



Estudo da distribuição conjunta de energias e comprimentos de excitações de alguns sistemas desordenados

Palavras-Chave: Sistemas desordenados, sistemas fortemente correlacionados, sistemas magnéticos

Autores:

DANIEL SCHMITZ BERTINI [UNICAMP]

Prof.º/ Dr.º EDUARDO MIRANDA (orientador) [UNICAMP]

INTRODUÇÃO:

Esse projeto teve por objetivo determinar a distribuição conjunta de energias de excitação e comprimentos característicos de sistemas unidimensionais de spins generalizados para o grupo $SU(N)$ no ponto fixo. Para isso, foi usada uma técnica conhecida por grupo de renormalização de desordem forte (SDRG).

Para cadeias desordenadas de spins-1/2 com acoplamento antiferromagnético do tipo Heisenberg, denotaremos por Ω_0 o valor de suporte da distribuição da energia dos acoplamentos, ou seja, o valor mais alto. Utilizando o SDRG podemos reduzir a escala até um valor Ω , obtendo assim uma nova distribuição das energias, ou das energias e comprimentos característicos como foi feito durante a iniciação científica para um outro caso. Foi mostrado pela comunidade que em baixas energias esses sistemas são caracterizados por uma desordem efetiva infinita, ou seja, chamando de J as variáveis que descrevem a distribuição das energias de excitação, para a distribuição renormalizada na escala Ω quando $\Omega \rightarrow 0$ temos que $\frac{J}{\Omega} \rightarrow \infty$.

Além desse sistema, podem ser caracterizados sistemas de uma outra classe de universalidade utilizando essa mesma técnica, que tem como exemplo pontos multi críticos de spins maiores que $\frac{1}{2}$ [2,3]. A característica mais importante dessa nova classe é a existência de dois tipos de dizimação quando rodamos o SDRG utilizando a equação de fluxo como será melhor explicado a seguir. Essa classe de sistemas é chamada de IRFP-p, onde p denota a probabilidade de ocorrer um dos tipos de dizimação, e 1-p a outra. Para o caso em que p=1, a distribuição assintótica já foi determinada, portanto buscamos determinar a distribuição conjunta da energia de acoplamentos e seus comprimentos.

DESENVOLVIMENTO:

Para resolver o problema, foi necessário inicialmente encontrar a equação de fluxo, que descreve o fluxo da distribuição de acoplamentos e comprimentos para o caso geral do IRFP-p.

Denotando pelo índice 1 o comprimento e acoplamento à esquerda do acoplamento com valor Ω , pelo índice 3 o acoplamento e comprimento que se encontra à direita do mesmo e por 2 o comprimento a direita do acoplamento Ω , e assim por diante.

Um dos tipos de dizimação é a chamada dizimação multiplicativa, que é uma dizimação de segunda ordem, cuja probabilidade de ocorrer é p . Nessa dizimação os spins com índice 2 e 3 (os spins com índices i e $i+1$ tem acoplamento com índice i) são substituídos por um singleto e uma nova ligação, que são dados por

$$\tilde{J} = a \frac{J_1 J_3}{\Omega}, \quad \tilde{l} = l_1 + l_2 + l_3.$$

Temos que o coeficiente a pode ser tomado como 1 sem perda de precisão para o caso assintótico.

Na outra dizimação, que é de primeira ordem, teremos que os spins 2 e 3 são substituídos por um spin efetivo S , cujo índice do acoplamento e comprimento novo à esquerda são denotados por 1 e à direita por 3 dados por

$$\tilde{J}_1 = b_1 J_1, \quad \tilde{J}_3 = b_3 J_3, \quad \tilde{l}_1 = l_1 + \frac{l_2}{2}, \quad \tilde{l}_3 = l_1 + \frac{l_2}{2}.$$

Novamente podemos tomar assintoticamente os coeficientes b como 1. No entanto, caso continuemos a proceder dessa forma como foi verificado, as equações são extremamente difíceis de resolver, já que usando o ansätze que será apresentado, elas são não locais, portanto os comprimentos foram tomados como

