

Métodos Analíticos em Sistemas Fortemente
Correlacionados Unidimensionais: estudo da rede de
Kondo por bosonização e da cadeia de Heisenberg pelo
ansatz de Bethe.

Eduardo Peres Novais de Sá

16 de maio de 2001

Eduardo Peres Novais de Sá

Métodos Analíticos em Sistemas Fortemente Correlacionados Unidimensionais: *estudo da rede de Kondo por bosonização e da cadeia de Heisenberg pelo anstaz de Bethe.*

Tese submetida ao Instituto de Física Gleb Wataghin para a obtenção do título de Doutor em Ciências pela Universidade Estadual de Campinas.

Área de concentração: Física da Matéria Condensada

Orientador: Guillermo Gerardo Cabrera

Co-orientador: Eduardo Miranda

Universidade Estadual de Campinas,
Campinas, São Paulo, Brasil.

2001

para Daniela,

pelo grande amor e principalmente pela paciência que teve comigo durante todos esses anos.

Agradecimentos

Uma pessoa é a soma de suas experiências. Se hoje estou agradecendo, não há como me furtar de lembrar e agradecer aos maiores responsáveis por isso: meus pais, Aurea e Izamôr. Fisicamente presentes ou separados de mim no espaço e no tempo, seu amor e carinho foram as mãos que formaram o que sou. Por tudo isso, e por muito mais do que eu consigo colocar em palavras, obrigado. Também agradeço a minha avó Maria, pelo exemplo de coragem e pelo amor incondicional, ao meu irmão Ricardo e sua esposa Janaína, pelos muitos anos de amizade e pelos que ainda estão por vir, e a meus tios Humberto e Clélia, pelo carinho e ternura.

Devo agradecer também ao meu orientador prof. Guillermo Cabrera, por muitas conversas e principalmente pela liberdade de procurar minha própria identidade intelectual. Para mim, ele é um exemplo de como deveria ser um físico no sentido clássico da palavra, com uma visão ampla da natureza e seus fenômenos, com cultura e filosofia. Em suma, o inverso da especificidade que rodeia o ambiente acadêmico contemporâneo. Na formação da minha identidade intelectual existem dois outros nomes tão importantes quanto o do meu orientador. Agradeço ao prof. Antônio Castro Neto por me mostrar a sua paixão pela física e por me apresentar ao problema da rede de Kondo. Acima de tudo devo agradecer a ele por nunca ter duvidado, por sempre ter achado um tempo para me mandar um e-mail ou telefonar me dando força e estímulo para continuar com o problema. No final, parece ser essa a característica mais importante de um orientador. A outra figura na minha formação é o prof. Eduardo Miranda. Durante o último ano do meu doutorado suas orientações e principalmente a atitude instigante e questionadora foram fundamentais para a minha formação.

Existem poucas pessoas com o dom de realmente ensinar, aquelas que conseguem dissecar um tema complexo em suas estruturas básicas e apresentá-las de uma maneira lógica sem perder a magia e o entusiasmo. Eu tive o privilégio de conhecer algumas delas ao longo desses anos. Agradeço aos meus professores: A. Rigas, F. Mercuri, K. Furuya, A. Caldeira, F. Cerdeira, P. Schulz, J. Brum, R. Luzzi, G. Kleiman, A. Castro Neto, E. Miranda e G. Cabrera.

Durante todos esses anos fiz muitos amigos, principalmente no prédio D. Muitos não se encontram mais por perto, como Daniel Jonathan, Marcelo Terra Cunha, Marcos Jardim, Alessandro Moura, Marcela Redigolo, Marcelo Santos e Zolacir Trindade de Oliveira. Outras continuam habitando o IFGW, como Claudio Cardoso, Daniela Manoel, José Montanha, Marcos Avila, Raquel Ribeiro, Ary Perez,

Jeferson Ortiz, Marcelo Rosenau e Demetrio da Silva Filho. Acrescento a esta lista os amigos que fiz na minha estadia na UC-Riverside: Nils Hasselmann, Alexander Chernyshev e Carmen González. A todos vocês muito obrigado pela amizade e infinitas conversas.

