to a deterministic aperiodic sequence, a case in which one must deal with the renormalization of blocks containing an arbitrary number of spins (restricted, due to computational limitations, to 9 sites). As a test, the phase diagram of the spin-1 chain with couplings following the Fibonacci aperiodic sequence is determined.

Keywords: Quantum spin chains. Aperiodic systems. Renormalization group.

Lista de figuras

Figura 1 – Diagrama de fases da cadeia de spin 1 no caso uniforme. Extraído da referência [1].	11
Figura 2 – Diagrama de fases da cadeia de spin 1 aleatória quando os ângulos θ_i são todos iguais. Extraído da referência [2].	12
Figura 3 – Figura representando uma cadeia de 4 spins 1. As esferas pretas indicam um sítio, as linhas tracejadas a ligação do tipo K_a e a linha contínua, uma ligação K_b	21
Figura 4 – Diagrama indicando qual é o estado fundamental do par de spins 1. Azul, laranja e verde indicam, respectivamente, singleto, tripleto e quintuplete.	22
Figura 5 – Representação da renormalização da figura 3 quando o bloco central dá origem a um spin efetivo com valor $\tilde{S} = 1$ ou $\tilde{S} = 2$, a depender do ângulo θ . As linhas representam os acoplamentos efetivos.	23
Figura 6 – Representação da renormalização da figura 3 quando o bloco central tem por estado fundamental um singleto. As linhas representam os acoplamentos efetivos.	23
Figura 7 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas baseadas no hamiltoniano efetivo para um cadeia de 4 spins com um bloco central de 2 spins fortemente acoplados.	24
Figura 8 – Diagrama indicando o estado fundamental do trio de spins 1. Azul, laranja e vermelho indicam, respectivamente, $\tilde{S} = 0$, $\tilde{S} = 1$, $\tilde{S} = 3$	25
Figura 9 – Valores numéricos calculado dos coeficientes $F_{J,3}(\theta)$. A descontinuidade em $F_{2,3}(\theta)$ ocorre na transição entre estados fundamentais com $\tilde{S} = 3$ e $\tilde{S} = 1$	26
Figura 10 – Valores numéricos calculados para os coeficientes $G_{J,3}$. Há uma divergência nos limites onde ocorre a degenerescência do estado fundamental, como se verifica pela equação 3.21	27
Figura 11 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas baseadas no hamiltoniano efetivo para um cadeia de 5 spins com um bloco central de 3 spins fortemente acoplados.	28

Figura 12 – Diagrama indicando qual é o spin efetivo do estado fundamental de um quarteto de spins 1. Azul, laranja e roxo correspondem, respectivamente, $\tilde{S} = 0$, $\tilde{S} = 1$, $\tilde{S} = 4$	29
Figura 13 – Diagrama indicando qual é o spin efetivo do estado fundamental de um quinteto de spins 1. Azul, laranja e magenta correspondem, respectivamente, $\tilde{S} = 0$, $\tilde{S} = 1$, $\tilde{S} = 5$	29
Figura 14 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas baseadas no hamiltoniano efetivo para um cadeia de 6 spins com um bloco central de 4 spins fortemente acoplados.	30
Figura 15 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas baseadas no hamiltoniano efetivo para um cadeia de 7 spins com um bloco central de 5 spins fortemente acoplados.	30
Figura 16 – Fluxo simplificado do algoritmo proposto	31
Figura 17 – Cadeia de Fibonacci com 21 sítios. As linhas tracejadas representam acoplamentos fracos, $K_{a,J}$, e as linhas contínuas, acoplamentos fortes, $K_{b,J}$. Os círculos indicam as posições dos sítios, enquanto os números no canto esquerdo de cada círculo indicam o valor do spin ocupando aquele sítio.	33
Figura 18 – Representação dos blocos encontrados na cadeia de Fibonacci inicial.	33
Figura 19 – Cadeia efetiva obtida após a primeira varredura da cadeia mostrada na figura 17, no caso em que, para os blocos fortemente conectados, $\tilde{S} = 0$	33
Figura 20 – Cadeia efetiva obtida após a primeira varredura da cadeia mostrada na figura 17, no caso em que, para os blocos fortemente conectados, $\tilde{S} = 1$	33
Figura 21 – Cadeia efetiva obtida após a primeira varredura da cadeia mostrada na figura 17, no caso em que, para os blocos fortemente conectados, $\tilde{S} = 2$	34
Figura 22 – Número de spins efetivos da cadeia após cada varredura.	35
Figura 23 – Cadeia de spins utilizando a sequência <i>abaabababa</i> As ligações tracejadas representam ligações K_a (acoplamentos $K_{a,1}$ e $K_{a,2}$) e as contínuas, ligações K_b (acoplamentos $K_{b,1}$ e $K_{b,2}$).	36
Figura 24 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas do GRDF para um cadeia de Fibonacci contendo 8 spins.	37

Figura 25 – Módulo da diferença entre a estimativa e o valor exato do gap, como função da razão R_a/R_b . O comportamento peculiar da curva para $\theta = 0$ em torno de $R_a/R_b = 0.14$ decorre de um cruzamento entre as curvas individuais de Δ e de Δ' (não mostradas).	38
Figura 26 – Diagrama indicando os pontos fixos do GRDF para a cadeia de Fibonacci. Os pontos estáveis estão indicados em vermelho, sendo sua região atratora delimitada pelos pontos instáveis, em cinza. As linhas pretas delimitam as bacias de atração dos pontos fixos estáveis. As cores representam os estados fundamentais de um par de spins assim como a figura 4.	39
Figura 27 – Comportamento dos ângulos efetivos (esquerda) e das razões Δ_a/Δ_b entre os gaps (direita), em função do número de varreduras da rede, cada varredura envolvendo a renormalização de blocos fortemente acoplados oriundos da varredura anterior.	40
Figura 28 – Dependência do gap efetivo da cadeia de Fibonacci, como previsto pelo GRDF, com o tamanho L da cadeia, tomando um ângulo inicial $\theta = \pi + \arctan(2)$	41
Figura 29 – Ajuste do gap para o ponto fixo $\theta = 255^\circ$ onde os parâmetros são $\zeta = 2,09612$, $\mu = 0,432931$ e $r_0 = 1,000004$	42

Sumário

1	Introdução	10
2	Tensores esféricos irredutíveis	14
2.1	<i>Tensores esféricos irredutíveis</i>	14
2.2	<i>Hamiltoniano em termos dos TEIs</i>	15
3	Equações do grupo de renormalização para desordem forte . .	16
3.1	<i>Teoria de perturbação de primeira ordem</i>	17
3.2	<i>Teoria de perturbação de segunda ordem</i>	18
3.3	<i>Extensão para blocos de n sítios</i>	18
4	Renormalização de cadeias mínimas	21
4.1	<i>Bloco central contendo um par de spins 1</i>	21
4.1.1	Renormalizações de primeira ordem	23
4.1.2	Renormalizações de segunda ordem	23
4.1.3	Comparação entre os gaps	24
4.2	<i>Bloco central contendo um trio de spins 1</i>	25
4.2.1	Renormalizações de primeira ordem	25
4.2.2	Renormalizações de segunda ordem	26
4.2.3	Comparação entre os gaps	27
4.3	<i>Blocos centrais contendo 4 ou 5 spins</i>	28
5	O algoritmo	31
5.1	<i>Codificação da cadeia</i>	31
5.2	<i>Recursos do algoritmo</i>	32
5.3	<i>Tempo de execução</i>	34
5.4	<i>Limitações e possíveis melhorias</i>	35
6	Aplicação à cadeia de Fibonacci	36
6.1	<i>Construção da cadeia</i>	36
6.2	<i>Cadeia com 8 sítios</i>	37
6.3	<i>Aplicação para cadeias de grande comprimento</i>	38

6.3.1	Pontos fixos da renormalização	38
7	Conclusão	44
	Referências¹	46
	Apêndice A – Hamiltoniano efetivo	49

¹ De acordo com a Associação Brasileira de Normas Técnicas. NBR 6023.

1 Introdução

Desde sua introdução por Ma, Dasgupta e Hu [3, 4], e especialmente após o enorme progresso analítico obtido por Fisher [5–7], o método do grupo de renormalização para desordem forte (GRDF) estabeleceu-se como uma das principais técnicas para a investigação teórica de sistemas quânticos de muitos corpos definidos em redes de baixa dimensionalidade com quebra de simetria translacional. O método foi inicialmente aplicado à cadeia antiferromagnética de Heisenberg, definida pelo hamiltoniano

$$H = \sum_j J_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}, \quad (1.1)$$

em que os acoplamentos $J_j > 0$ são escolhidos aleatoriamente e independentemente a partir de uma distribuição de probabilidades $P(J_j)$ e \mathbf{S}_j representa um vetor cujas componentes são operadores de spin $\frac{1}{2}$ associados ao j -ésimo sítio na cadeia.

Em sua formulação original, voltada para o estudo das propriedades de baixas energias, a ideia básica do método é a eliminação de graus de liberdade de energias mais altas pela projeção sucessiva de hamiltonianos locais, fortemente acoplados, sobre seus multipletos fundamentais, com o auxílio de cálculos perturbativos. Esse procedimento reduz progressivamente a escala de energia, ao mesmo tempo renormalizando o sistema pelo aumento da escala de comprimento e pela eliminação ou combinação de sítios da rede. Por meio de tratamentos analíticos e de implementações numéricas, o método fornece informações sobre a natureza do estado fundamental e das excitações de baixas energias, tendo sido decisivo para a compreensão das modificações introduzidas na física dos sistemas pela competição entre flutuações quânticas e geométricas. No caso da cadeia de Heisenberg antiferromagnética aleatória, toda renormalização envolve a formação de singletos entre spins fortemente acoplados em uma certa escala de energia, que induzem acoplamentos efetivos antiferromagnéticos entre spins progressivamente mais distantes à medida que a escala de energia é reduzida, apontando para um estado fundamental denominado “fase de singletos aleatórios”. Nessa fase, os poucos pares de spins formando singletos dominam as propriedades médias, mantendo o caráter crítico das correlações entre pares de spins, embora tipicamente dois spins escolhidos ao acaso correlacionem-se muito fracamente.

No contexto de baixas energias, o método foi estendido para diversos sistemas com elementos aleatórios, como a cadeia XYZ antiferromagnética [6, 8], a cadeia de Ising quântica [5, 7, 9, 10], a cadeia quântica de spin 1 com simetria SU(2) [1, 11–14] e diversos

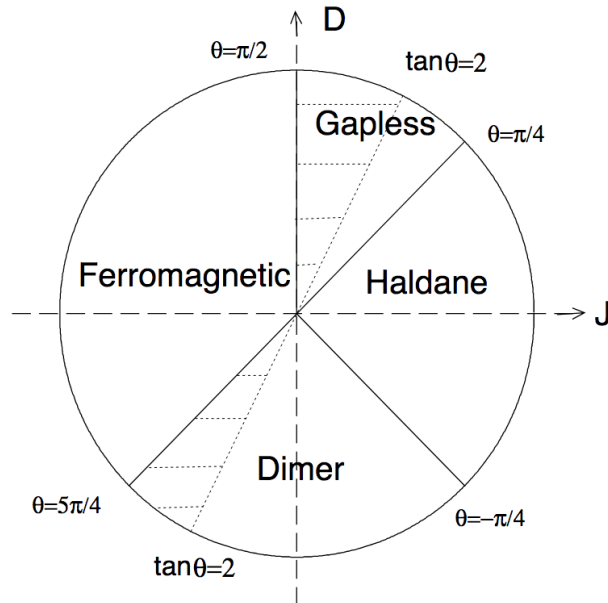


Figura 1 – Diagrama de fases da cadeia de spin 1 no caso uniforme. Extraído da referência [1].

outros [15–25]. Mais recentemente, surgiram extensões da abordagem para tratar estados excitados e dinâmica [26–29].

O método do GRDF também foi adaptado para investigar sistemas com desordem determinística, implementada pela distribuição de acoplamentos segundo regras de substituição [30] que produzem sequências aperiódicas. Considere, como exemplo, uma regra que, partindo de uma única letra b , itera as substituições $a \rightarrow ab$, $b \rightarrow a$. Essa regra produz a sequência aperiódica $abaababaabaab\dots$, conhecida como *sequência de Fibonacci*, pelo fato de que os números de letras nas diversas etapas de construção corresponde aos números de Fibonacci 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13 etc. No caso da cadeia de Heisenberg, a sequência pode ser utilizada para definir acoplamentos, atribuindo um acoplamento J_a ou J_b às posições em que a sequência contém uma letra a ou uma letra b , respectivamente. A adaptação do GRDF às cadeias aperiódicas determinísticas foi utilizada para estudar, no limite de baixas energias, a cadeia XXZ [31–36], a cadeia de Ising quântica [36, 37], a cadeia de Heisenberg de spin 1 [38] e o processo de contato com taxas aperiódicas [39].

Nesta dissertação, apresenta-se um algoritmo que implementa o método do GRDF para a cadeia mais geral de N spins 1 com simetria $SU(2)$, descrita pelo hamiltoniano

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} [J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + D_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2], \quad (1.2)$$

que, introduzindo os ângulos θ_i tais que $J_i = R_i \cos(\theta_i)$ e $D_i = R_i \sin(\theta_i)$, com

$$R_i = \sqrt{J_i^2 + D_i^2}, \quad (1.3)$$

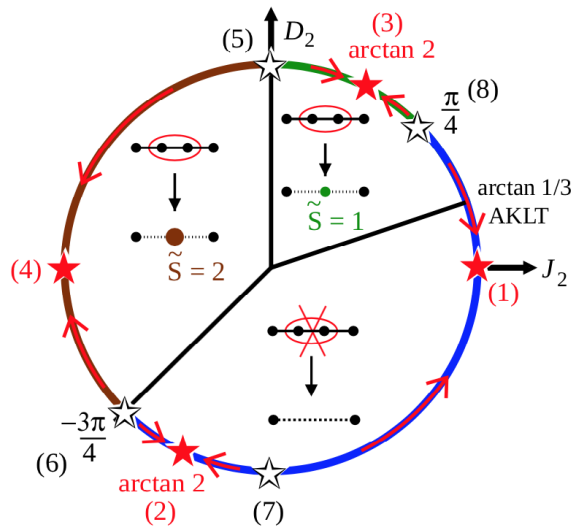


Figura 2 – Diagrama de fases da cadeia de spin 1 aleatória quando os ângulos θ_i são todos iguais. Extraído da referência [2].

pode ser reescrito como

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} R_i [\cos(\theta_i) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \sin(\theta_i) (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2]. \quad (1.4)$$

No limite uniforme, ou seja, quando $J_i \equiv J$ e $D_i \equiv D$, o estado fundamental do sistema é conhecido para todos os valores do ângulo $\theta = \arctan(D/J)$, como discutido em [40] e nas referências lá contidas. O diagrama de fases é reproduzido na figura 1. Para $-\pi/4 < \theta < \pi/4$, a cadeia exibe um gap de energia, o gap de Haldane [41], entre o estado fundamental e os primeiros estados excitados. Há um ponto no interior dessa fase, chamado de ponto AKLT [42], para o qual $\theta = \arctan(1/3)$ e que tem por estado fundamental um sólido de ligações de valência. Veremos adiante que esse ponto também é importante quando a simetria translacional do sistema é quebrada. Para $\pi/4 < \theta < \pi/2$, o sistema não possui gap de energia, exibindo ordem de quase-longo alcance associada às correlações quadrupolares [42]. Para $-3\pi/4 < \theta < -\pi/4$, o sistema é espontaneamente dimerizado, possuindo um gap de energia. No restante do diagrama, o estado fundamental do sistema é ferromagnético.

A versão aleatória do hamiltoniano na equação 1.4 foi estudada, através do GRDF, por Yang e Bhatt [1] e, de forma muito mais detalhada, por Quito e colaboradores [2, 14, 43]. No caso em que os ângulos θ_i são todos iguais e a desordem na grandeza R_i da equação 1.3 é suficientemente forte, o diagrama de fases é resumido na figura 2. Ao longo do processo de renormalização, apenas pares de spins são renormalizados a cada vez, dado que, supondo uma distribuição de probabilidades contínua da grandeza R_i , é desprezível a chance de que duas ligações vizinhas tenham a mesma intensidade. O diagrama da

figura 2 contém três fases. Para $-3\pi/4 < \theta < \pi/4$, o estado fundamental é uma fase de singletos aleatórios, análoga àquela observada para a cadeia de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$. Para $\pi/4 < \theta < \pi/2$, o estado fundamental também é uma fase de singletos aleatórios, mas agora formada majoritariamente por pares de spins contendo ao menos um spin efetivo, produzido em uma escala mais alta de energia pela renormalização de um par de spins fortemente acoplados cujo estado fundamental era um tripleto. Por fim, o restante dos valores de θ constitui uma fase ferromagnética.