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

Chamando de P a distribuição, temos que a equação de fluxo é dada por

$$P(J, l; \Omega - d\Omega) = \frac{P(J, l; \Omega) + dR_1(J, l) + dR_2(J, l)}{n},$$

onde P , J e l são tratadas como variáveis contínuas e dR_1 e dR_2 são as modificações na distribuição devido a dizimação de primeira e segunda ordem respectivamente, que são dados por

$$\begin{aligned} dR_1(J, l) &= (1 - p) d\Omega \int dJ_1 dl_1 dJ_3 dl_3 dl_2 P(\Omega, l_2; \Omega) P(J_1, l_1; \Omega) P(J_3, l_3; \Omega) \\ &\quad \times \left[\delta(J - \tilde{J}_1) \delta(l - l_1 - l_2/2) - \delta(J - J_1) \delta(l - l_1) \right. \\ &\quad \left. + \delta(J - \tilde{J}_3) \delta(l - l_3 - l_2/2) - \delta(J - J_3) \delta(l - l_3) \right], \\ dR_2(J, l) &= p d\Omega \int dJ_1 dl_1 dJ_3 dl_3 dl_2 P(\Omega, l_2; \Omega) P(J_1, l_1; \Omega) P(J_3, l_3; \Omega) \\ &\quad \times \left[\delta(J - \tilde{J}) \delta(l - l_1 - l_2 - l_3) - \delta(J - J_1) \delta(l - l_1) - \delta(J - J_3) \delta(l - l_3) \right], \end{aligned}$$

onde n é a constante de normalização. Desenvolvendo a expressão para a equação de fluxo e fazendo as mudanças de variáveis

$$\zeta = \ln \left(\frac{\Omega}{J} \right), \quad \Gamma = \ln \left(\frac{\Omega_0}{\Omega} \right),$$

chamando de ρ a distribuição dada por essas variáveis e fazendo uma mudança de escala do tipo Fisher dada por

$$\rho(\zeta, l; \Gamma) = \frac{1}{\Gamma^{(1+\kappa)}} Q\left(\eta = \frac{\zeta}{\Gamma}, \lambda = \frac{l}{\Gamma^\kappa}; \Gamma\right),$$

com κ a determinar, obtemos

$$\Gamma \frac{\partial Q}{\partial \Gamma} = (\kappa + 1)Q + (1 + \eta) \frac{\partial Q}{\partial \eta} + \kappa \lambda \frac{\partial Q}{\partial \lambda} + q \int d\lambda_1 d\lambda_2 Q(0, \lambda_1) Q(\eta, \lambda_2) \delta(\lambda - \lambda_1 - \lambda_2) + p \int d\lambda_1 d\lambda_2 d\lambda_3 Q(0, \lambda_2) \int_0^\eta d\eta_1 Q(\eta_1, \lambda_1) Q(\eta - \eta_1, \lambda_3) \delta(\lambda - \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3).$$

Como estamos interessados em encontrar o ponto fixo, tomamos nessa equação $\frac{\partial Q}{\partial \Gamma} = 0$.

Tirando a transformada de Laplace dessa equação e definindo por

$$\hat{Q} = L\{Q(\eta, \lambda, \Gamma)\} = \hat{Q}(\eta, \chi, \Gamma) = \int_0^\infty d\lambda Q(\eta, \lambda, \Gamma) e^{-\lambda \chi},$$

a transformada de Q , chegamos em

$$0 = \hat{Q} + (1 + \eta) \frac{\partial \hat{Q}}{\partial \eta} - \kappa \chi \frac{\partial \hat{Q}}{\partial \chi} + q \hat{Q}(0, \chi) \hat{Q} + p \hat{Q}(0, \chi) \int_0^\eta d\eta_1 \hat{Q}(\eta_1, \chi) \hat{Q}(\eta - \eta_1, \chi),$$

onde $q = 1 - p$. Para resolver essa equação usamos o ansätze

$$\hat{Q}(\eta, \chi; \Gamma) = \frac{1}{p} e^{f_1(\chi) + f_2(\chi)\eta - \frac{\eta}{p}},$$