Não há como agradecer o suficiente as agências de fomento a pesquisa, FAPESP e CAPES, que tornaram possível meu doutorado, e a Universidade Estadual de Campinas, pelos dez anos em que foi meu segundo lar.

Finalmente, eu agradeço a Daniela por ter estado comigo todos esses anos, dividindo comigo sua vida e sonhos, me levantando das minhas depressões e compartilhando os momentos de alegria.

Epígrafe

O trabalho que um estudante de pós graduação venha a desenvolver torna-se para sempre parte da reputação de seu orientador, porque é assim que reconstituímos as linhagens intelectuais. Eu fui orientado por Norman Newell e tudo o que vier a fazer ao longo de minha vida será visto como um legado transmitido por ele (e se eu fizer uma trapalhada isso redundará em desabono para ele - ainda que sem muita gravidade pois reconhecemos uma assimetria necessária: os erros são pessoais; o êxito, parte da linhagem). Eu aceito de bom grado esse costume e jurei fidelidade a ele - e não por motivo de aprovação teórica mas porque, novamente como no velho sistema de aprendizado, ganhei o direito de me beneficiar com a próxima geração.

Stephen Jay Gould em *Vida Maravilhosa: o acaso na evolução e a natureza da história*[31, página 157].

As exigências do dever são três. A primeira é o sacrifício, o estudo, dar esmolas; a segunda é a austeridade; a terceira é a vida como estudante na casa de um mestre e a prática da continência. Juntas essas três exigências levam a pessoa ao reino dos abençoados. Porém aquele que está firmemente estabelecido no conhecimento de Brahman alcança a imortalidade.

Os Upanishads: sopro vital do eterno, nona edição, página 89, editora Pensamentos Ltda.

Resumo

Neste trabalho, estudamos a rede de Kondo em uma dimensão por bosonização abeliana e a cadeia de Heisenberg pelo ansatz de Bethe. Conectamos o problema da rede de Kondo com o problema Jahn-Teller cooperativo e com o problema de 2 líquidos de Luttinger interagentes. A principal técnica usada foi o grupo de renormalização do gás de Coulomb generalizado, que surge ao integrarmos os graus de liberdade bosônicos. Procuramos explicar o diagrama de fase da cadeia de Ising-Kondo e da rede de Kondo, tanto para acoplamentos ferromagnéticos, como para acoplamentos antiferromagnéticos. Finalmente, estudamos as soluções de Bethe para cadeias de Heisenberg finitas e infinitas.

Summary

In this thesis, we studied the one-dimensional Kondo lattice model with abelian bosonization and the Heisenberg chain with the Bethe ansatz. We connected the Kondo lattice with the cooperative Jahn-Teller and with the 2 Luttinger liquids interacting by hopping. The main technique used was the renormalization group for the generalized Coulomb gas, that is obtained when we integrate the bosonic degrees of freedom. We explained the phase diagrams for the Ising-Kondo chain and the Kondo lattice, for ferromagnetic and anti-ferromagnetic coupling. Finally, we studied the Bethe solutions for the finite and thermodynamic Heisenberg chain.

Sumário

Agradecimentos	vii
Epígrafe	ix
Resumo	xi
Summary	xiii
Sumário	xv
Lista de Figuras	xix
Lista de Tabelas	xxi
1 Introdução	1
1.1 problema Kondo e a rede de Kondo	4
1.2 hamiltoniano de Heisenberg	11
1.3 objetivos iniciais	11
2 Bosonização Abeliana e a Rede de Kondo	13
2.1 bosonização abeliana	13
2.1.1 hamiltoniana livre	13
2.1.2 férmions de Dirac	14
2.1.3 operadores partícula-buraco	16
2.1.4 fatores de Klein	18
2.1.5 identidades bosônicas (ou Fórmula de Mandelstam)	19
2.1.6 hamiltoniana livre na base bosônica	23
2.1.7 modelo de Luttinger	24
2.1.8 interações não triviais	25
termo de <i>back scattering</i>	25