Versões aperiódicas determinísticas do hamiltoniano na equação 1.4 já foram estudadas anteriormente por Casa Grande e colaboradores [38], utilizando o GRDF, mas apenas no caso $\theta_i = 0$, o que equivale a $D_i = 0$. Os resultados apontam que o gap de Haldane, característico do limite uniforme, é preservado ou destruído a depender de um expoente ω que quantifica o crescimento das flutuações geométricas associadas à aperiodicidade com o tamanho do sistema, segundo a forma de escala N^ω . Para a sequência de Fibonacci, caracterizada por $\omega = 0$, o gap de Haldane diminui, sem no entanto jamais anular-se, à medida que a razão $\max(J_a/J_b, J_b/J_a)$ diverge. Por outro lado, sequências caracterizadas por $\omega > 0$ destroem o gap de Haldane no limite $\max(J_a/J_b, J_b/J_a) \rightarrow \infty$, produzindo um estado fundamental análogo à fase de singletos aleatórios.

Um algoritmo que implemente numericamente o GRDF para o caso geral do hamiltoniano 1.4 com aperiodicidade determinística requer que sejam considerados blocos fortemente acoplados contendo mais do que 2 spins, uma vez que as regras de substituição podem produzir subsequências contendo letras repetidas. Os capítulos seguintes deste texto descrevem as diversas etapas necessárias para essa implementação. O capítulo 2 introduz os tensores esféricos irredutíveis, que permitem reescrever o hamiltoniano em uma forma conveniente para o GRDF. O capítulo 3 registra as equações de renormalização utilizadas, deduzidas no apêndice A, enquanto o capítulo 4 ilustra e testa essas equações em cadeias mínimas. O algoritmo é detalhado no capítulo 5 e aplicado ao caso da sequência de Fibonacci no capítulo 6. Finalmente, o capítulo 7 apresenta as conclusões e perspectivas deste trabalho.

2 Tensores esféricos irredutíveis

Este trabalho está focado em cálculos de uma hamiltoniana com termo biquadrático. Como discutido na tese [2], utilizar tensores esféricos irredutíveis (TEIs) será de extrema importância, fornecendo ferramentas matemáticas que simplificam as operações. Será feita uma breve introdução da teoria necessária para usar estes operadores e uma discussão sobre as propriedades relevantes.

2.1 Tensores esféricos irredutíveis

Os TEIs $Y_{J,M}(\mathbf{S}_i)$ construídos em termos dos operadores de spin \mathbf{S}_i são uma espécie de versão quântica dos harmônicos esféricos, e portanto são apropriados para lidar com problemas dotados da simetria $SU(2)$. Como apontado em [1] e [2], expressar um hamiltoniano simétrico em $SU(2)$ utilizando acoplamentos de TEIs, em vez de potências de $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$, tem a vantagem de que as diferentes propriedades de simetria dos TEIs de diferentes ordens não permitem que estes se misturem em cálculos perturbativos de primeira e segunda ordens, que estão no cerne do GRDF.

Dado que lidamos com uma cadeia de spin 1, vamos nos restringir a TEIs de ordem $J \leq 2$, que são escritos explicitamente como

$$Y_{0,0}(\mathbf{S}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad (2.1)$$

$$Y_{1,1}(\mathbf{S}) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} S^+, \quad (2.2)$$

$$Y_{1,0}(\mathbf{S}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} S^z, \quad (2.3)$$

$$Y_{1,-1}(\mathbf{S}) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} S^-, \quad (2.4)$$

$$Y_{2,2}(\mathbf{S}) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (S^+)^2, \quad (2.5)$$

$$Y_{2,1}(\mathbf{S}) = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} (S^z S^+ + S^+ S^z), \quad (2.6)$$

$$Y_{2,0}(\mathbf{S}) = -\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (\mathbf{S}^2 - 3(S^z)^2), \quad (2.7)$$

$$Y_{2,-1}(\mathbf{S}) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (S^z S^- + S^- S^z), \quad (2.8)$$

$$Y_{2,-2}(\mathbf{S}) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (S^-)^2. \quad (2.9)$$

Os TEIs acima são suficientes para a construção do hamiltoniano de spin 1 com termos quadráticos e biquadráticos, o que será feito a seguir.

2.2 Hamiltoniano em termos dos TEIs

O hamiltoniano mais geral para uma cadeia de spin 1 com simetria SU(2) pode ser escrito como

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} [J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + D_i (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2], \quad (2.10)$$

expressão que já apresentamos anteriormente. A existência dos termos que envolvem potências dos operadores $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$ torna importante expressá-los em termos dos TEIs. Utilizaremos a mesma forma dada por [44],

$$\mathbf{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}) \equiv \sum_{M=-J}^J (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_i) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{i+1}), \quad (2.11)$$

que permite reescrever o hamiltoniano, a menos de uma constante, como

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{J=1}^2 K_{i,J} \mathbf{O}_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}), \quad (2.12)$$

onde

$$\mathbf{O}_1(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) = \frac{3}{4\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2), \quad (2.13)$$

$$\mathbf{O}_2(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) = \frac{15}{16\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + \frac{15}{8\pi} (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)^2 - \frac{5}{8\pi} (\mathbf{S}_1^2 \mathbf{S}_2^2), \quad (2.14)$$

identidades deduzidas a partir das equações 2.1 a 2.9. Substituindo-as na equação 2.12 e comparando com a equação 2.10, encontramos que a relação entre os parâmetros $K_{i,J}$ e os acoplamentos J_i e D_i (ou os parâmetros R_i e θ_i) é dada por

$$\begin{aligned} J_i &= R_i \cos \theta_i = \frac{1}{16\pi} (12K_{i,1} + 15K_{i,2}), \\ D_i &= R_i \sin \theta_i = \frac{15}{8\pi} K_{i,2}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

que pode ser invertida para produzir

$$\begin{aligned} K_{i,1} &= \frac{4\pi}{3} J_i - \frac{2\pi}{3} D_i = \left(\frac{4\pi}{3} \cos \theta_i - \frac{2\pi}{3} \sin \theta_i \right) R_i, \\ K_{i,2} &= \frac{8\pi}{15} D_i = \left(\frac{8\pi}{15} \sin \theta_i \right) R_i. \end{aligned} \quad (2.16)$$

3 Equações do grupo de renormalização para desordem forte

Neste capítulo serão abordados os métodos perturbativos utilizados na determinação das equações do grupo de renormalização para desordem forte. O método se inicia pela identificação do bloco mais fortemente acoplado na cadeia, definido como um bloco de spins conectados por acoplamentos idênticos e tal que, considerado esse bloco isoladamente, o gap Ω entre seu estado fundamental e seus primeiros estados excitados seja máximo na cadeia. A hipótese subjacente, de desordem forte, é de que os blocos contíguos a esse tenham, cada um considerado isoladamente, gaps muito menores do que Ω . Se o estado fundamental do bloco fortemente acoplado consistir de um singleto, seus spins serão essencialmente inertes em baixas energias, mas, como veremos, excitações virtuais induzem um acoplamento efetivo e mais fraco entre os spins vizinhos, reduzindo a escala de energia do sistema. Se, por outro lado, o estado fundamental do bloco fortemente acoplado por um multiplete de degenerescência $2\tilde{S} + 1$, esse bloco pode ser substituído por um spin efetivo \tilde{S} cujo acoplamento efetivo com os spins vizinhos pode ser calculado perturbativamente. O processo é então reiniciado com os novos acoplamentos e iterado enquanto se mantiver válida a hipótese de desordem forte.

Revisaremos inicialmente o caso em que o bloco a ser renormalizado, ou seja, aquele com o maior gap na cadeia, é formado por dois sítios, como nas referências [1, 2, 14, 43]. Por concretude, vamos rotular por \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 os spins do bloco. A análise relevante envolve então quatro sítios, incluídos os vizinhos \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_4 , sendo o hamiltoniano local dado por

$$H = H_{1,2} + H_{2,3} + H_{3,4}, \quad (3.1)$$

em que, explicitamente,

$$H_{i,i+1} = \sum_{J=1}^2 K_{i,J} \sum_{M=-J}^J (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_i) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{i+1}). \quad (3.2)$$

A premissa é de que $H_{1,2}$ e $H_{3,4}$ representam termos perturbativos com respeito a $H_{2,3}$. Vamos denotar por $|S_2, S_3; J, M\rangle$ os autoestados de $H_{2,3}$ caracterizados pelos números quânticos $J = |S_2 - S_3|, \dots, S_2 + S_3$ e $M = -J, \dots, J$ e S_2 e S_3 o spin do sítio 2 e 3. As energias desses estados, E_J , independem de M . O número quântico J está associado aos autovalores do operador $(\mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3)^2$, enquanto M é um autovalor do operador $S_2^z + S_3^z$.

3.1 Teoria de perturbação de primeira ordem

Quando o estado fundamental de $H_{2,3}$ é um múltiplo, em oposição a um singlete, uma descrição de baixas energias para H pode ser obtida substituindo o par de spins \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 por um único spin efetivo $\tilde{\mathbf{S}}$, com $\tilde{S} \neq 0$, sendo $2\tilde{S} + 1$ a degenerescência do múltiplo fundamental de $H_{2,3}$. O tratamento perturbativo envolve fazer a projeção de H nos estados do par \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 com spin total \tilde{S} , estados que denotamos por $|S_2, S_3; \tilde{S}, M\rangle$, com $M = -\tilde{S}, \dots, \tilde{S}$.

Utilizando o projetor

$$P_{\tilde{S}} = \sum_{M=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} |S_2, S_3; \tilde{S}, M\rangle \langle S_2, S_3; \tilde{S}, M|, \quad (3.3)$$

construímos o hamiltoniano efetivo

$$H' = H'_{1,2} + H'_{3,4}, \quad (3.4)$$

com

$$H'_{1,2} = \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} \quad (3.5)$$

e

$$H'_{3,4} = \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{3,J} (-1)^M P_{\tilde{S}} Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_4). \quad (3.6)$$

Realizando algumas manipulações algébricas e invocando o teorema de Wigner-Eckart, conforme detalhado no apêndice A, obtemos

$$H'_{1,2} = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \tilde{\mathbf{S}}), \quad (3.7)$$

$$H'_{3,4} = \sum_{J=1}^2 K'_{3,J} O_J(\tilde{\mathbf{S}}, \mathbf{S}_4), \quad (3.8)$$

com

$$K'_{1,J} = \frac{\langle S_2, S_3; \tilde{S} \| Y_J(\mathbf{S}_1) \| S_2, S_3; \tilde{S} \rangle}{\langle S_2, S_3; \tilde{S} \| Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \| S_2, S_3; \tilde{S} \rangle} K_{1,J}, \quad (3.9)$$

$$K'_{3,J} = \frac{\langle S_2, S_3; \tilde{S} \| Y_J(\mathbf{S}_3) \| S_2, S_3; \tilde{S} \rangle}{\langle S_2, S_3; \tilde{S} \| Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \| S_2, S_3; \tilde{S} \rangle} K_{3,J}, \quad (3.10)$$

em que o elemento de matriz reduzido $\langle S_2, S_3; J' \| Y_J(\mathbf{S}_i) \| S_2, S_3; J'' \rangle$ é independente da componente M do operador tensorial e das projeções M' e M'' dos momentos angulares J' e J'' .

3.2 Teoria de perturbação de segunda ordem

A correção perturbativa de primeira ordem é nula quando o estado fundamental de $H_{2,3}$ é um singleto, o que pode ocorrer apenas se $S_2 = S_3 = S$. Nesse caso, é necessário realizar um tratamento de ordem superior, que produz um hamiltoniano efetivo $H' = H'_{1,4}$ conectando diretamente os spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_4 . Utilizando a teoria de perturbação de segunda ordem, obtemos

$$H'_{1,4} = P_0 (H_{1,2} + H_{3,4}) P \frac{1}{E_0 - H_{2,3}} P (H_{1,2} + H_{3,4}) P_0, \quad (3.11)$$

em que P_0 é o operador de projeção sobre o subespaço do singleto de $H_{2,3}$, com energia E_0 , enquanto $P = 1 - P_0$. Conforme mostrado no apêndice A, obtemos, em termos dos TEIs,

$$H'_{1,4} = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_4), \quad (3.12)$$

com

$$K'_{1,J} = 2 \frac{g_2(S, J)}{E_0 - E_J} K_{1,J} K_{3,J}. \quad (3.13)$$

A função $g_2(S, J)$ independe de M .

3.3 Extensão para blocos de n sítios

Na investigação de cadeias aperiódicas produzidas por regras de substituição, eventualmente aparecem blocos fortemente acoplados contendo mais do que 2 spins. Nesse caso, os resultados das seções anteriores devem ser modificados.

Vamos supor que um bloco fortemente acoplado contenha n spins, que denotamos por $\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3, \dots, \mathbf{S}_{n+1}$, e que o bloco seja ladeado à esquerda e à direita pelos spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_{n+2} , respectivamente. O hamiltoniano local é escrito como

$$H = H_{1,2} + H_{2,n+1} + H_{n+1,n}, \quad (3.14)$$

e os autoestados de $H_{2,n+1}$ são escritos como $|S_2, S_3, \dots, S_{n+1}; J, M, \mathbf{q}\rangle$, sendo $J(J+1)$ um autovalor do operador $(\mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \dots + \mathbf{S}_{n+1})^2$, $M = -J, \dots, J$ um autovalor do operador $S_2^z + S_3^z + \dots + S_{n+1}^z$ e \mathbf{q} o conjunto de números quânticos necessários para caracterizar completamente os autoestados. (No caso $n = 2$, esse conjunto é vazio, mas, para $n > 2$,

há diversos setores de autoestados caracterizados pelo mesmo valor de J , com distintas energias.) A introdução de \mathbf{q} é meramente formal, e não será necessário especificar os números quânticos associados. Devido à simetria $SU(2)$ do hamiltoniano, as energias $E_{J,\mathbf{q}}$ associadas aos autoestados $|S_2, S_3, \dots, S_{n+1}; J, M, \mathbf{q}\rangle$ não dependem de M .

Caso nos restringimos à região antiferromagnética do diagrama de fases, somente surgem blocos fortemente acoplados em que todos os spins são iguais, ou seja, $S_2 = S_3 = \dots = S_{n+1}$, hipótese que vamos adotar no restante desta seção. Para simplificar a notação, definimos nesse caso $|S^n; J, M, \mathbf{q}\rangle \equiv |S_2, S_3, \dots, S_{n+1}; J, M, \mathbf{q}\rangle$.

Conforme mostrado no apêndice A, quando o multipletto fundamental do bloco não é um singlete, sendo caracterizado pelos números quânticos $J = \tilde{S}$ e $\mathbf{q} = \tilde{\mathbf{q}}$, a correção perturbativa de primeira ordem assume a forma

$$H' = H'_{1,2} + H'_{n+1,n+2}, \quad (3.15)$$

em que

$$H'_{1,2} = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \tilde{\mathbf{S}}), \quad (3.16)$$

e

$$H'_{n+1,n+2} = \sum_{J=1}^2 K'_{n+1,J} O_J(\tilde{\mathbf{S}}, \mathbf{S}_{n+2}), \quad (3.17)$$

com

$$K'_{1,J} = \frac{\langle S^n; \tilde{S}, \tilde{\mathbf{q}} \parallel Y_J(\mathbf{S}_2) \parallel S^n; \tilde{S}, \tilde{\mathbf{q}} \rangle}{\langle S^n; \tilde{S}, \tilde{\mathbf{q}} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S^n; \tilde{S}, \tilde{\mathbf{q}} \rangle} K_{1,J}, \quad (3.18)$$

$$K'_{n+1,J} = \frac{\langle S^n; \tilde{S}, \tilde{\mathbf{q}} \parallel Y_J(\mathbf{S}_{n+1}) \parallel S^n; \tilde{S}, \tilde{\mathbf{q}} \rangle}{\langle S^n; \tilde{S}, \tilde{\mathbf{q}} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S^n; \tilde{S}, \tilde{\mathbf{q}} \rangle} K_{n+1,J}. \quad (3.19)$$

Por outro lado, quando o estado fundamental do bloco é um singlete, denotado por $|S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle$, temos $H' = H'_{1,n+2}$, com

$$H'_{1,n+2} = \sum_{J=1}^2 \tilde{K}_{1,n+2}^{(J)} O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_{n+2}) \quad (3.20)$$

em que

$$K'_{1,J} = 2K_{1,J}K_{n+1,J} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0} \frac{g_n(S, J, \mathbf{q}_0, \mathbf{q})}{E_{0,\mathbf{q}_0} - E_{J,\mathbf{q}}}, \quad (3.21)$$

sendo $g_n(S, J, \mathbf{q}_0, \mathbf{q})$ uma função que independe de M .