com isso ficamos com

$$0 = \left(1 + f_2 - \frac{1}{p} - \kappa \chi f_1' + q \frac{e^{f_1}}{p}\right) + \left(f_2 - \frac{1}{p} - \kappa \chi f_2' + \frac{e^{2f_1}}{p}\right) \eta,$$

como essa equação deve ser verdadeira para todo η obtemos

$$0 = 1 + f_2 - \frac{1}{p} - \kappa \chi f_1' + q \frac{e^{f_1}}{p},$$

$$0 = f_2 - \frac{1}{p} - \kappa \chi f_2' + \frac{e^{2f_1}}{p}.$$

Temos que p é dado pela simetria da Hamiltoniana, sendo que a simetria for $SU(N)$ temos que $p = \frac{1}{1-N}$. Podemos encontrar as condições de contorno analisando para $\chi = 0$ e o valor de κ fazendo uma expansão em série de Taylor e analisando os termos de ordem mais baixa, usando o fato que a distribuição somente nos comprimentos deve ser bem comportada. Fazendo isso concluímos que $f_1(\chi = 0) = f_2(\chi = 0) = 0$ e $\kappa = N$. O comportamento assintótico dessas equações pode ser estudado, e foi durante o projeto.

Após inúmeras tentativas de encontrar uma solução analítica para o problema, que não foram bem sucedidas, passamos a tentar uma solução numérica. Para isso, é conveniente fazer a mudança $f_1(\chi) = \ln(g(\chi))$, assim podemos escrever o sistema anterior como

$$g' = \frac{-\frac{(1-p)}{p}g + gf + \frac{(1-p)}{p}g^2}{Ny}, \quad f' = \frac{f - \frac{1}{p} + \frac{g^2}{p}}{Ny},$$

onde $f = f_2$. Utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem com um passo de 0.1 foi resolvido o sistema. Foram obtidos os resultados para $N=2,3,4$, no entanto, nesse resumo me limitei a mostrar os resultados quando $N=2$. Para resolver esse sistema, diferente de equações lineares, precisamos de mais uma condição de contorno, que é a derivada de uma das funções em um ponto, que foi escolhido como a origem, a derivada da outra função na origem como foi identificado, pode ser facilmente determinada a partir da derivada escolhida para a outra função, obedecendo a relação $2g'(\chi = 0) = f'(\chi = 0)$. Foi escolhido $f'(\chi = 0) = -1/3$, essa derivada está relacionada com a distância inicial entre os spins, e pode ser ajustada como uma escala, portanto não há perda de generalidade.

Para encontrarmos a distribuição precisamos realizar a transformada inversa de Fourier em $L[Q]$, que é função de η e χ , usando a f e g encontradas. Para isso foi integrado no caso em que $N=2$ no intervalo $[-2.3-100i, -2.3+100i]$. O valor da parte real foi escolhido de modo a estar próximo ao primeiro ao primeiro pólo pela direita, já que como foi visto, isso melhorou os resultados numéricos, então para cada valor de N foi usado um valor diferente para a parte real. O intervalo da parte complexa foi escolhido pois observamos que quando trocado para ir de $[-2.3-1000i, -2.3+1000i]$ nenhuma mudança significativa foi observada.

Podemos obter a distribuição somente na variável associada aos comprimentos integrando a distribuição $L[Q]$ sobre η , ou a distribuição nas duas variáveis, como era o objetivo inicial fazendo uma malha 2 D. Para checar a qualidade dos resultados obtidos, na distribuição obtida calculando a transformada inversa da função integrada sobre η , ou seja, somente função de χ (obtendo a função que foi chamada de $Q(\lambda)$), foram calculados os momentos de forma semi-analítica usando o software Mathematica fazendo uso das condições iniciais. Isso é possível pois podemos encontrar recursivamente expressões para as próximas derivadas na origem simplesmente derivando as expressões que nos dão $g'(\chi)$ e $f'(\chi)$ e então usando as condições iniciais e as derivadas de ordem menor em zero encontradas nas iterações anteriores.