	termo de <i>umklapp</i>	26
2.2	bosonização do problema Kondo	26
2.2.1	grupo de renormalização: análise de Anderson-Yuval	29
2.2.2	refermionização: análise de Emery-Kivelson	30
2.3	bosonização da rede de Kondo	33
2.3.1	introduzindo interações eletrônicas	35
2.3.2	modelo efetivo para os spins com estados coerentes de spin	36
2.3.3	rotação do campo bosônico	39
	rotação em sistemas diluídos	40
	rotação em sistemas densos	42
2.4	objetivos e hipóteses	46
2.5	função de partição e integrais de caminho na base S^z	48
2.6	ação efetiva e o gás de Coulomb	50
2.6.1	ação efetiva	51
2.6.2	representação de gás de Coulomb	54
2.6.3	relações de dualidade e condições de neutralidade	55
2.6.4	campo composto: correspondência entre a relação de dualidade e a rotação do campo bosônico	59
2.6.5	representação de gás de Coulomb para o problema Kondo	62
	problema de 1 canal	62
	problema de 2 canais	64
2.7	renormalização	66
2.7.1	re-escala global	67
2.7.2	aniquilação e fusão de partículas	70
2.7.3	renormalização da rede de Kondo	71
	renormalização da fugacidade	72
	“flips” correlacionados	75
	aniquilação e fusão de partículas	77
	equações do grupo de renormalização para o limite denso	82
2.8	diagrama de fase da rede de Ising-Kondo	83
2.9	diagrama de fase da rede de Kondo	84
2.10	quebra de simetria	91
3	Ansatz de Bethe e a Cadeia de Heisenberg	93
3.1	formulação do <i>ansatz</i>	95
3.1.1	<i>ansatz</i> de Bethe Funcional	95

3.1.2	<i>ansatz</i> de Bethe Algébrico	102
	equações de Yang-Baxter	102
	método do espalhamento inverso quântico	104
3.1.3	soluções das equações do <i>ansatz</i>	107
	<i>ansatz</i> de Bethe no limite termodinâmico	107
	soluções numéricas	113
3.1.4	<i>ansatz</i> de Bethe termodinâmico	114
	modelo de 6-Vértices	114
	<i>thermal</i> Bethe <i>ansatz</i>	115
3.2	grupo de renormalização da matriz de densidade	117
3.2.1	método da matriz de densidade	118
3.2.2	entendendo DMRG pela solução de Bethe	119
4	Resultados e Conclusões	123
A	Definições e identidades	125
A.1	funções e distribuições	125
A.1.1	função delta de Kronecker	125
A.1.2	distribuição delta de Dirac	125
A.1.3	função degrau	126
A.1.4	função sinal	126
A.2	identidades úteis	126
A.3	álgebra SU(2)	127
A.4	coordenadas polares	128
B	Bosonização e Rede de Kondo	129
B.1	função de correlação de 2 pontos	129
B.2	propagadores para a rede de Kondo	131
B.2.1	propagador spin-spin	131
B.2.2	propagador <i>kink-kink</i>	131
B.2.3	propagador spin- <i>kink</i>	133
	parte imaginária	134
	parte real	134
B.3	integrais de caminho com estados coerentes de spin	135
B.4	condições de neutralidade	137
B.5	gás molecular	138
B.6	método do operador deslocamento	141