A inspeção das equações 3.18, 3.19 e 3.21 deixa claro que, expressas em termos dos acoplamentos $K_{i,J}$ entre os TEIs, as equações de renormalização produzem acoplamentos

efetivos que, exceto pela contribuição dos gaps do bloco fortemente conectado, envolvem apenas termos associados aos mesmos valores de J . Como se pode ver das equações 2.13 e 2.14, essa é uma simplificação considerável em relação às equações que obteríamos em termos dos acoplamentos J_i e D_i .

4 Renormalização de cadeias mínimas

Neste capítulo, aplicaremos as equações de renormalização 3.18, 3.19 e 3.21 a cadeias mínimas, que consistem somente de um bloco central fortemente acoplado de n spins e dos primeiros vizinhos desse bloco. O hamiltoniano de uma cadeia mínima tem a forma

$$H = H_{1,2} + H_{2,n+1} + H_{n+1,n+2}, \quad (4.1)$$

com

$$H_{1,2} = \sum_{J=1}^2 K_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2), \quad (4.2)$$

$$H_{2,n+1} = \sum_{J=1}^2 K_{2,J} \sum_{i=2}^n O_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}), \quad (4.3)$$

e

$$H_{1,2} = \sum_{J=1}^2 K_{n+1,J} O_J(\mathbf{S}_{n+1}, \mathbf{S}_{n+2}). \quad (4.4)$$

Em cada caso, comparamos o gap de energia exato, da cadeia de $n + 2$ spins, com aquele obtido após a renormalização do bloco fortemente acoplado. Sempre tomamos $S_i \equiv S$ e $\theta_i = \tan(D_i/J_i) \equiv \theta$ para todos os $n + 2$ spins originais na cadeia. Vamos estudar os casos de $n = 2$ até $n = 5$, que são relevantes para a aplicação do GRDF para a cadeia de Fibonacci, que será discutida no capítulo 6.

4.1 Bloco central contendo um par de spins 1

Os primeiros testes foram realizados utilizando como bloco fortemente acoplado um par de spins 1, como representado na figura 3. Será explorado como o estado fundamental do bloco se comporta em função do ângulo θ . Então calcularemos o H efetivo para cada caso, utilizando teoria de perturbação de primeira ou de segunda ordem.

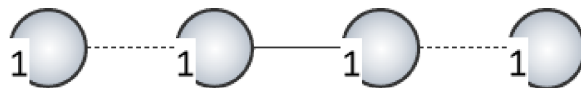


Figura 3 – Figura representando uma cadeia de 4 spins 1. As esferas pretas indicam um sítio, as linhas tracejadas a ligação do tipo K_a e a linha contínua, uma ligação K_b .

Para definir a ordem do cálculo perturbação, é preciso entender o comportamento de $H_{2,3}$, que possui como autoestados um singlete, com energia e_0 , um tripleto, com energia e_3 , e um quintupeto, com energia e_5 . Nesse caso, definindo $R_2 = \sqrt{J_2^2 + D_2^2}$, é possível realizar o cálculo exato do valor da energia para cada um dos três estados. Escrevendo $H_{2,3}$ na forma

$$H_{2,3} = \sum_{J=1}^2 K_{2,J} O_J(\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3), \quad (4.5)$$

com

$$K_{2,1} = \frac{4\pi}{3} R_2 \cos \theta - \frac{2\pi}{3} R_2 \sin \theta, \quad (4.6)$$

$$K_{2,2} = \frac{8\pi}{15} R_2 \sin \theta, \quad (4.7)$$

obtemos

$$e_0 = -2R_2 \left(\cos \theta - \frac{4}{3} \sin \theta \right) \quad e_3 = -R_2 \left(\cos \theta + \frac{1}{3} \sin \theta \right) \quad e_5 = -R_2 \left(\cos \theta - \frac{1}{3} \sin \theta \right). \quad (4.8)$$

Assim, fica claro que o estado fundamental dependerá do ângulo θ . Utilizando a equação 4.8 é possível construir o diagrama 4, indicando o estado fundamental para os diversos valores de θ . Note que o singlete e o tripleto são degenerados quando $\theta = \arctan(1/3)$, o tripleto e o quintupeto são degenerados quando $\theta = \pi/2$ e, por fim, o quintupeto e o singlete são degenerados quando $\theta = -3\pi/4$.

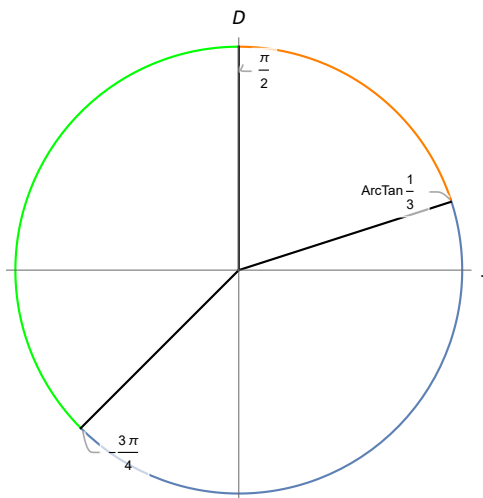


Figura 4 – Diagrama indicando qual é o estado fundamental do par de spins 1. Azul, laranja e verde indicam, respectivamente, singlete, tripleto e quintupeto.

4.1.1 Renormalizações de primeira ordem

Para os casos em que o tripleto ou o quintupeto correspondem ao estado fundamental de $H_{2,3}$, é necessário utilizar as equações 3.18 e 3.19 para realizar a renormalização. O par de spins 1 dá lugar a um spin efetivo $\tilde{\mathbf{S}}$, com $\tilde{S} = 1$ (tripleto) ou $\tilde{S} = 2$ (quintupeto). Para ângulos em que o tripleto é o estado fundamental, as ligações efetivas são, com $i \in \{1, 3\}$,

$$K'_{i,1} = \frac{1}{2}K_{i,1} \quad \text{e} \quad K'_{i,2} = -\frac{1}{2}K_{i,2}, \quad (4.9)$$

enquanto para ângulos em que o estado fundamental é um quintupeto obtemos

$$K'_{i,1} = 0 \quad \text{e} \quad K'_{1,2} = -K_{i,2}. \quad (4.10)$$

Se $K_{1,J} = K_{3,J}$, para $J \in \{1, 2\}$, obtemos $K'_{1,J} = K'_{3,J}$, e uma estimativa para o gap do hamiltoniano original de 4 spins é fornecida pelo gap do problema de 3 spins representado na figura a seguir.



Figura 5 – Representação da renormalização da figura 3 quando o bloco central dá origem a um spin efetivo com valor $\tilde{S} = 1$ ou $\tilde{S} = 2$, a depender do ângulo θ . As linhas representam os acoplamentos efetivos.

4.1.2 Renormalizações de segunda ordem

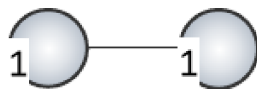


Figura 6 – Representação da renormalização da figura 3 quando o bloco central tem por estado fundamental um singleto. As linhas representam os acoplamentos efetivos.

Na região onde o estado fundamental é um singleto, a correção perturbativa de primeira ordem é nula, e devemos calcular acoplamentos efetivos entre os spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_4 utilizando a equação 3.21, resultando em

$$K'_{1,1} = \frac{16}{12K_{2,1} - 75K_{2,2}}K_{1,1}K_{3,1} \quad \text{e} \quad K'_{1,2} = -\frac{20}{36K_{2,1} - 45K_{2,2}}K_{1,2}K_{3,2}. \quad (4.11)$$

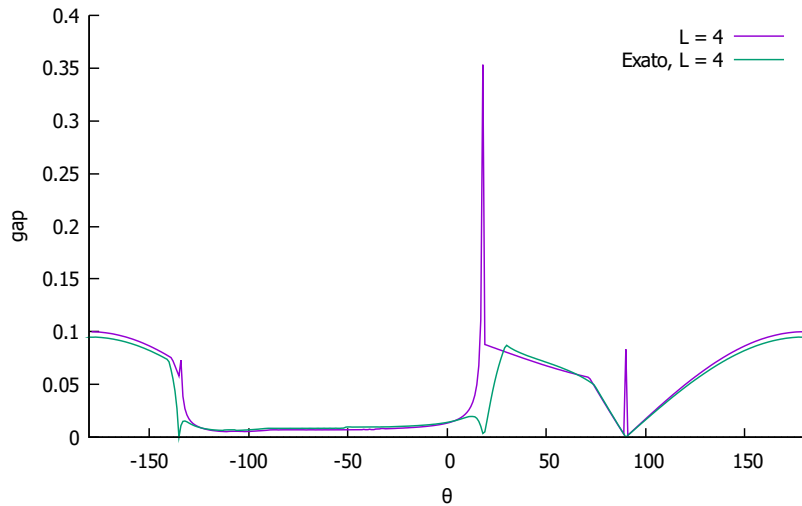


Figura 7 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas baseadas no hamiltoniano efetivo para um cadeia de 4 spins com um bloco central de 2 spins fortemente acoplados.

4.1.3 Comparação entre os gaps

De modo a testar a descrição efetiva da cadeia de 4 spins a partir da renormalização do bloco central de 2 spins fortemente acoplados, vamos supor um hamiltoniano de 4 spins

$$H = \sum_{i=1}^3 \sum_{J=1}^2 K_{i,J} O_J(\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_{i+1}), \quad (4.12)$$

com $R_1 = R_3 = \frac{1}{10}R_2$ e $\theta_i \equiv \theta$; veja as equações 2.15 e 2.16. Daqui por diante, neste capítulo, vamos escolher $R_2 = 1$.

A figura 7 mostra uma comparação entre os gaps exato, ou seja, calculado a partir de H , e efetivo, ou seja, calculado a partir de um hamiltoniano efetivo H' . Esse hamiltoniano efetivo H' é definido, com o auxílio da equação 4.11, como

$$H' = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_4), \quad (4.13)$$

se o estado fundamental de $H_{2,3}$ é um singleto, enquanto, no caso em que o estado fundamental é um tripleto ou um quintupeto, e levando em conta as equações 4.9 ou 4.10, vale

$$H' = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \tilde{\mathbf{S}}) + \sum_{J=1}^2 K'_{3,J} O_J(\tilde{\mathbf{S}}, \mathbf{S}_4). \quad (4.14)$$

Os resultados mostram uma boa concordância entre os gaps exato e efetivo, exceto nas vizinhanças dos pontos de degenerescência mostrados na figura 4, $\theta = -3\pi/4$, $\theta = \arctan(1/3)$ e $\theta = \pi/2$, em que não se espera que o tratamento perturbativo seja válido.

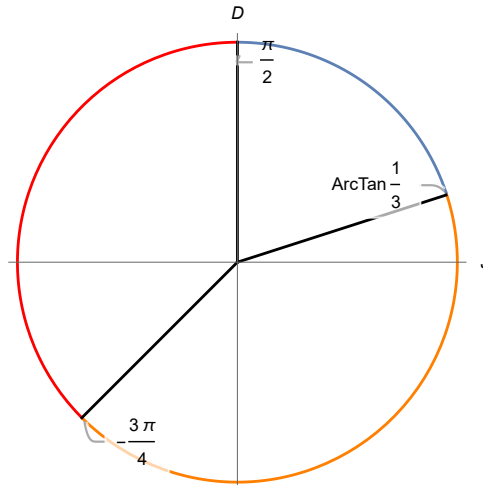


Figura 8 – Diagrama indicando o estado fundamental do trio de spins 1. Azul, laranja e vermelho indicam, respectivamente, $\tilde{S} = 0$, $\tilde{S} = 1$, $\tilde{S} = 3$.

4.2 Bloco central contendo um trio de spins 1

Nos casos em que o bloco central contém mais do que 2 spins $S = 1$, não há expressões fechadas (simples) para as energias desse bloco. É necessário recorrer a cálculos numéricos para determinar os acoplamentos efetivos a partir das equações 3.18, 3.19 e 3.21. Como veremos, ao contrário do que ocorre para um bloco central de 2 spins, os acoplamentos efetivos não são mais constantes ao longo da região em que o estado fundamental do bloco central é um tripleto.

No caso $n = 3$, ou seja, em que o bloco central contém 3 spins, seu hamiltoniano é

$$H_{2,4} = \sum_{J=1}^2 K_{2,J} [O_J(\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3) + O_J(\mathbf{S}_3, \mathbf{S}_4)]. \quad (4.15)$$

A figura 8 mostra os intervalos angulares em que o hamiltoniano do bloco central, $H_{2,4}$, com $\theta_2 = \theta_3 = \theta$, tem por estado fundamental um singleto ($\tilde{S} = 0$), um tripleto ($\tilde{S} = 1$) ou um septupletto ($\tilde{S} = 3$).

4.2.1 Renormalizações de primeira ordem

Para os casos em que o tripleto ou o septupletto correspondem ao estado fundamental de $H_{2,4}$, é necessário utilizar as equações 3.18 e 3.19 para realizar a renormalização. O trio

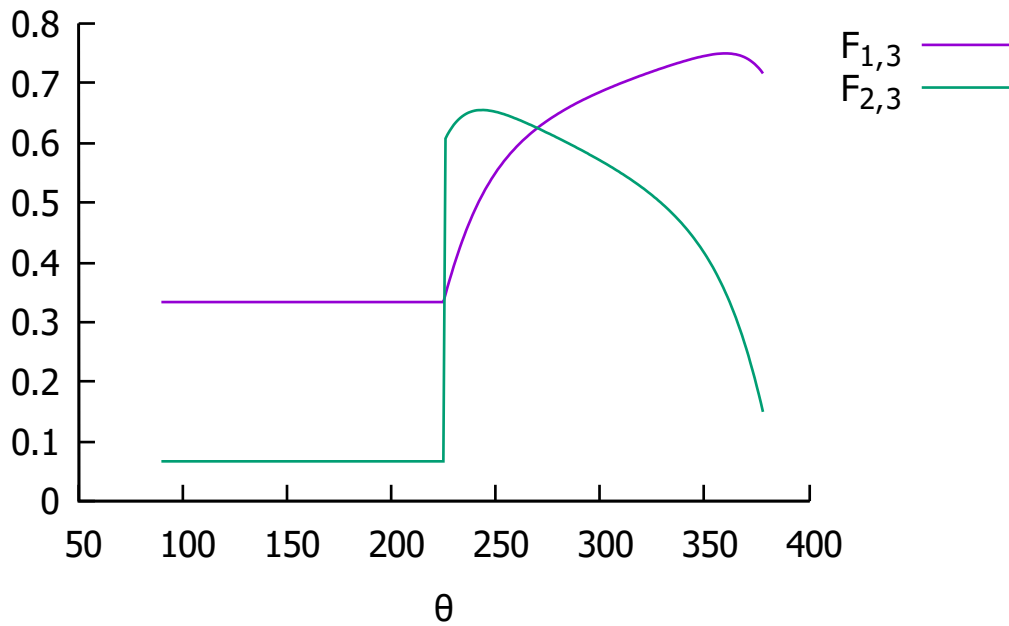


Figura 9 – Valores numéricos calculado dos coeficientes $F_{J,3}(\theta)$. A descontinuidade em $F_{2,3}(\theta)$ ocorre na transição entre estados fundamentais com $\tilde{S} = 3$ e $\tilde{S} = 1$.

de spins 1 dá lugar a um spin efetivo \tilde{S} , com $\tilde{S} = 1$ (triplete) ou $\tilde{S} = 3$ (septuplete). De forma geral, podemos escrever os acoplamentos efetivos como

$$K'_{1,J} = F_{J,3}(\theta)K_{1,J} \quad \text{e} \quad K'_{4,J} = F_{J,3}(\theta)K_{4,J}, \quad (4.16)$$

em que a função $F_{J,3}(\theta)$ pode ser calculada numericamente, a partir das equações 3.18 e 3.19, para todo o intervalo de valores de θ em que o spin efetivo é $\tilde{S} > 0$. A figura 9 ilustra o comportamento dessas funções quando $R_1 = R_4 = \frac{1}{10}R_2$.

4.2.2 Renormalizações de segunda ordem

Na região onde o estado fundamental de $H_{2,4}$ é um singleto, devemos calcular acoplamentos efetivos entre os spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_5 utilizando a equação 3.21, resultando em

$$K'_{1,J} = G_{J,3}(\theta)K_{1,J}K_{4,J}, \quad (4.17)$$

em que as funções $G_{J,3}(\theta)$ pode ser calculada numericamente, a partir da equação 3.21, para todo o intervalo de valores de θ em que o estado fundamental de $H_{2,4}$ é um singleto. A figura 10 ilustra o comportamento dessas funções quando $R_1 = R_4 = \frac{1}{10}R_2$.