RESULTADOS:

Na figura 1 estão representados os resultados obtidos para $N=2$. Calculando numericamente o valor dos cinco primeiros momentos das distribuições na figura à esquerda foram obtidos os seguintes resultados ordenados do primeiro momento até o quinto momento: 0.499, 0.415, 0.505, 0.815 e 1.631. Calculando de forma semi-analítica, como descrito anteriormente usando o Mathematica foi obtido: 0.500, 0.412, 0.508, 0.824 e 1.671. A pequena diferença até mesmo em momentos elevados como o quinto momento, indica que o método numérico obteve bons resultados.

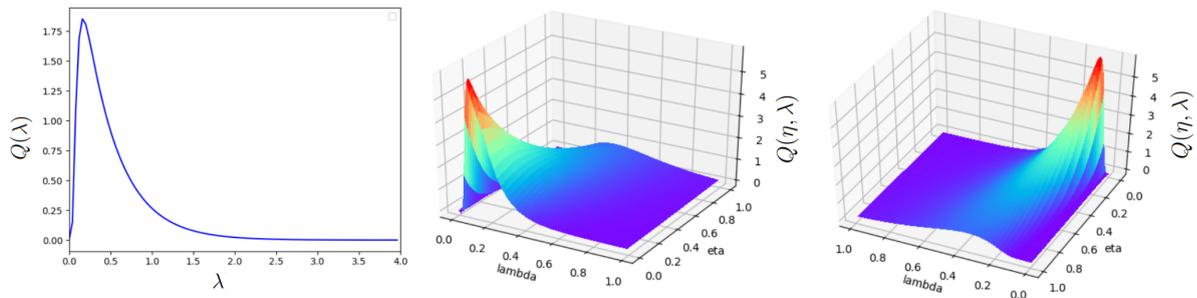


Figura 1 - A esquerda está representada a distribuição $Q(\lambda)$ e a direita duas imagens de ângulos diferentes da distribuição $Q(\lambda, \eta)$.

CONCLUSÃO:

Durante a iniciação científica inicialmente buscou-se encontrar uma solução analítica para o problema onde na dizimação de primeira ordem é feita como mencionado no começo adicionando $l_2/2$ em cada um dos novos comprimentos, no entanto, foram encontradas diversas dificuldades para a resolução desse problema. Em seguida foi estudada a equação fazendo a aproximação descrita, com isso foi possível fazer certas análises do comportamento de forma analítica, no entanto, mesmo assim não foi encontrada uma solução para a distribuição conjunta de acoplamentos e comprimentos.

Por último, procuramos uma solução numérica como apresentado, comparando os momentos dessa distribuição com os momentos obtidos de forma semi-analítica concluímos que a solução numérica obtida é adequada, ou seja, o método não apresentou problemas. No entanto, fica por justificar se a aproximação feita na dizimação de primeira ordem é satisfatória, tendo o mesmo comportamento assintótico, ou se a solução é alterada.

BIBLIOGRAFIA

- J. A. Hoyos and E. Miranda. Universal finite- and infinite-disorder fixed-points in quantum spin chains. Não publicado.
- Kedar Damle. Griffiths effects in random heisenberg antiferromagnetic $s=1$ chains. Phys. Rev. B, 66:104425, Sep 2002.
- Chandan Dasgupta and Shang-keng Ma. Low-temperature properties of the random heisenberg antiferromagnetic chain. Phys. Rev. B, 22:1305–1319, Aug 1980.
- Daniel S. Fisher. Random antiferromagnetic quantum spin chains. Phys. Rev. B, 50:3799–3821, Aug 1994.
- Daniel S. Fisher. Random antiferromagnetic quantum spin chains. Phys. Rev. B, 50:3799–3821, Aug 1994.
- José Abel Hoyos and E. Miranda. Random antiferromagnetic $SU(N)$ spin chains. Phys. Rev. B, 70:180401, Nov 2004.
- V. L. Quito, P. L. S. Lopes, José A. Hoyos, and E. Miranda. Highly symmetric random one-dimensional spin models. Phys. Rev. B, 100:224407, Dec 2019.
- V. L. Quito, José A. Hoyos, and E. Miranda. Emergent $su(3)$ symmetry in random spin-1 chains. Physical Review Letters, 115(16), Oct 2015.