B.7	<i>cut-off</i> suave	144
C	Gás de Coulomb e Grupo de Renormalização	147
C.1	renormalização do problema Kondo	147
C.1.1	problema de 1 canal	147
C.1.2	problema de 2 canais	155
C.2	cargas ordenadas	157
C.3	ação efetiva com variável complexa	158
C.4	integração da função de aniquilação	158
C.4.1	termo de primeira ordem	158
C.4.2	termo de segunda ordem	159
C.5	renormalização do problema de 2-LLs	163
D	Ansatz de Bethe na Cadeia de Heisenberg	171
D.1	formulação do Ansatz	171
D.1.1	hipótese de Bethe	171
D.1.2	equações do Ansatz	172
D.1.3	quantização dos momentos de Bethe	178
	Referências Bibliográficas	181
	Índice Remissivo	189

Lista de Figuras

1.1	curvas experimentais mostrando o aumento da resistividade devido ao efeito Kondo, adaptada da referência [5, página 688].	6
1.2	diagrama de Doniach (figura adaptada da ref. [13]).	8
1.3	diagramas de fase da rede de Kondo obtido por métodos numéricos. FM denota ferromagnetismo, PM paramagnetismo, IC correlações incommensuradas e PS separação de fase. $n_c = 1$ corresponde a banda semi-preenchida.	9
2.1	transição Kosterlitz-Thouless no problema Kondo.	30
2.2	cone de luz referente a um sítio da rede de Kondo.	38
2.3	ação de um auto-estado de S_{total}^z sobre $k(x)$ e $k(x+a)$	42
2.4	tendência a formação de vórtices no campo gaussiano por conta dos <i>flips</i> na direção temporal. Um par vórtice-antivórtice muda a topologia do espaço-tempo.	56
2.5	o vácuo do gás de Coulomb corresponde a 2^N configurações de spin.	56
2.6	relação entre as diversas abordagens à rede de Kondo por bosonização.	61
2.7	relação entre o campo e o seu dual.	63
2.8	passos de renormalização que levam na mesma configuração final. Os círculos representam a variação da escala.	74
2.9	as cargas mais altas geradas pelo grupo de renormalização podem ser entendidas como “ <i>hopping</i> correlacionado” entre as bandas do modelo original.	76
2.10	diagrama de fase do modelo Jahn-Teller cooperativo (ou cadeia de Ising-Kondo). A região 1 corresponde a um ordenamento na direção z e a região 2 ao ordenamento na direção x . Nesse diagrama J não está normalizado pela velocidade de Fermi.	85
2.11	diagrama de fase da transição ordem/desordem da rede de Kondo anisotrópica com férmions não interagentes. Nesse diagrama, J^z não está normalizado pela velocidade de Fermi.	88
3.1	definição do <i>ansatz</i> de Bethe em termos de um diagrama comutativo.	96
3.2	forma diagramática da matriz de espalhamento.	103

3.3	equações de Yang-Baxter	103
3.4	relações triangulares	103
C.1	correção de primeira ordem devido a polarização do vácuo.	151
C.2	quando não há restrições sobre o ordenamento das cargas os diagramas se cancelam.	155
C.3	expansão de cumulantes.	164

Lista de Tabelas

2.1	ponto dos espaço de parâmetros que permitem a re-bosonização do problema Kondo. .	65
2.2	notação para as cargas do gás de Coulomb generalizado relevantes para o problema da rede de Kondo.	72
2.3	processos relevantes na renormalização da rede de Kondo. <i>A</i> significa aniquilação de par e * significa que a carga gerada tem fugacidade irrelevante.	74
2.4	comportamento qualitativo do fluxo de renormalização.	88
3.2	configurações permitidas no modelo de 6-vértices	115
3.3	renormalização no espaço real para a cadeia de Heisenberg.	120

Capítulo 1

Introdução

Basically, I suppose the justification for studying these lattice models is very simple: they are relevant and they can be solved, so why not do so and see what they tell us?

R. J. Baxter em “*Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*”[8].

By definition, strongly correlated systems are those ones which cannot be described as a sum of weakly interacting parts. So here we encounter a situation when the whole is greater than its parts, which is always difficult to analyse. ...