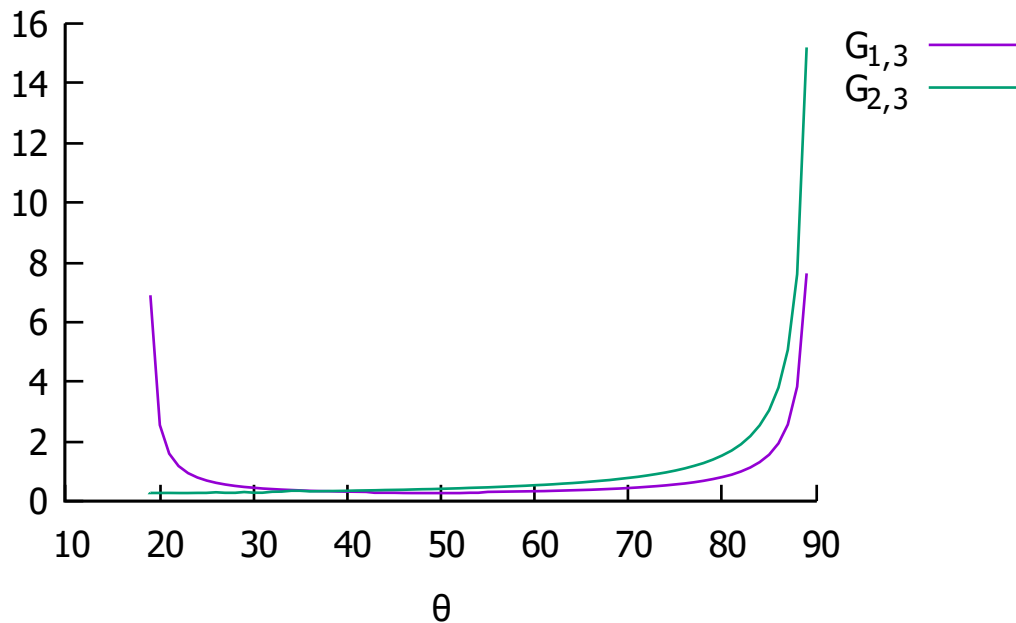


Figura 10 – Valores numéricos calculados para os coeficientes $G_{J,3}$. Há uma divergência nos limites onde ocorre a degenerescência do estado fundamental, como se verifica pela equação 3.21

4.2.3 Comparação entre os gaps

De modo a testar a descrição efetiva da cadeia de 5 spins a partir da renormalização do bloco central de 3 spins fortemente acoplados, vamos supor o hamiltoniano da equação 4.15, com $R_1 = R_4 = \frac{1}{10}R_2$ e $\theta_i \equiv \theta$.

A figura 11 mostra uma comparação entre os gaps exato, ou seja, calculado a partir de H , e efetivo, ou seja, calculado a partir de um hamiltoniano efetivo H' . Esse hamiltoniano efetivo H' é definido, com o auxílio da equação 4.17, como

$$H' = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_5), \quad (4.18)$$

se o estado fundamental de $H_{2,4}$ é um singleto, enquanto, no caso em que o estado fundamental é um tripleto ou um septupeto, e levando em conta a equação 4.16, vale

$$H' = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \tilde{\mathbf{S}}) + \sum_{J=1}^2 K'_{4,J} O_J(\tilde{\mathbf{S}}, \mathbf{S}_5). \quad (4.19)$$

Os resultados mostram uma boa concordância entre os gaps exato e efetivo, exceto nas vizinhanças dos pontos de degenerescência mostrados na figura 8, $\theta = -3\pi/4$, $\theta = \arctan(1/3)$ e $\theta = \pi/2$, em que de fato não se espera que o tratamento perturbativo seja válido.

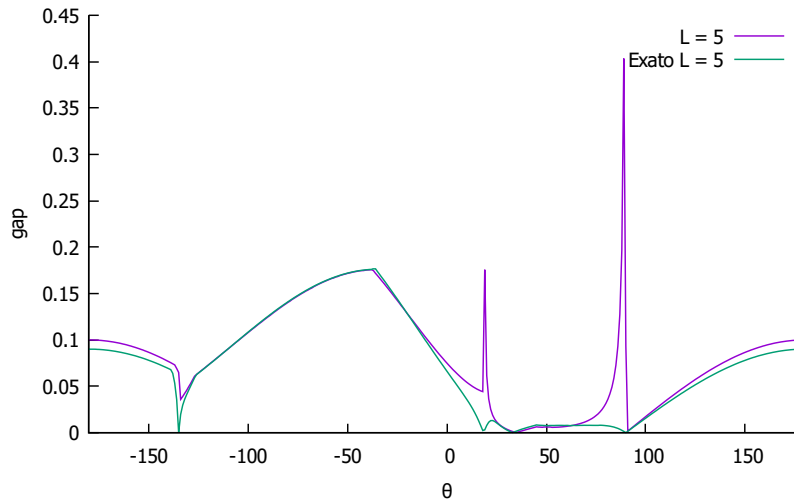


Figura 11 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas baseadas no hamiltoniano efetivo para um cadeia de 5 spins com um bloco central de 3 spins fortemente acoplados.

4.3 Blocos centrais contendo 4 ou 5 spins

Análises análogas às anteriores podem ser feitas quando o bloco central contém $n = 4$ ou $n = 5$ spins. Nesses casos, as renormalizações de primeira ordem seguem, para $n = 4$, as equações

$$K'_{1,J} = F_{J,4}(\theta)K_{1,J} \quad \text{e} \quad K'_{5,J} = F_{J,4}(\theta)K_{5,J}, \quad (4.20)$$

ou, para $n = 5$, as equações

$$K'_{1,J} = F_{J,5}(\theta)K_{1,J} \quad \text{e} \quad K'_{6,J} = F_{J,5}(\theta)K_{6,J}, \quad (4.21)$$

com as funções $F_{J,4}(\theta)$ e $F_{J,5}(\theta)$ calculadas numericamente para todo o intervalo em que o spin efetivo correspondente é $\tilde{S} > 0$, conforme indicado nas figuras 12 e 13. De forma semelhante, as renormalizações de segunda ordem são descritas, para $n = 4$, pela equação

$$K'_{1,J} = G_{J,4}(\theta)K_{1,J}K_{5,J}, \quad (4.22)$$

ou, para $n = 5$, pela equação

$$K'_{1,J} = G_{J,5}(\theta)K_{1,J}K_{6,J}, \quad (4.23)$$

com as funções $G_{J,4}(\theta)$ e $G_{J,5}(\theta)$ calculadas numericamente para todo o intervalo em que o spin efetivo correspondente é $\tilde{S} = 0$.

As comparações entre os gaps exato e efetivo para os casos $n = 4$ e $n = 5$ são mostrados, respectivamente, nas figuras 14 e 15, supondo acoplamentos nas bordas

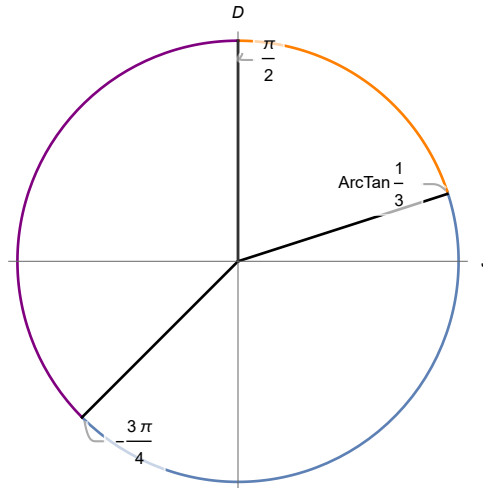


Figura 12 – Diagrama indicando qual é o spin efetivo do estado fundamental de um quarteto de spins 1. Azul, laranja e roxo correspondem, respectivamente, $\tilde{S} = 0$, $\tilde{S} = 1$, $\tilde{S} = 4$.

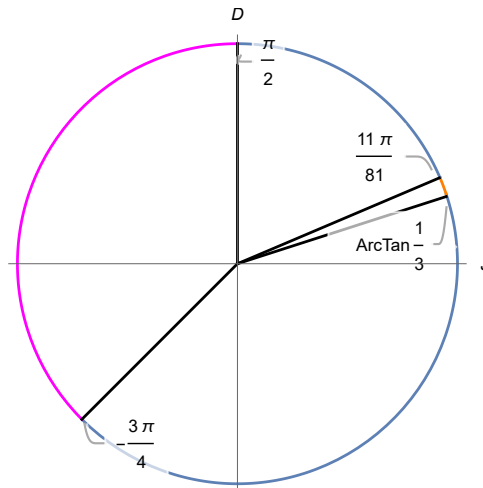


Figura 13 – Diagrama indicando qual é o spin efetivo do estado fundamental de um quinteto de spins 1. Azul, laranja e magenta correspondem, respectivamente, $\tilde{S} = 0$, $\tilde{S} = 1$, $\tilde{S} = 5$.

iguais a $\frac{1}{10}$ dos acoplamentos centrais. Como nos casos anteriores, a concordância é boa, exceto nas regiões próximas dos pontos de degenerescência. Note que, no caso $n = 5$, o estado fundamental é um tripleto apenas em um estreito intervalo angular $\arctan(1/3) < \theta < 11\pi/81$, no qual, conseqüentemente, a qualidade do cálculo perturbativo é reduzida.

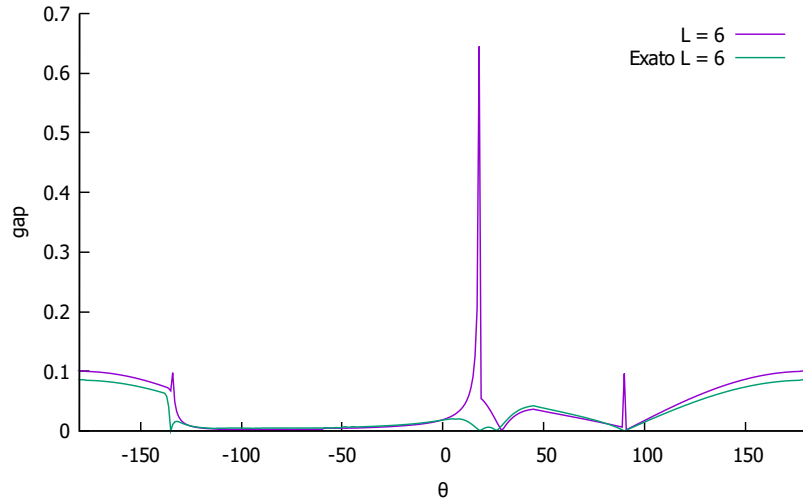


Figura 14 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas baseadas no hamiltoniano efetivo para um cadeia de 6 spins com um bloco central de 4 spins fortemente acoplados.

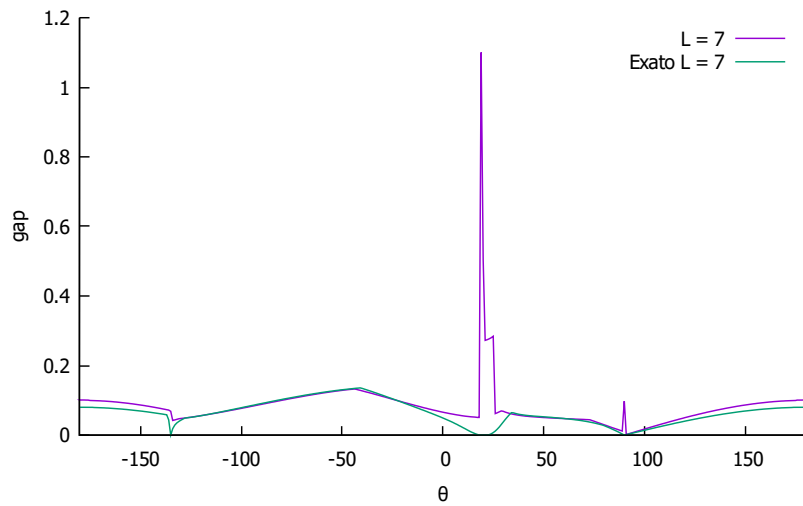


Figura 15 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas baseadas no hamiltoniano efetivo para um cadeia de 7 spins com um bloco central de 5 spins fortemente acoplados.

5 O algoritmo

Para realizar o procedimento de GRDF em uma cadeia arbitrária, foi desenvolvido um código computacional, utilizando o Mathematica. A estrutura do algoritmo está representada na figura 16. Detalhes adicionais serão tratados neste capítulo. O código computacional está disponível em (<https://bityli.com/SzuBLnlf>).

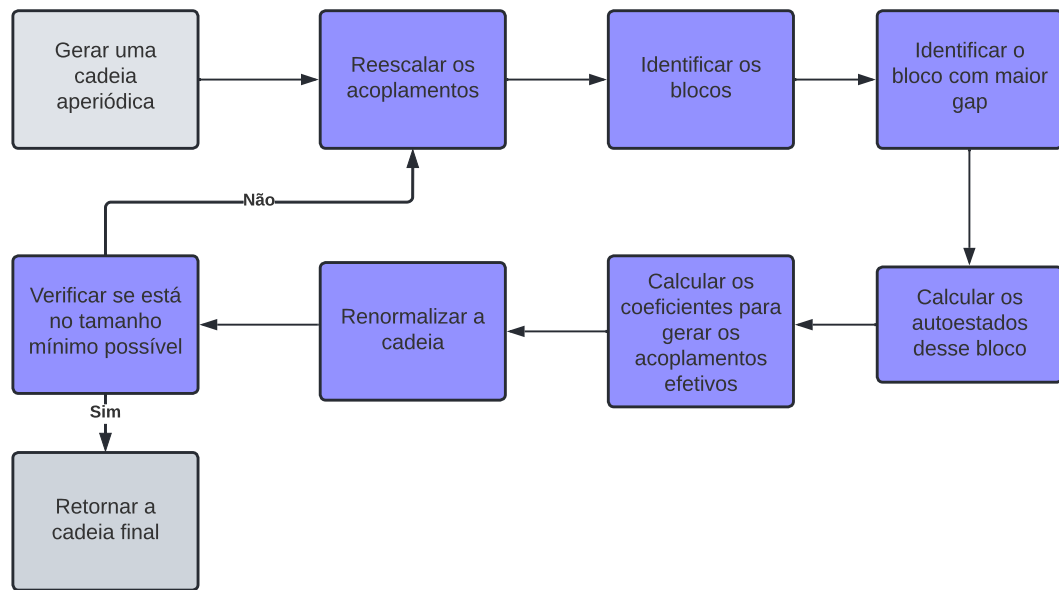


Figura 16 – Fluxo simplificado do algoritmo proposto

5.1 Codificação da cadeia

No algoritmo, a cadeia é caracterizada por uma matriz cuja i -ésima linha contém as propriedades associadas ao i -ésimo spin. Explicitamente, essas propriedades são $K_{i,1}$, $K_{i,2}$, S_i , $n_{i,0}$ e n_i . Aqui, $K_{i,1}$ e $K_{i,2}$ representam os acoplamentos entre os TEIs correspondentes aos spins \mathbf{S}_i e \mathbf{S}_{i+1} , S_i é o valor do spin no sítio i e, por fim, os termos $n_{i,0}$ e n_i são, respectivamente, a posição do spin na cadeia original e sua posição atual. A mudança de posição, destacamos, é causada pela eliminação progressiva de spins ao longo do processo de renormalização.

Um exemplo de configuração dessa matriz está mostrado a seguir, correspondendo a um hamiltoniano original de 8 spins,

$$H = \sum_{J=1}^2 [K_{a,J}O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2) + K_{b,J}O_J(\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3) + K_{a,J}O_J(\mathbf{S}_3, \mathbf{S}_4) + K_{a,J}O_J(\mathbf{S}_4, \mathbf{S}_5) + K_{b,J}O_J(\mathbf{S}_5, \mathbf{S}_6) + K_{a,J}O_J(\mathbf{S}_6, \mathbf{S}_7) + K_{b,J}O_J(\mathbf{S}_7, \mathbf{S}_8)], \quad (5.1)$$

com $K_{a,1} = 0.350399$, $K_{a,2} = 0.0433655$, $K_{b,1} = 3.50399$ e $K_{b,2} = 0.0433655$. Após eliminar os pares de spins conectados por acoplamentos $K_{b,J}$, cujo estado fundamental local é um singleto, resta um hamiltoniano efetivo

$$H' = K'_{b,J}O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_4). \quad (5.2)$$

Esse processo é representado pela transformação matricial

$$\begin{pmatrix} 0.350399 & 0.0433655 & 1 & 1 & 1 \\ 3.50399 & 0.433655 & 1 & 2 & 2 \\ 0.350399 & 0.0433655 & 1 & 3 & 3 \\ 0.350399 & 0.0433655 & 1 & 4 & 4 \\ 3.50399 & 0.433655 & 1 & 5 & 5 \\ 0.350399 & 0.0433655 & 1 & 6 & 6 \\ 3.50399 & 0.433655 & 1 & 7 & 7 \\ 0. & 0. & 1 & 8 & 8 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0.206271 & -0.000352731 & 1 & 1 & 1 \\ 0. & 0. & 1 & 4 & 2 \end{pmatrix},$$

em que os acoplamentos nulo na última linha de cada matriz indicam a borda direita da cadeia, seja original ou efetiva.