At present, there are two approaches to strongly correlated systems. One approach, ..., operates with the exact solutions of the many-body theories. Needless to say not every model can be solved exactly, but fortunately many interesting ones can. So this method can provide a treasury of valuable information.

The other approach is to try to reformulate complicated interacting models in such a way that they become weakly interacting. This is the idea of bosonization which was pioneered by Jordan and Wigner in 1928 when they established equivalence between the spin $S=1/2$ anisotropic Heisenberg chain and the model of interacting fermions The example of the spin $1/2$ Heisenberg chain has also made clear that a way to describe a many body system is not unique, but is a matter of convenience.

A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan e A. M. Tsvelik em *Bosonization and Strongly Correlated Systems*[30, páginas x,xi e xii].

A física de fenômenos emergentes é sem dúvida uma das grandes fronteiras da pesquisa atual. Sistemas biológicos, altas energias e matéria condensada caminham lado a lado na questão de entender a natureza do “todo”.

Em altas energias a procura pelo “todo” provavelmente se iniciou na eletrodinâmica quântica (QED). Para *weak coupling* (constante de estrutura fina, α , pequena), cargas elétricas aparecem como excitações elementares do campo quantizado, enquanto monopolos magnéticos aparecem como excitações coletivas. A procura de uma teoria simétrica para cargas magnéticas e elétricas inevitavelmente passa por uma relação de dualidade tipo *strong-weak coupling*.

$$\alpha \longleftrightarrow \frac{1}{\alpha}$$

O desenvolvimento da teoria de cordas levou essa idéia a um novo *status*, substituindo o conceito de partícula pelo de um objeto estendido (a corda). Ainda em desenvolvimento, a grande teoria de unificação (TOE - theory of everything) aparece no horizonte como a teoria de membranas (M theory): uma teoria quântica que tem vários limites “clássicos” (entenda-se: teorias de cordas, relatividade geral, QCD, teorias de Gauge não abelianas, etc..) ligados por relações de dualidade tipo *strong-weak coupling*[84]. O Universo como o entendemos hoje seria um fenômeno emergente dessa teoria.

Em matéria condensada fenômenos emergentes vão desde a supercondutividade de alta temperatura até a “transmutação de partículas” e o confinamento (como na cadeia de Heisenberg ou no efeito Hall fracionário). R. B. Laughlin falou com muita propriedade sobre esse tema durante a palestra plenária que conferiu no March Meeting de 1999 da Sociedade Americana de Física: na realidade não precisamos ir muito longe para obtermos toda a riqueza e beleza desses fenômenos. A velha interação de Coulomb já é mais que suficiente para não sermos capazes de obter uma descrição completa da física de muitos corpos.

A questão mais difícil que se apresenta a um físico teórico é como podemos simplificar as interações de forma a podermos tratar o sistema e ainda obtermos os fenômenos que observamos emergirem no laboratório. Se isso é obtido conseguimos capturar uma imagem da natureza que podemos entender, aumentando o conhecimento humano. Apesar de todas as dificuldades e frustrações inerentes a andar por caminhos novos, essa também é a pergunta com resposta mais recompensadora. Ao longo dos anos, a teoria de renormalização se tornou um dos caminhos para responder a essa pergunta. Citando Auerbach:

Em geral a substituição de um hamiltoniano complicado por um modelo efetivo pode ser colocado de maneira formal quando formulado a partir do grupo de renormalização. A transformação do hamiltoniano para o hamiltoniano efetivo é chamada de renormalização. Durante a renormalização algumas interações, chamadas de irrelevantes, são suprimidas. As interações que crescem ou ficam constantes são chamadas de relevantes e marginais, respectivamente. Em teoria os parâmetros do modelo efetivo podem ser derivados a partir do fluxo de renormalização do hamiltoniano inicial. Tais cálculos raramente foram feitos para materiais reais, logo se têm de ajustar os parâmetros do modelo efetivo

com os resultados experimentais. Por isso, a relevância ou irrelevância de certas interações é um ponto de controvérsia entre proponentes de diferentes modelos.

Auerbach em *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*[6, páginas 7-8].

A relação de dualidade entre sistemas perturbativos e sistemas não perturbativos está no centro de nosso entendimento e capacidade de solução de problemas de muitos corpos. A procura de pontos fixos no espaço de hamiltonianas através do grupo de renormalização nada mais é que a procura por um sistema de “coordenadas” mais conveniente, um sistema que ressalte as características físicas fundamentais do modelo.

Sistemas de uma dimensão saltam aos olhos nesse rico mar de problemas, primeiro porque em princípio são mais tratáveis analiticamente, em seguida, porque métodos anteriormente usados em sistemas de dimensões maiores não costumam funcionar. As séries perturbativas, em geral, devem ser totalmente somadas, mesmo para valores pequenos das constantes de acoplamento. Isto se manifesta de forma dramática na “catástrofe de ortogonalidade” de Anderson, que diz que um gás de elétrons, submetido a uma perturbação local, tem seu estado fundamental ortogonal ao estado fundamental não perturbado no limite de número de partículas tendendo ao infinito. Na verdade, as excitações tipo elétrons individuais são muitas vezes proibidas energeticamente, o que se manifesta como a separação de spin e carga do sistema¹.

Como colocado na citação do início do capítulo, bosonização tem sido um dos caminhos mais frutíferos usados no tratamento analítico de sistemas fortemente correlacionados em uma dimensão. O outro é a solução exata do modelo, basicamente através de alguma forma do Ansatz de Bethe.

O sucesso da técnica de bosonização se deve ao fato de que alguns sistemas fermiônicos extremamente complexos (não perturbativos) se tornam simples ou até triviais (perturbativos) quando escritos em relação aos campos bosônicos. Historicamente, o método de bosonização foi desenvolvido em 1975, de maneira independente, por Coleman-Mandelstam (teóricos de campos) e Mattis-Luttinger (teóricos de matéria condensada). Eles relacionaram as funções de correlação de férmions de Dirac e campos bosônicos livres. A aplicação do método ao setor de baixa energia do espectro da cadeia de Heisenberg foi imediata, trazendo como grande advento a possibilidade de incluir as interações tipo *forward scattering*, e ainda assim, levar o problema em um gás bosônico. A introdução de termos tipo *back scattering* leva a uma hamiltoniana tipo sine-Gordon, um dos modelos mais estudados em teorias de campo (não surpreendentemente contendo uma solução exata conhecida via *ansatz* de Bethe). De maneira geral, a física de baixas energias de sistemas de 1D é conhecida pelo nome genérico de líquidos de Tomonaga-Luttinger (em contraponto ao líquido de Fermi em dimensões maiores ou iguais a 3).

¹normalmente o termo “transmutação de partículas” é utilizado quando as excitações de baixa energia de um sistema têm características diferentes das partículas constituintes do problema.

O *ansatz* de Bethe compreende um dos possíveis caminhos ao estudo de sistemas exatamente solúveis. Estes correspondem a um conjunto de modelos que apresentam um número infinito de quantidades conservadas e por isso são ditos integráveis. Qualquer um que já tenha visto um diagrama de Poincaré consegue extrapolar a idéia de que o conjunto de hamiltonianas com esta característica tem medida nula no espaço de modelo. Entretanto, muitas vezes estes modelos são atratores no grupo de renormalização, e por isso a citação de Baxter no início do capítulo.

Nesse trabalho procuramos estudar dois dos problemas mais importantes e discutidos da física de sistemas fortemente correlacionados: a cadeia de Heisenberg e a rede de Kondo. Abordaremos o problema da rede de Kondo através de bosonização abeliana e procuraremos entender a física da cadeia de Heisenberg pelo *ansatz* de Bethe. O trabalho foi dividido em duas partes bem distintas, cada uma contemplando um dos temas. O texto procura ser autocontido, apresentando primeiramente os métodos e em seguida a sua aplicação. Quando possível os cálculos foram colocados nos apêndices. Apesar de não serem necessários para a leitura do texto, uma leitura destes apêndices é bastante instrutiva².