5.2 Recursos do algoritmo

O algoritmo trabalha com cadeias arbitrárias compostas inicialmente de spin $S = \frac{1}{2}$ ou $S = 1$ dotadas de simetria $SU(2)$, desde que os acoplamentos estejam restritos a sítios vizinhos. O algoritmo é capaz de lidar com renormalizações que produzam spins maiores do que $S = 1$, dado que, mesmo nesses casos, as propriedades dos TEIs garantem que não surgirão acoplamentos efetivos $K'_{i,J}$ com $J > 2$ (veja a referência [2]).

Além de implementar numericamente a renormalização, calculando os acoplamentos efetivos, o algoritmo produz visualizações das cadeias, conforme ilustramos a seguir, utilizando a cadeia de Fibonacci, que será estudada em detalhe no capítulo 6.

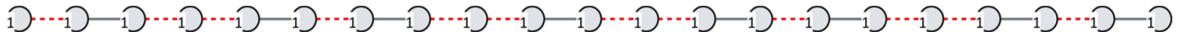


Figura 17 – Cadeia de Fibonacci com 21 sítios. As linhas tracejadas representam acoplamentos fracos, $K_{a,J}$, e as linhas contínuas, acoplamentos fortes, $K_{b,J}$. Os círculos indicam as posições dos sítios, enquanto os números no canto esquerdo de cada círculo indicam o valor do spin ocupando aquele sítio.



Figura 18 – Representação dos blocos encontrados na cadeia de Fibonacci inicial.



Figura 19 – Cadeia efetiva obtida após a primeira varredura da cadeia mostrada na figura 17, no caso em que, para os blocos fortemente conectados, $\tilde{S} = 0$.

A cadeia de Fibonacci contém três tipos distintos de blocos, um formado por dois sítios conectados por acoplamentos $K_{a,J}$, outro formado por três sítios conectados por acoplamentos $K_{a,J}$ e o último formado por dois sítios conectados por acoplamentos $K_{b,J}$. Apenas como exemplo, a figura 17 mostra a imagem, produzida pelo algoritmo, de uma cadeia de 21 sítios, enquanto a figura 18 exhibe os três tipos de blocos.

Supondo que $\max(K_{b,1}, K_{b,2}) \gg \max(K_{a,1}, K_{a,2})$, então os blocos conectados pelos acoplamentos $K_{b,J}$ terão, genericamente, o maior gap local. Todos esses blocos são renormalizados em uma primeira varredura da rede, produzindo uma cadeia efetiva. A depender do ângulo inicial $\theta \equiv \theta_a = \theta_b$, a cadeia efetiva tem diferentes configurações.

Se os blocos fortemente conectados têm como estado fundamental um singlete, 8 pares de spins são eliminados e a cadeia efetiva, mostrada na figura 19, é composta de apenas 5 spins com $S = 1$. Conforme discutido para a cadeia de Heisenberg [32, 38], a menos de ligações nas bordas, os acoplamentos efetivos distribuem-se de acordo com uma sequência de Fibonacci, este resultado é explícito ao se aplicar a renormalização para uma cadeia com um número maior de sítios.

Se os blocos fortemente conectados têm como estado fundamental um tripleto, 8 pares de spins são substituídos por spins efetivos com $\tilde{S} = 1$, como mostrado na figura 5;



Figura 20 – Cadeia efetiva obtida após a primeira varredura da cadeia mostrada na figura 17, no caso em que, para os blocos fortemente conectados, $\tilde{S} = 1$.



Figura 21 – Cadeia efetiva obtida após a primeira varredura da cadeia mostrada na figura 17, no caso em que, para os blocos fortemente conectados, $\tilde{S} = 2$.

a cadeia efetiva, mostrada na figura 20, é composta de 13 spins, todos com $S = 1$. Note a presença, na cadeia efetiva, de blocos fortemente acoplados contendo até 5 spins, o que indica que a distribuição de acoplamentos não mais corresponde à sequência de Fibonacci.

Se os blocos fortemente conectados têm como estado fundamental um quintupletto, 8 pares de spins são substituídos por spins efetivos com $\tilde{S} = 2$; a cadeia efetiva, mostrada na figura 21, é composta de 13 spins, parte com $S = 1$ e parte com $S = 2$. Novamente há blocos fortemente acoplados contendo até 5 spins, o que indica que a distribuição de acoplamentos não mais corresponde à sequência de Fibonacci.

A partir da cadeia efetiva, o processo pode ser reiniciado, com uma segunda varredura que produz uma nova cadeia efetiva. Esses passos são iterados até que se atinja uma cadeia de tamanho não inferior a 2 sítios. Ao longo das varreduras, a escala de energia é reduzida, o que pode produzir instabilidades numéricas nas etapas de cálculo que envolvem diagonalização de matrizes. Para minimizar essas instabilidades, após cada varredura os acoplamentos efetivos são multiplicados por coeficientes que garantem que os cálculos sensíveis são efetuados com parâmetros de ordem 1. Esses coeficientes são registrados para que não se perca a informação sobre a escala verdadeira de energia do sistema.

5.3 Tempo de execução

Para acoplamentos escolhidos de acordo com sequências aperiódicas determinísticas, em que há sempre um tamanho máximo para os blocos fortemente conectados, o tempo de execução do algoritmo tem dependência essencialmente linear com o número inicial de sítios da cadeia, L . Como cadeias aperiódicas não apresentam um padrão recorrente, sempre é necessário percorrer todos os sítios para garantir que seja encontrado o bloco com maior gap, contudo há uma redução exponencial no número de sítios após cada varredura, tornando viável o estudo para grandes valores de L , da ordem de algumas centenas de

milhares de sítios. É claro que a taxa de redução no número de sítios depende de \tilde{S} , ou seja, de θ , como mostra a figura 22.

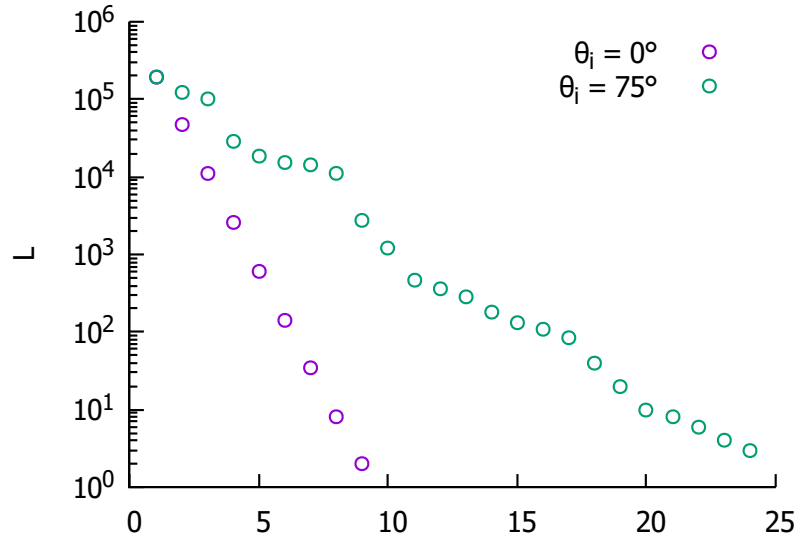


Figura 22 – Número de spins efetivos da cadeia após cada varredura.

5.4 Limitações e possíveis melhorias

Por limitações de memória dos computadores, o algoritmo não consegue lidar com blocos fortemente conectados contendo mais do que 9 ou 10 spins com $S = 1$, restrição especialmente relevante nas fases ferromagnéticas. Isso poderia ser ligeiramente melhorado se a tarefa de diagonalização dos hamiltonianos locais fosse dividida de acordo com quantidades conservadas, como, por exemplo, a componente z do spin total.

Seria possível estender a aplicabilidade do algoritmo para as cadeias mais gerais com simetria $SU(2)$ contendo inicialmente spins com $S > 1$. Isso requereria, para lidar com potências até $2S$ dos produtos $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$, a utilização de TEIs de ordem superior, reduzindo, ao mesmo tempo, o tamanho máximo dos blocos fortemente acoplados com que seria possível lidar, em virtude do crescimento da dimensão do espaço de Hilbert relevante.

6 Aplicação à cadeia de Fibonacci

Aplicaremos agora o GRDF para uma cadeia de Fibonacci. Começaremos com pequenos tamanhos naturais da cadeia de Fibonacci, que permitem uma comparação com os resultados exatos. Posteriormente, será aplicado o algoritmo para maiores comprimentos de cadeia, acompanhando, ao longo das varreduras da rede, o comportamento da razão entre os gaps locais dos blocos mais fortemente acoplados e os gaps dos blocos vizinhos. Também será acompanhado o valor do ângulo efetivo associado a cada acoplamento produzido pela renormalização, de modo a construir um diagrama de fluxo desse ângulo, estabelecendo comparações com o que se observa no caso de acoplamentos aleatórios [2, 14].

6.1 Construção da cadeia

Para construir a cadeia, utilizamos a sequência de letras obtida ao realizar a iteração (ou inflação) da regra

$$\begin{cases} a \rightarrow ab, \\ b \rightarrow a. \end{cases}$$

Esse processo gera a sequência $abaabababa\dots$, e cada letra será associada a um tipo de ligação, que vamos denotar por K_a (representando acoplamentos $K_{a,1}$ e $K_{a,2}$) ou K_b (representando acoplamentos $K_{b,1}$ e $K_{b,2}$). A figura 23 demonstra o sistema físico que será investigado neste capítulo. É importante ressaltar que essa sequência não possui um período característico.

Vamos trabalhar aqui com a parametrização das equações 2.16, ou seja,

$$K_{a,1} = \frac{4\pi}{3}R_a \cos \theta - \frac{2\pi}{3}R_a \sin \theta, \quad (6.1)$$

$$K_{a,2} = \frac{8\pi}{15}R_a \sin \theta \quad (6.2)$$



Figura 23 – Cadeia de spins utilizando a sequência $abaabababa\dots$. As ligações tracejadas representam ligações K_a (acoplamentos $K_{a,1}$ e $K_{a,2}$) e as contínuas, ligações K_b (acoplamentos $K_{b,1}$ e $K_{b,2}$).

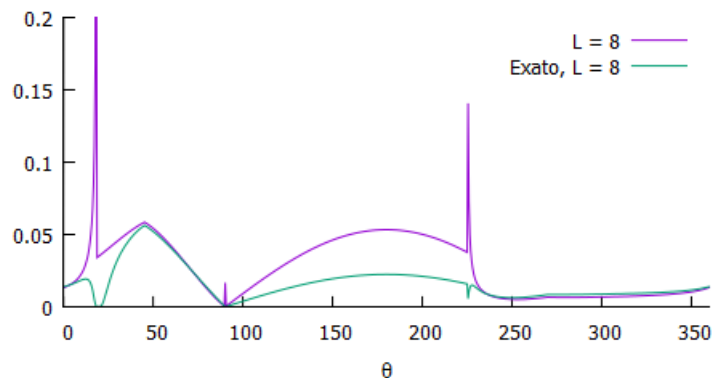


Figura 24 – Comparação entre os gaps exatos e as estimativas do GRDF para um cadeia de Fibonacci contendo 8 spins.

e

$$K_{b,1} = \frac{4\pi}{3}R_b \cos \theta - \frac{2\pi}{3}R_b \sin \theta, \quad (6.3)$$

$$K_{b,2} = \frac{8\pi}{15}R_b \sin \theta. \quad (6.4)$$

6.2 Cadeia com 8 sítios

Começaremos com 7 ligações da cadeia de Fibonacci, somando um total de 8 sítios com spin $S = 1$. (O número de sítios utilizados será sempre um número de Fibonacci.) Neste caso ainda é possível realizar a diagonalização do hamiltoniano de maneira numericamente exata, visto que o hamiltoniano é representado por uma matriz de dimensão 6561×6561 .

Para uma escolha de acoplamentos tal que $R_a = \frac{1}{10}R_b$, a figura 24 mostra, como função do ângulo $\theta_i \equiv \theta$, a comparação do gap (entre a energia do estado fundamental e primeiro nível de energia excitado) obtido para cadeia inteira por diagonalização exata, Δ , com aquele estimado a partir do GRDF, Δ' . Embora ainda não seja um desafio computacional realizar o cálculo exato neste caso, nota-se um ganho considerável em tempo computacional: o SDRG mostrou-se até 40 vezes mais rápido. Na figura 24 também se nota o pico referente ao erro da estimativa no ponto $\theta = \arctan(1/3)$ onde há mudanças do estado fundamental do bloco de dois spins entre os valores $\tilde{S} = 0$, $\tilde{S} = 1$ e $\tilde{S} = 2$.

Dispondo dos resultados exatos, podemos fazer uma análise do erro na estimativa como função da razão R_a/R_b entre os acoplamentos, lembrando que o tratamento perturbativo do capítulo 3 pressupõe que essa razão não seja próxima de 1. A figura 25 mostra

a discrepância entre a estimativa e o valor exato do gap, como função da razão R_a/R_b , utilizando diferentes ângulos iniciais. Essa discrepância é medida por $\delta_e = |\Delta' - \Delta|/\Delta$. Como esperado, o erro é consideravelmente maior quando a razão se aproxima de 1, o que será determinante para julgarmos a confiabilidade das previsões do GRDF para cadeias maiores.

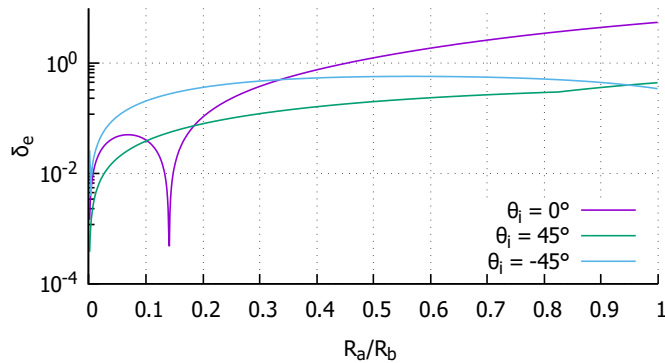


Figura 25 – Módulo da diferença entre a estimativa e o valor exato do gap, como função da razão R_a/R_b . O comportamento peculiar da curva para $\theta = 0$ em torno de $R_a/R_b = 0.14$ decorre de um cruzamento entre as curvas individuais de Δ e de Δ' (não mostradas).

6.3 Aplicação para cadeias de grande comprimento

A renormalização completa de cadeias muito longas envolve diversas varreduras da rede, ao longo das quais acompanhamos os valores dos acoplamentos efetivos, dos gaps locais Δ_b e dos ângulos efetivos θ_b associados aos blocos fortemente acoplados e, por fim, dos gaps Δ_a associados aos blocos vizinhos àqueles fortemente acoplados. Nesta seção, fixaremos o número de sítios em $L = 196418$, um número de Fibonacci, e a razão inicial R_a/R_b em $\frac{1}{10}$.

6.3.1 Pontos fixos da renormalização

Acompanhando os fluxos das diversas grandezas ao longo da renormalização, perceberemos a existência de pontos fixos análogos àqueles observados na presença de acoplamentos aleatórios [2, 14], e indicados na figura 26. Por sua vez, na figura 27 são mostrados os

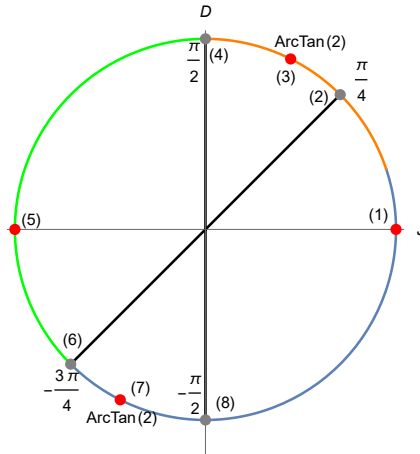


Figura 26 – Diagrama indicando os pontos fixos do GRDF para a cadeia de Fibonacci. Os pontos estáveis estão indicados em vermelho, sendo sua região atratora delimitada pelos pontos instáveis, em cinza. As linhas pretas delimitam as bacias de atração dos pontos fixos estáveis. As cores representam os estados fundamentais de um par de spins assim como a figura 4.

fluxos de θ_b e da razão Δ_a/Δ_b , que se aproxima de 1 quando o tratamento perturbativo não é mais confiável.

Cadeias com ângulos iniciais $-\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{\pi}{4}$ são levados, pela renormalização, ao ponto fixo caracterizado por $\theta = 0$, conforme ilustrado para $\theta = 30^\circ$ na figura 27. Ao contrário do que ocorre na presença de acoplamentos aleatórios, em que esse ponto fixo está associado a uma fase de singletos aleatórios, agora se trata de uma fase de Haldane com um gap que diminui quando a razão R_a/R_b se aproxima de zero, conforme discutido em [38] para a cadeia de Heisenberg com acoplamentos de Fibonacci. A conclusão de que se trata de uma fase de Haldane é decorrência do comportamento mostrado para a razão Δ_a/Δ_b , com $\theta = 30^\circ$, na figura 27: à medida que a renormalização prossegue, essa razão se aproxima de 1. Embora isso indique que as previsões quantitativas assintóticas do GRDF não são confiáveis, o fluxo do ângulo θ_b para zero ocorre enquanto a razão Δ_a/Δ_b ainda está relativamente distante de 1, o que se assegura a confiabilidade da conclusão qualitativa de que o sistema se aproxima, em baixas energias, de uma cadeia uniforme.

Cadeias com ângulos iniciais $\frac{\pi}{4} \leq \theta < \frac{\pi}{2}$ são levados, pela renormalização, a uma espécie de ciclo dois caracterizado por ângulos θ_a e θ_b que se alternam entre $\theta = \arctan 2$ e $\theta = \arctan 2 + \pi$, sendo $\arctan(2)$ um ângulo do primeiro quadrante, conforme ilustrado para $\theta = 75^\circ$ na figura 27. Esse é um caso sobre o qual é difícil extrair previsões confiáveis a partir do GRDF, uma vez que, como também mostrado, na figura, a razão Δ_a/Δ_b oscila entre valores mais próximos e mais afastados de 1. Poderíamos especular que essa seria

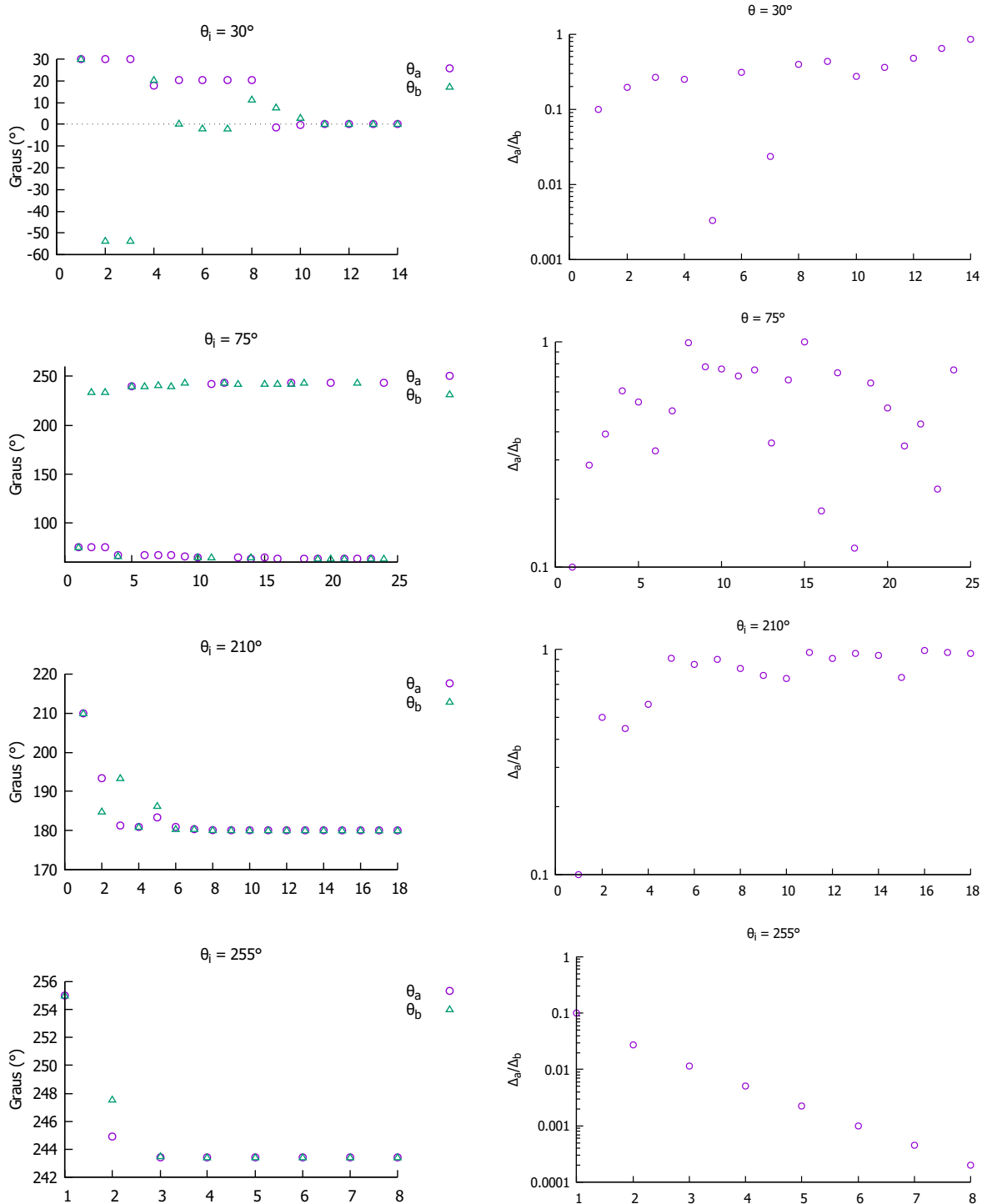


Figura 27 – Comportamento dos ângulos efetivos (esquerda) e das razões Δ_a/Δ_b entre os gaps (direita), em função do número de varreduras da rede, cada varredura envolvendo a renormalização de blocos fortemente acoplados oriundos da varredura anterior.

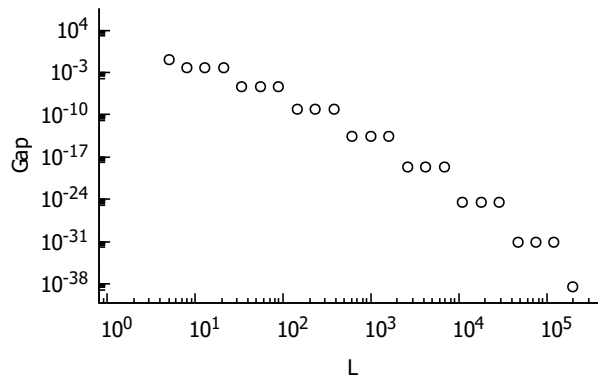


Figura 28 – Dependência do gap efetivo da cadeia de Fibonacci, como previsto pelo GRDF, com o tamanho L da cadeia, tomando um ângulo inicial $\theta = \pi + \arctan(2)$.

uma indicação de que o comportamento assintótico reproduz aquele do limite uniforme, mas, nesse limite, os ângulos $\theta = \arctan 2$ e $\theta = \arctan 2 + \pi$ levam a estados fundamentais dramaticamente distintos, como indicado na figura 1. Esclarecer o comportamento da cadeia de Fibonacci nesse caso é tarefa para outros métodos, como, por exemplo, o grupo de renormalização da matriz densidade [45].

Cadeias com ângulos iniciais $\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{5\pi}{4}$ são levados, pela renormalização, ao ponto fixo do modelo de Heisenberg ferromagnético, caracterizado por $\theta = \pi$, conforme ilustrado para $\theta = 210^\circ$ na figura 27. Mais uma vez, a razão Δ_a/Δ_b se aproxima de 1 ao longo da renormalização, sugerindo que, em baixas energias, o sistema se aproxima, em baixas energias, de uma cadeia uniforme.

Por fim, cadeias com ângulos iniciais $\frac{-3\pi}{4} < \theta \leq \frac{-\pi}{2}$ são levados, pela renormalização, ao ponto fixo $\theta = \arctan 2 + \pi$, conforme ilustrado para $\theta = 255^\circ$ na figura 27. Desta vez, a razão Δ_a/Δ_b diminui rapidamente ao longo da renormalização, sugerindo que, em baixas energias, o sistema tende a uma fase de singletos aperiódicos, como no caso da cadeia de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$ com acoplamentos de Fibonacci [31, 32]. De fato, a figura 28 mostra, para o ângulo de ponto fixo $\theta = \arctan(2) + \pi$, o comportamento do gap efetivo da cadeia, como previsto pelo GRDF, em função do tamanho da cadeia. Esse comportamento é compatível com a forma fracamente exponencial de decaimento prevista para a cadeia de spin $\frac{1}{2}$ [31, 32]. Complementado o paralelo com a cadeia de spin $\frac{1}{2}$, também determinar uma expressão do valor do gap em função do comprimento L da cadeia. Utilizando a mesma expressão proposta em [32] para o gap

$$\Delta_j \sim r_j^{-\zeta} e^{-\mu \ln^2 r_j / r_0} \quad (6.5)$$

onde, neste caso ζ , μ e r_0 são parâmetros de ajuste. A curva ajustada está na figura 29

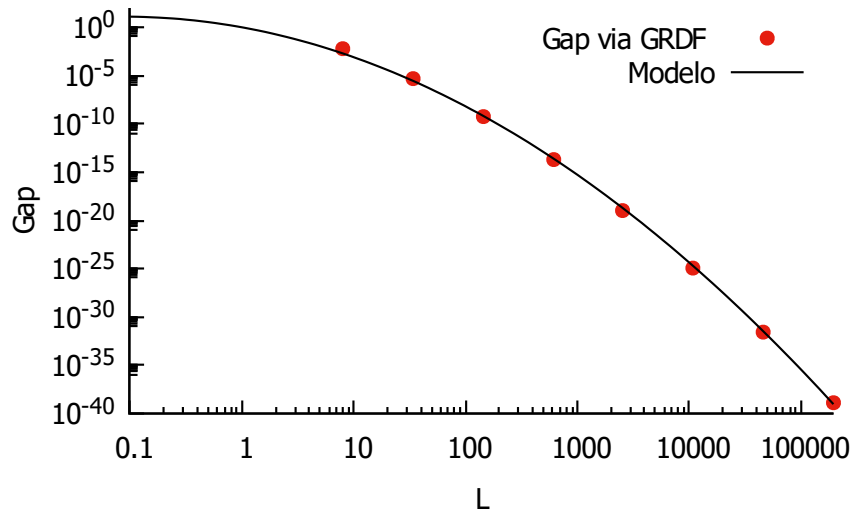


Figura 29 – Ajuste do gap para o ponto fixo $\theta = 255^\circ$ onde os parâmetros são $\zeta = 2,09612$, $\mu = 0,432931$ e $r_0 = 1,000004$.

Pontos fixos instáveis

Há quatro pontos fixos instáveis no diagrama da figura 26, rotulados como (2), (4), (6) e (8). Os pontos (4) e (6) não podem ser diretamente estudados pelo algoritmo, pelo fato de que correspondem a pontos de degenerescência dos estados com diferentes \tilde{S} . Os outros dois pontos, (2) e (8), podem em princípio ser investigados.

O comportamento no ponto (2) é peculiar, pelo fato de que, ocasionalmente, ocorrem renormalizações que produzem ângulos efetivos $\theta_a = -\frac{\pi}{2}$ associados a acoplamentos fracos, que são depois novamente renormalizados para $\theta_a = \frac{\pi}{4}$. No entanto, a razão Δ_a/Δ_b exibe comportamento semelhante ao observado na figura 27 para $\theta = 75^\circ$, de modo que é incerto extrair previsões quantitativas a partir do GRDF.

Finalmente, no ponto (8) a razão Δ_a/Δ_b diminui rapidamente ao longo da renormalização, sugerindo que, em baixas energias, o sistema tende a uma fase de singletos aperiódicos.

Comparação com o caso uniforme

É interessante a comparação entre as figuras 4 e 1 para verificar as consequências da aperiodicidade. A diferença encontrada está na região entre $\frac{-\pi}{2}$ e $\frac{-\pi}{4}$, esta região da cadeia de Fibonacci no limite termodinâmico passa a ter o comportamento ditado pelo

caso uniforme com $D = 0$, sendo diferente do estado dímero. Para a região $\pi/4 \leq \theta < \pi/2$, é impossível determinar o estado fundamental utilizando o método aqui implementado.

Comparação com o caso aleatório

Os pontos fixos, tanto instáveis quanto estáveis, são os mesmos, uma vez que decorrem essencialmente dos autoestados de um par de spins fortemente acoplados. As diversas fases observadas, no entanto, exibem diferentes características no caso aperiódico de Fibonacci. A fase de Haldane situada em torno do ângulo $\theta = 0$ não é destruída mesmo para modulação intensa, ao contrário do que ocorre no caso aleatório. Além disso, a emergência da simetria $SU(3)$ somente se verifica na faixa de ângulos $-\pi/4 < \theta < -3\pi/4$, ao menos segundo as previsões do nosso tratamento perturbativo.

7 Conclusão

Nesta dissertação, apresentamos um algoritmo computacional para a implementação numérica do grupo de renormalização para desordem forte (GRDF) na cadeia de spin 1 com simetria $SU(2)$. Com o uso da representação adequada, ou seja, utilizando os tensores esféricos irredutíveis, apropriados para tratar sistemas com simetria $SU(2)$, foi possível deduzir equações de renormalização mais simples, permitindo uma implementação mais eficiente do procedimento de GRDF.

Os resultados deduzidos no apêndice A foram integrados a um algoritmo que automatizou todo o procedimento, reproduzindo resultados já conhecidos na literatura e permitindo a busca de novos comportamentos até há pouco inexplorados.

As limitações encontradas foram, no geral, computacionais, devido à necessidade de diagonalizar hamiltonianos demasiadamente grandes, requerendo maior memória e capacidade de processamento. Entretanto, há espaço para uma implementação que explore simetrias e propriedades de matrizes hermitianas para amenizar esse problema. Também se poderia tentar sofisticar os métodos de varredura da lista que codifica a cadeia no algoritmo, porém, como não há um padrão, em virtude da aperiodicidade, este é um tópico complexo do ponto de vista de implementação computacional.

O algoritmo foi aplicado para a determinação do diagrama de fases da cadeia de spin 1 com acoplamentos distribuídos de acordo com a sequência de Fibonacci, para diversas escolhas do ângulo θ associado à razão entre os termos biquadrático e bilinear do hamiltoniano. O diagrama consiste de uma fase de Haldane, para $-\pi/2 < \theta < \pi/4$, uma fase ferromagnética para $\pi/2 < \theta < 5\pi/4$ e uma fase de singletos aperiódicos para $-3\pi/4 < \theta < -\pi/2$. Há ainda uma fase, localizada entre $\theta = \pi/4$ e $\theta = \pi/2$, cuja natureza não parece acessível por meio do GRDF.

Há a suspeita da emergência de uma simetria $SU(3)$ na fase de singletos aperiódicos, em analogia ao que se observa na fase de singletos aleatórios induzida por desordem aleatória [2, 14]. Explorar essa possibilidade é uma tarefa para futuras investigações. Uma outra perspectiva é explorar o diagrama de fases da sequência aperiódica 63, que, no caso da cadeia de Heisenberg de spin 1, desestabiliza a fase de Haldane e induz uma fase de singletos aperiódicos na presença de aperiodicidade forte.

Todo os códigos computacionais desenvolvidos estão documentados e disponibilizados ao público, incluindo alguns exemplos simples e oferecendo um ponto de partida para estudos em grupo de renormalização para desordem forte, tanto para cadeias de spin semi-inteiro quanto para cadeias de spin inteiro.

Referências¹

- 1 YANG, K.; BHATT, R. N. Generation of large moments in a spin-1 chain with random antiferromagnetic couplings. *Phys. Rev. Lett.*, v. 80, p. 4562, 1998. Citado 6 vezes nas páginas 5, 10, 11, 12, 14 e 16.
- 2 QUITO, V. L. *Estudos de Sistemas Quânticos Fortemente Desordenados*. Tese (Doutorado) — Instituto de Física Gleb Wataghin Universidade Estadual de Campinas, 2016. Citado 8 vezes nas páginas 5, 12, 14, 16, 32, 36, 38 e 44.
- 3 MA, S.-K.; DASGUPTA, C.; HU, C.-K. Random antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. Lett.*, v. 43, p. 1434, 1979. Citado na página 10.
- 4 DASGUPTA, C.; MA, S.-K. Low-temperature properties of the random Heisenberg antiferromagnetic chain. *Phys. Rev. B*, v. 22, p. 1305, 1980. Citado na página 10.
- 5 FISHER, D. S. Random transverse field Ising spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, v. 69, p. 534, 1992. Citado na página 10.
- 6 FISHER, D. S. Random antiferromagnetic quantum spin chains. *Phys. Rev. B*, v. 50, p. 3799, 1994. Citado na página 10.
- 7 FISHER, D. S. Critical behavior of random transverse-field Ising spin chains. *Phys. Rev. B*, v. 51, p. 6411, 1995. Citado na página 10.
- 8 HOYOS, J. A. et al. Correlation amplitude and entanglement entropy in random spin chains. *Phys. Rev. B*, v. 76, p. 174425, 2007. Citado na página 10.
- 9 IGLÓI, F. Exact renormalization of the random transverse-field Ising spin chain in the strongly ordered and strongly disordered griffiths phases. *Phys. Rev. B*, v. 65, p. 064416, 2002. Citado na página 10.
- 10 HOYOS, J. A. et al. Protecting clean critical points by local disorder correlations. *Europhys. Lett.*, v. 93, p. 30004, 2011. Citado na página 10.
- 11 MONTHUS, C.; GOLINELLI, O.; JOLICÉUR, T. Percolation transition in the random antiferromagnetic spin-1 chain. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, p. 3254, 1997. Citado na página 10.
- 12 MONTHUS, C.; GOLINELLI, O.; JOLICÉUR, T. Phases of random antiferromagnetic spin-1 chains. *Phys. Rev. B*, v. 58, p. 805, 1998. Citado na página 10.
- 13 SAGUIA, A.; BOECHAT, B.; CONTINENTINO, M. A. Phase diagram of the random Heisenberg antiferromagnetic spin-1 chain. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, p. 117202, 2002. Citado na página 10.
- 14 QUITO, V. L.; HOYOS, J. A.; MIRANDA, E. Emergent SU(3) symmetry in random spin-1 chains. *Phys. Rev. Lett.*, v. 115, p. 167201, 2015. Citado 6 vezes nas páginas 10, 12, 16, 36, 38 e 44.

¹ De acordo com a Associação Brasileira de Normas Técnicas. NBR 6023.

- 15 WESTERBERG, E. et al. Random quantum spin chains: A real-space renormalization group study. *Phys. Rev. Lett.*, v. 75, p. 4302, 1995. Citado na página 11.
- 16 WESTERBERG, E. et al. Low-energy fixed points of random quantum spin chains. *Phys. Rev. B*, v. 55, p. 12578, 1997. Citado na página 11.
- 17 MOTRUNICH, O. et al. Infinite-randomness quantum ising critical fixed points. *Phys. Rev. B*, v. 61, p. 1160, 2000. Citado na página 11.
- 18 REFAEL, G.; KEHREIN, S.; FISHER, D. S. Spin reduction transition in spin- $\frac{3}{2}$ random Heisenberg chains. *Phys. Rev. B*, v. 66, p. 060402(R), 2002. Citado na página 11.
- 19 HOOYBERGHS, J.; IGLÓI, F.; VANDERZANDE, C. Strong disorder fixed point in absorbing-state phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 100601, 2003. Citado na página 11.
- 20 IGLÓI, F.; MONTHUS, C. Strong disorder rg approach of random systems. *Physics Reports*, v. 412, p. 277, 2005. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157305001092>. Citado na página 11.
- 21 HOYOS, J. A. Weakly disordered absorbing-state phase transitions. *Phys. Rev. E*, v. 78, p. 032101, 2008. Citado na página 11.
- 22 HOYOS, J. A.; VOJTA, T. Theory of smeared quantum phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, v. 100, p. 240601, 2008. Citado na página 11.
- 23 HOYOS, J. A.; VOJTA, T. Dissipation effects in random transverse-field Ising chains. *Phys. Rev. B*, v. 85, p. 174403, 2012. Citado na página 11.
- 24 REFAEL, G.; ALTMAN, E. Strong disorder renormalization group primer and the superfluid–insulator transition. *Comptes Rendus Physique*, v. 14, n. 8, p. 725, 2013. Citado na página 11.
- 25 IGLÓI, F.; MONTHUS, C. Strong disorder rg approach – a short review of recent developments. *Eur. Phys. J. B*, v. 91, p. 290, 2018. Citado na página 11.
- 26 PEKKER, D. et al. Hilbert-glass transition: New universality of temperature-tuned many-body dynamical quantum criticality. *Phys. Rev. X*, v. 4, p. 011052, 2014. Citado na página 11.
- 27 VOSK, R.; ALTMAN, E. Dynamical quantum phase transitions in random spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, v. 112, p. 217204, 2014. Citado na página 11.
- 28 MONTHUS, C. Many-body localization: construction of the emergent local conserved operators via block real-space renormalization. *J. Stat. Mech.*, v. 2016, p. 033101, 2016. Citado na página 11.
- 29 MONTHUS, C. Periodically driven random quantum spin chains: real-space renormalization for floquet localized phases. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2017, p. 073301, 2017. Citado na página 11.
- 30 PINHO, S. T. R.; Lobão, T. C. P. Rigorous results for aperiodic or almost periodic substitution sequences. *Braz. J. Phys.*, v. 30, p. 772, 2000. Citado na página 11.

- 31 VIEIRA, A. P. Low-energy properties of aperiodic quantum spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 077201, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 41.
- 32 VIEIRA, A. P. Aperiodic quantum XXZ chains: Renormalization-group results. *Phys. Rev. B*, v. 71, p. 134408, 2005. Citado 3 vezes nas páginas 11, 33 e 41.
- 33 IGLÓI, F.; JUHÁSZ, R.; ZIMBORÁS, Z. Entanglement entropy of aperiodic quantum spins chains. *Europhys. Lett.*, v. 79, p. 37001, 2007. Citado na página 11.
- 34 JUHÁSZ, R.; ZIMBORÁS, Z. Entanglement entropy of aperiodic singlet phases. *J. Stat. Mech.*, v. 2007, p. P04004, 2007. Citado na página 11.
- 35 VIEIRA, A. P.; HOYOS, J. A. Emergent dimerization and localization in disordered quantum chains. *Phys. Rev. B*, v. 98, p. 104203, 2018. Citado na página 11.
- 36 AGRAWAL, U.; GOPALAKRISHNAN, S.; VASSEUR, R. Universality and quantum criticality in quasiperiodic spin chains. *Nat. Commun.*, v. 11, p. 2225, 2020. Citado na página 11.
- 37 Oliveira Filho, F. J.; FARIA, M. S.; VIEIRA, A. P. Strong-disorder renormalization group study of aperiodic quantum Ising chains. *J. Stat. Mech.*, v. 2012, p. P03007, 2012. Citado na página 11.
- 38 GRANDE, H. L. C. et al. Analytical and numerical studies of disordered spin-1 Heisenberg chains with aperiodic couplings. *Phys. Rev. B*, v. 89, p. 134408, 2014. Citado 4 vezes nas páginas 11, 13, 33 e 39.
- 39 BARGHATHI, H.; NOZADZE, D.; VOJTA, T. Contact process on generalized Fibonacci chains: Infinite-modulation criticality and double-log periodic oscillations. *Phys. Rev. E*, v. 89, p. 012112, 2014. Citado na página 11.
- 40 MANMANA, S. R. et al. Phase diagram and continuous pair-unbinding transition of the bilinear-biquadratic $S = 1$ Heisenberg chain in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, v. 83, p. 184433, 2011. Citado na página 12.
- 41 HALDANE, F. D. M. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets: Semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state. *Phys. Rev. Lett.*, v. 50, p. 1153, 1983. Citado na página 12.
- 42 LÄUCHLI, A.; SCHMID, G.; TREBST, S. Spin nematics correlations in bilinear-biquadratic $S = 1$ spin chains. *Phys. Rev. B*, v. 74, p. 144426, 2006. Citado na página 12.
- 43 QUITO, V. L.; HOYOS, J. A.; MIRANDA, E. Random $su(2)$ -symmetric spin- S chains. *Phys. Rev. B*, v. 94, p. 064405, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 16.
- 44 EDMONDS, A. R. *Angular momentum in quantum mechanics*. 1. ed. [S.l.]: Princeton University Press, 1957. Citado na página 15.
- 45 WHITE, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, v. 69, p. 2863, 1992. Citado na página 41.

Apêndice A – Hamiltoniano efetivo

Neste apêndice será demonstrado como calcular o hamiltoniano efetivo local associado a um bloco de spins com gap de energia muito maior que os gaps de seus vizinhos.

Consideramos que um par de spins vizinhos interaja pelo hamiltoniano já apresentado anteriormente,

$$H_{i,i+1} = \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{i,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_i) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{i+1}). \quad (\text{A.1})$$

Bloco fortemente interagente contendo 2 spins

Explicitaremos inicialmente como realizar o cálculo quando o bloco fortemente acoplado consiste de dois sítios e, na próxima seção, indicamos a extensão para um bloco de n sítios. Desta forma, o hamiltoniano local relevante para a discussão é

$$H = H_{1,2} + H_{2,3} + H_{3,4}, \quad (\text{A.2})$$

em que os termos $H_{1,2}$ e $H_{3,4}$ serão tratados como uma perturbação a $H_{2,3}$. Vamos denotar por $|S_2, S_3; J, M\rangle$ os autoestados de $H_{2,3}$ caracterizados pelos números quânticos $J = |S_2 - S_3|, \dots, S_2 + S_3$ e $M = -J, \dots, J$. As energias desses estados, E_J , independem de M .

Teoria de perturbação de primeira ordem

Quando o estado fundamental do bloco fortemente acoplado é caracterizado pelo número quântico $J = \tilde{S}$, com $\tilde{S} \neq 0$ e degenerescência $2\tilde{S} + 1$, o setor de baixas energias do hamiltoniano local H pode ser descrito com o auxílio de um spin efetivo $\tilde{\mathbf{S}}$ que se liga aos spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_4 , vizinhos ao bloco. Isso dá origem a um hamiltoniano efetivo

$$H' = H'_{1,2} + H'_{3,4}, \quad (\text{A.3})$$

com $H'_{1,2}$ e $H'_{3,4}$ obtidos de $H_{1,2}$ e $H_{3,4}$ via teoria de perturbação de primeira ordem, projetando \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 sobre o multipletto fundamental de $H_{2,3}$.

Explicitamente, para $H'_{1,2}$ temos

$$H'_{1,2} = \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} \quad (\text{A.4})$$

sendo $P_{\tilde{S}}$ o projetor

$$P_{\tilde{S}} = \sum_{M=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M \right\rangle \left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M \right|. \quad (\text{A.5})$$

O termo $P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}}$ pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} &= \sum_{M'=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \sum_{M''=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M' \right\rangle \left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M'' \right| \\ &\quad \times \left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\tilde{\mathbf{S}}) \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M'' \right\rangle \\ &\quad \times \frac{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M'' \right\rangle}{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\tilde{\mathbf{S}}) \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M'' \right\rangle}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

O teorema de Wigner–Eckart garante que os elementos de matriz na razão à direita na última equação independem de M , de M' e de M'' . Introduzindo elementos de matriz reduzidos, podemos escrever a razão como

$$\frac{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M'' \right\rangle}{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\tilde{\mathbf{S}}) \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M'' \right\rangle} = \frac{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S} \parallel Y_J(\mathbf{S}_2) \parallel S_2, S_3; \tilde{S} \right\rangle}{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S_2, S_3; \tilde{S} \right\rangle}, \quad (\text{A.7})$$

de modo que

$$P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} = \frac{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S} \parallel Y_J(\mathbf{S}_2) \parallel S_2, S_3; \tilde{S} \right\rangle}{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S_2, S_3; \tilde{S} \right\rangle} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{aligned} &\times \sum_{M'=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \sum_{M''=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M' \right\rangle \left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M'' \right| \\ &\times \left\langle S_2, S_3; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\tilde{\mathbf{S}}) \left| S_2, S_3; \tilde{S}, M'' \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Sendo assim, e desde que nos restrinjamos ao subespaço associado ao multipletto fundamental de $H_{2,3}$, podemos retornar ao $H'_{1,2}$ e reescrevê-lo na forma

$$H'_{1,2} = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \tilde{\mathbf{S}}), \quad (\text{A.10})$$

com

$$K'_{1,J} = \frac{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S} \parallel Y_J(\mathbf{S}_2) \parallel S_2, S_3; \tilde{S} \right\rangle}{\left\langle S_2, S_3; \tilde{S} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S_2, S_3; \tilde{S} \right\rangle} K_{1,J} \quad (\text{A.11})$$

Analogamente, obtemos

$$H'_{3,4} = \sum_{J=1}^2 K'_{3,J} O_J(\tilde{\mathbf{S}}, \mathbf{S}_4),$$

com

$$K'_{3,J} = \frac{\langle S_2, S_3; \tilde{S} \parallel Y_J(\mathbf{S}_3) \parallel S_2, S_3; \tilde{S} \rangle}{\langle S_2, S_3; \tilde{S} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S_2, S_3; \tilde{S} \rangle} K_{3,J}. \quad (\text{A.12})$$

Note que, sendo a razão entre os elementos de matriz reduzidos independente de M , de M' e de M'' , podemos calculá-la a partir do lado esquerdo da equação A.7 utilizando qualquer escolha conveniente para M , M' e M'' .

Teoria de perturbação de segunda ordem

Quando o estado fundamental de $H_{2,3}$ é um singleto, que vamos denotar por $|S_2, S_3; 0, 0\rangle$, a correção perturbativa de primeira ordem é nula, sugerindo que o par de spins \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 torna-se magneticamente inerte em baixas energias. Nesse caso, um tratamento perturbativo de segunda ordem leva a um hamiltoniano efetivo $H' = H'_{1,4}$ que conecta os spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_4 por meio de excitações virtuais do par \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_3 , sendo escrito como

$$H'_{1,4} = P_0(H_{1,2} + H_{3,4})P \frac{1}{E_0 - H_{2,3}} P(H_{1,2} + H_{3,4})P_0, \quad (\text{A.13})$$

em que os projetores P_0 e $P = 1 - P_0$ são

$$P_0 = |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; 0, 0| \quad (\text{A.14})$$

e

$$P = \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J |S_2, S_3; J, M\rangle \langle S_2, S_3; J, M|, \quad (\text{A.15})$$

sendo $|S_2, S_3; J, M\rangle$ os estados excitados de $H_{2,3}$. Abaixo, utilizaremos repetidamente que

$$\begin{aligned} \langle S_2, S_3; 0, 0 | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) | S_2, S_3; J', M' \rangle &\propto \delta_{J,J'} \delta_{M,M'} \gamma_2(S, J), \\ \langle S_2, S_3; 0, 0 | Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) | S_2, S_3; J', M' \rangle &\propto \delta_{J,J'} \delta_{M,M'} \gamma_2(S, J), \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

em que a função $\gamma_2(S, J)$ não depende de M .

Devemos calcular termo a termo as contribuições para $H'_{1,4}$. Para a primeira contribuição, obtemos

$$\begin{aligned}
P_0 H_{1,2} P &= |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; 0, 0| \times \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) \\
&\quad \times \sum_{J'=1}^2 \sum_{M'=-J'}^J |S_2, S_3; J', M'\rangle \langle S_2, S_3; J', M'| \\
&= \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J \sum_{J'=1}^2 \sum_{M'=-J'}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; J', M'| \\
&\quad \times \langle S_2, S_3; 0, 0| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; J', M'\rangle
\end{aligned} \tag{A.17}$$

Utilizando A.16, a expressão acima pode ser expressa como

$$\begin{aligned}
P_0 H_{1,2} P &= \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; J, M| \\
&\quad \times \langle S_2, S_3; 0, 0| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; J, M\rangle.
\end{aligned} \tag{A.18}$$

Analogamente, também utilizando a A.16, temos

$$\begin{aligned}
P_0 H_{3,4} P &= \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{3,J} (-1)^M Y_{J,-M}(\mathbf{S}_4) |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; J, M| \\
&\quad \times \langle S_2, S_3; 0, 0| Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) |S_2, S_3; J, M\rangle,
\end{aligned} \tag{A.19}$$

$$\begin{aligned}
P H_{1,2} P_0 &= \sum_{J'=1}^2 \sum_{M'=-J'}^J K_{1,J'} (-1)^{M'} Y_{J',M'}(\mathbf{S}_1) |S_2, S_3; J', M'\rangle \langle S_2, S_3; 0, 0| \\
&\quad \times \langle S_2, S_3; J', M'| Y_{J',-M'}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; 0, 0\rangle,
\end{aligned} \tag{A.20}$$

$$\begin{aligned}
P H_{3,4} P_0 &= \sum_{J'=1}^2 \sum_{M'=-J'}^J K_{3,J'} (-1)^{M'} Y_{J',-M'}(\mathbf{S}_4) |S_2, S_3; J', M'\rangle \langle S_2, S_3; 0, 0| \\
&\quad \times \langle S_2, S_3; J', M'| Y_{J',M'}(\mathbf{S}_3) |S_2, S_3; 0, 0\rangle.
\end{aligned} \tag{A.21}$$

Combinando as contribuições anteriores, lembrando que

$$\langle S_2, S_3; J, M | S_2, S_3; J', M' \rangle = \delta_{J,J'} \delta_{M,M'}, \tag{A.22}$$

e novamente utilizando a A.16, chegamos a

$$\begin{aligned}
P_0 H_{1,2} P \frac{1}{E_0 - H_{2,3}} P H_{1,2} P_0 &= \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J}^2 Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; 0, 0| \\
&\quad \times \frac{\langle S_2, S_3; 0, 0| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; J, M\rangle \langle S_2, S_3; J, M| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; 0, 0\rangle}{E_0 - E_J},
\end{aligned} \tag{A.23}$$

$$\begin{aligned}
P_0 H_{3,4} P \frac{1}{E_0 - H_{2,3}} P H_{3,4} P_0 &= \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{3,J}^2 Y_{J,-M}(\mathbf{S}_4) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_4) |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; 0, 0| \\
&\times \frac{\langle S_2, S_3; 0, 0 | Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) |S_2, S_3; J, M\rangle \langle S_2, S_3; J, M | Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) |S_2, S_3; 0, 0\rangle}{E_0 - E_J},
\end{aligned} \tag{A.24}$$

$$\begin{aligned}
P_0 H_{1,2} P \frac{1}{E_0 - H_{2,3}} P H_{3,4} P_0 &= \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} K_{3,J} Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_4) \\
&\times |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; 0, 0| \\
&\times \frac{\langle S_2, S_3; 0, 0 | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; J, M\rangle \langle S_2, S_3; J, M | Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) |S_2, S_3; 0, 0\rangle}{E_0 - E_J},
\end{aligned} \tag{A.25}$$

$$\begin{aligned}
P_0 H_{3,4} P \frac{1}{E_0 - H_{2,3}} P H_{1,2} P_0 &= \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} K_{3,J} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_4) Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) \\
&\times |S_2, S_3; 0, 0\rangle \langle S_2, S_3; 0, 0| \\
&\times \frac{\langle S_2, S_3; 0, 0 | Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) |S_2, S_3; J, M\rangle \langle S_2, S_3; J, M | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; 0, 0\rangle}{E_0 - E_J}.
\end{aligned} \tag{A.26}$$

No caso de 2 spins, o estado fundamental é um singleto apenas se $S_2 = S_3 = S$, e as propriedades dos TEIs e o teorema de Wigner–Eckart permitem escrever

$$\begin{aligned}
(-1)^M g_2(S, J) &\equiv \langle S_2, S_3; 0, 0 | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; J, M\rangle \langle S_2, S_3; J, M | Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) |S_2, S_3; 0, 0\rangle \\
&= \langle S_2, S_3; 0, 0 | Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) |S_2, S_3; J, M\rangle \langle S_2, S_3; J, M | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S_2, S_3; 0, 0\rangle,
\end{aligned} \tag{A.27}$$

com $g_2(S, J)$ independente de M , de modo que, se nos restringimos ao subespaço associado ao singleto de $H_{2,3}$ e ignoramos os termos constantes A.23 e A.24, obtemos um hamiltoniano efetivo

$$H'_{1,4} = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} \sum_{M=-J}^J (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_4) = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_4), \tag{A.28}$$

com

$$K'_{1,J} = 2 \frac{g_2(S, J)}{E_0 - E_J} K_{1,J} K_{3,J}. \tag{A.29}$$

Extensão para um bloco fortemente acoplado contendo n spins

Quando o bloco fortemente acoplado contém n spins, que vamos denotar por $\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3, \dots, \mathbf{S}_{n+1}$, o hamiltoniano local é escrito como

$$H = H_{1,2} + H_{2,n+1} + H_{n+1,n}, \quad (\text{A.30})$$

e os autoestados de $H_{2,n+1}$ são escritos como $|S_2, S_3, \dots, S_{n+1}; J, M, \mathbf{q}\rangle$, sendo $J(J+1)$ um autovalor do operador $(\mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 + \dots + \mathbf{S}_{n+1})^2$, $M = -J, \dots, J$ um autovalor do operador $S_2^z + S_3^z + \dots + S_{n+1}^z$ e \mathbf{q} o conjunto de números quânticos necessários para caracterizar completamente os autoestados. (No caso $n = 2$, esse conjunto é vazio, mas, para $n > 2$, há diversos setores de autoestados caracterizados pelo mesmo valor de J , com distintas energias.) A introdução de \mathbf{q} é meramente formal, e não será necessário especificar os números quânticos associados. Devido à simetria $SU(2)$ do hamiltoniano, as energias $E_{J,\mathbf{q}}$ associadas aos autoestados $|S_2, S_3, \dots, S_{n+1}; J, M, \mathbf{q}\rangle$ não dependem de M .

A partir daqui, vamos nos restringir ao caso $S_2 = S_3 = \dots = S_{n+1} = S$, mais relevante para este trabalho, com a convenção $|S^n; J, M, \mathbf{q}\rangle \equiv |S_2, S_3, \dots, S_{n+1}; J, M, \mathbf{q}\rangle$.

Teoria de perturbação de primeira ordem

Quando o estado fundamental do bloco fortemente acoplado é caracterizado pelos números quânticos $J = \tilde{S}$ e $\mathbf{q} = \tilde{\mathbf{q}}$, com $\tilde{S} \neq 0$ e degenerescência $2\tilde{S} + 1$, o setor de baixas energias do hamiltoniano local H pode ser descrito com o auxílio de um spin efetivo $\tilde{\mathbf{S}}$ que se liga aos spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_{n+2} , vizinhos ao bloco. Isso dá origem a um hamiltoniano efetivo

$$H' = H'_{1,2} + H'_{n+1,n+2}, \quad (\text{A.31})$$

com $H'_{1,2}$ e $H'_{n+1,n+2}$ obtidos de $H_{1,2}$ e $H_{n+1,n+2}$ via teoria de perturbação de primeira ordem, projetando \mathbf{S}_2 e \mathbf{S}_{n+1} sobre o multipletto fundamental de $H_{2,n+1}$. Como \mathbf{q} é mantido fixo em $\tilde{\mathbf{q}}$, vamos omiti-lo no restante desta subseção, de modo a simplificar a notação.

Explicitamente, para $H'_{1,2}$ temos

$$H'_{1,2} = \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} \quad (\text{A.32})$$

sendo $P_{\tilde{S}}$ o projetor

$$P_{\tilde{S}} = \sum_{M=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \left| S^n; \tilde{S}, M \right\rangle \left\langle S^n; \tilde{S}, M \right|. \quad (\text{A.33})$$

O termo $P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}}$ pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} &= \sum_{M'=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \sum_{M''=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \left| S^n; \tilde{S}, M' \right\rangle \left\langle S^n; \tilde{S}, M'' \right| \\ &\quad \times \left\langle S^n; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\tilde{\mathbf{S}}) \left| S^n; \tilde{S}, M'' \right\rangle \\ &\quad \times \frac{\left\langle S^n; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) \left| S^n; \tilde{S}, M'' \right\rangle}{\left\langle S^n; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\tilde{\mathbf{S}}) \left| S^n; \tilde{S}, M'' \right\rangle}. \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

O teorema de Wigner–Eckart garante que os elementos de matriz na razão à direita na última equação independem de M , de M' e de M'' . Introduzindo elementos de matriz reduzidos, podemos escrever a razão como

$$\frac{\left\langle S^n; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) \left| S^n; \tilde{S}, M'' \right\rangle}{\left\langle S^n; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\tilde{\mathbf{S}}) \left| S^n; \tilde{S}, M'' \right\rangle} = \frac{\left\langle S^n; \tilde{S} \parallel Y_J(\mathbf{S}_2) \parallel S^n; \tilde{S} \right\rangle}{\left\langle S^n; \tilde{S} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S^n; \tilde{S} \right\rangle}, \quad (\text{A.35})$$

de modo que

$$P_{\tilde{S}} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) P_{\tilde{S}} = \frac{\left\langle S^n; \tilde{S} \parallel Y_J(\mathbf{S}_2) \parallel S^n; \tilde{S} \right\rangle}{\left\langle S^n; \tilde{S} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S^n; \tilde{S} \right\rangle} \quad (\text{A.36})$$

$$\begin{aligned} &\times \sum_{M'=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \sum_{M''=-\tilde{S}}^{\tilde{S}} \left| S^n; \tilde{S}, M' \right\rangle \left\langle S^n; \tilde{S}, M'' \right| \\ &\times \left\langle S^n; \tilde{S}, M' \right| Y_{J,-M}(\tilde{\mathbf{S}}) \left| S^n; \tilde{S}, M'' \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Sendo assim, e desde que nos restrinjamos ao subespaço associado ao multiplete fundamental de $H_{2,n+1}$, podemos retornar ao $H'_{1,2}$ e reescrevê-lo na forma

$$H'_{1,2} = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \tilde{\mathbf{S}}), \quad (\text{A.38})$$

com

$$K'_{1,J} = \frac{\left\langle S^n; \tilde{S} \parallel Y_J(\mathbf{S}_2) \parallel S^n; \tilde{S} \right\rangle}{\left\langle S^n; \tilde{S} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S^n; \tilde{S} \right\rangle} K_{1,J} \quad (\text{A.39})$$

Analogamente, obtemos

$$H'_{n+1,n+2} = \sum_{J=1}^2 K'_{n+1,J} O_J(\tilde{\mathbf{S}}, \mathbf{S}_{n+2}),$$

com

$$K'_{n+1,J} = \frac{\langle S^n; \tilde{S} \parallel Y_J(\mathbf{S}_{n+1}) \parallel S^n; \tilde{S} \rangle}{\langle S^n; \tilde{S} \parallel Y_J(\tilde{\mathbf{S}}) \parallel S^n; \tilde{S} \rangle} K_{n+1,J}. \quad (\text{A.40})$$

Note que, sendo a razão entre os elementos de matriz reduzidos independente de M , de M' e de M'' , podemos calculá-la a partir do lado esquerdo da equação A.35, utilizando qualquer escolha conveniente para M , M' e M'' . Embora haja expressões fechadas para os elementos de matriz reduzidos no caso $n = 2$, em termos dos símbolos $6j$ de Wigner, tais expressões não são válidas no caso $n > 2$, de modo que, genericamente, as razões devem ser calculadas pela diagonalização numérica do hamiltoniano de um bloco forte.

Teoria de perturbação de segunda ordem

Quando o estado fundamental de $H_{2,n+1}$ é um singlete, que vamos denotar por $|S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle$, o bloco pode ser eliminado, produzindo um hamiltoniano efetivo $H' = H'_{1,n+2}$ conectando os spins \mathbf{S}_1 e \mathbf{S}_{n+2} , vizinhos do bloco, determinado por um cálculo perturbativo de segunda ordem, ou seja,

$$H'_{1,n+2} = P_0(H_{1,2} + H_{n+1,n+2})P \frac{1}{E_{0,\mathbf{q}_0} - H_{2,n+1}} P(H_{1,2} + H_{n+1,n+2})P_0, \quad (\text{A.41})$$

com os projetores P_0 e $P = 1 - P_0$ dados por

$$P_0 = |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| \quad (\text{A.42})$$

e

$$P = \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J |S^n; J, M, \mathbf{q}\rangle \langle S^n; J, M, \mathbf{q}|, \quad (\text{A.43})$$

e vale que

$$\begin{aligned} \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0 | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) | S^n; J', M', \mathbf{q}' \rangle &\propto \delta_{J,J'} \delta_{M,M'} \gamma_n(S, J, \mathbf{q}_0, \mathbf{q}'), \\ \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0 | Y_{J,M}(\mathbf{S}_{n+1}) | S^n; J', M', \mathbf{q}' \rangle &\propto \delta_{J,J'} \delta_{M,M'} \gamma_n(S, J, \mathbf{q}_0, \mathbf{q}'), \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

em que $\gamma_n(S, J, \mathbf{q}_0, \mathbf{q}')$ não depende de M .

Calculamos agora as várias contribuições para $H'_{1,n+2}$. Para a primeira contribuição, obtemos

$$\begin{aligned}
P_0 H_{1,2} P &= |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| \times \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) \\
&\times \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J'=1}^2 \sum_{M'=-J'}^J |S^n; J', M', \mathbf{q}'\rangle \langle S^n; J', M', \mathbf{q}'| \\
&= \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J \sum_{J'=1}^2 \sum_{M'=-J'}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle \langle S^n; J', M', \mathbf{q}'| \\
&\times \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S^n; J', M', \mathbf{q}'\rangle. \tag{A.45}
\end{aligned}$$

Utilizando A.44, a expressão acima pode ser expressa como

$$\begin{aligned}
P_0 H_{1,2} P &= \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle \langle S^n; J, M, \mathbf{q}'| \\
&\times \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) |S^n; J, M, \mathbf{q}'\rangle. \tag{A.46}
\end{aligned}$$

Analogamente, também utilizando a A.44, temos

$$\begin{aligned}
P_0 H_{n+1,n+2} P &= \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{n+1,J} (-1)^M Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{n+2}) |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle \langle S^n; J, M, \mathbf{q}| \\
&\times \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) |S^n; J, M, \mathbf{q}\rangle, \tag{A.47}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P H_{1,2} P_0 &= \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J'=1}^2 \sum_{M'=-J'}^J K_{1,J'} (-1)^{M'} Y_{J',M'}(\mathbf{S}_1) |S^n; J', M', \mathbf{q}'\rangle \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| \\
&\times \langle S^n; J', M', \mathbf{q}'| Y_{J',-M'}(\mathbf{S}_2) |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle, \tag{A.48}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P H_{n+1,n+2} P_0 &= \sum_{\mathbf{q}' \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J'=1}^2 \sum_{M'=-J'}^J K_{n+1,J'} (-1)^{M'} Y_{J',-M'}(\mathbf{S}_{n+2}) |S^n; J', M', \mathbf{q}'\rangle \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| \\
&\times \langle S^n; J', M', \mathbf{q}'| Y_{J',M'}(\mathbf{S}_{n+1}) |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle. \tag{A.49}
\end{aligned}$$

Combinando as contribuições anteriores, lembrando que

$$\langle S^n; J, M, \mathbf{q} | S^n; J', M', \mathbf{q}' \rangle = \delta_{J,J'} \delta_{M,M'} \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \tag{A.50}$$

, e novamente utilizando a A.44, chegamos aos termos não constantes

$$\begin{aligned}
P_0 H_{1,2} P \frac{1}{E_{0,\mathbf{q}_0} - H_{2,n+1}} P H_{n+1,n+2} P_0 &= \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} K_{n+1,J} Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{n+2}) \\
&\times |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| \\
&\times \frac{\langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0 | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) | S^n; J, M, \mathbf{q}\rangle \langle S^n; J, M, \mathbf{q} | Y_{J,M}(\mathbf{S}_3) | S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle}{E_{0,\mathbf{q}_0} - E_{J,\mathbf{q}}},
\end{aligned} \tag{A.51}$$

e

$$\begin{aligned}
P_0 H_{n+1,n+2} P \frac{1}{E_{0,\mathbf{q}_0} - H_{2,n+1}} P H_{1,2} P_0 &= \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0} \sum_{J=1}^2 \sum_{M=-J}^J K_{1,J} K_{n+1,J} Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{n+2}) Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) \\
&\times |S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0| \\
&\times \frac{\langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0 | Y_{J,M}(\mathbf{S}_{n+1}) | S^n; J, M, \mathbf{q}\rangle \langle S^n; J, M, \mathbf{q} | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) | S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle}{E_{0,\mathbf{q}_0} - E_{J,\mathbf{q}}}.
\end{aligned} \tag{A.52}$$

As propriedades dos TEIs e o teorema de Wigner–Eckart permitem escrever

$$\begin{aligned}
(-1)^M g_n(S, J, \mathbf{q}_0, \mathbf{q}) &\equiv \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0 | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) | S^n; J, M, \mathbf{q}\rangle \\
&\times \langle S^n; J, M, \mathbf{q} | Y_{J,M}(\mathbf{S}_{n+1}) | S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle \\
&= \langle S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0 | Y_{J,M}(\mathbf{S}_{n+1}) | S^n; J, M, \mathbf{q}\rangle \\
&\times \langle S^n; J, M, \mathbf{q} | Y_{J,-M}(\mathbf{S}_2) | S^n; 0, 0, \mathbf{q}_0\rangle,
\end{aligned} \tag{A.53}$$

com $g_n(S, J, \mathbf{q}_0, \mathbf{q})$ independente de M , de modo que, se nos restringimos ao subespaço associado ao singlete fundamental de $H_{2,n+1}$, obtemos um hamiltoniano efetivo

$$H'_{1,n+2} = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} \sum_{M=-J}^J (-1)^M Y_{J,M}(\mathbf{S}_1) Y_{J,-M}(\mathbf{S}_{n+2}) = \sum_{J=1}^2 K'_{1,J} O_J(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_{n+2}), \tag{A.54}$$

com

$$K'_{1,J} = 2K_{1,J} K_{n+1,J} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0} \frac{g_n(S, J, \mathbf{q}_0, \mathbf{q})}{E_{0,\mathbf{q}_0} - E_{J,\mathbf{q}}}. \tag{A.55}$$