Nas duas seções que se seguem vamos apresentar algumas motivações físicas para o estudo desses modelos, procurando, desta forma, introduzir a notação e recapitular um pouco do que se conhece e apresentando algumas perguntas ainda sem resposta que existem sobre esses problemas.

1.1 problema Kondo e a rede de Kondo

In short, the problem is one of considerable complexity. Some insight has been provided by a model due to P. W. Anderson, in which all the levels of the magnetic ion are replaced by a single localized level,....,and the coupling between localized and band levels is reduced to a bare minimum. It is a measure of complexity of problems in which both localized and band features play an important role that even the highly oversimplified Anderson model has failed to yield an exact solution, in spite of its having been subject to an onslaught of theoretical analysis³.

Ashcroft e Mermim em *Solid State Physics* [5, página 687].

A interação entre momentos localizados e bandas condutoras tem uma longa história dentro da matéria condensada. O espalhamento por impurezas não magnéticas em um material leva a uma resistividade que decresce monotonicamente com a temperatura [5, capítulos 16 e 32]. De forma oposta, para impurezas magnéticas, a resistividade atinge um mínimo e, então, passa a crescer monotonicamente em função da temperatura(veja figura 1.1).

²principalmente a renormalização do problema Kondo.

³hoje se conhece a solução exata para o problema Kondo.

Em 1964, J. Kondo[46] demonstrou que a seção de choque do espalhamento por uma impureza magnética diverge nas ordens mais altas de teoria de perturbação. A divergência depende do *kink* no espaço de momentos da distribuição de vetores de onda dos elétrons de condução, sendo assim uma consequência da forma da superfície de Fermi. Na linguagem de grupo de renormalização, o que ocorre é uma passagem do regime de acoplamento fraco, *weak coupling*, para o regime de acoplamento forte, *strong coupling*. Por definição, a temperatura Kondo é a temperatura onde o *cross-over* ocorre (muitas vezes da ordem de 30K). A hamiltoniana considerada por Kondo, para chegar a essas conclusões, tem a forma:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (C_{i,\sigma}^\dagger C_{j,\sigma} + H.c.) + J \vec{S} \cdot \vec{S}^c, \quad (1.1)$$

e é conhecida como hamiltoniana de Kondo. Afortunadamente, o problema de Kondo admite uma solução exata do tipo anstaz de Bethe[3]. Porém, a combinação dos resultados do anstaz de Bethe, de grupo de renormalização e bosonização não foram suficientes para esgotar completamente o problema. Funções de correlação, o problema da “nuvem de Kondo” (veja [7]) e muitos outros detalhes ainda estão em aberto (apesar da forma tão inocente e simples da hamiltoniana de Kondo).

Como veremos, através do método de bosonização, existem duas maneiras de abordar o problema. O primeiro método denominaremos de abordagem de Anderson-Yuval, que é essencialmente um tratamento de grupo de renormalização. O segundo método, chamaremos de abordagem de Emery-Kivelson e corresponde à refermionização do problema no ponto de acoplamento forte (ponto de Toulouse) e à obtenção da física desse ponto do espaço de parâmetros.

Para uma classe de materiais, existe ainda uma segunda transição de fase em função da temperatura. Em torno de uma temperatura característica (em geral da ordem de 10K) começam a surgir correlações quânticas entre as diversas impurezas magnéticas. Quando isso ocorre, a resistividade, que até então aumentava devido ao efeito Kondo, sofre uma queda rápida. Além disso, essa fase apresenta um calor específico muito alto, o que na linguagem da teoria do líquido de Fermi pode ser visto como uma grande massa efetiva do elétron vestido (da ordem de 100 vezes a massa do elétron). Esses compostos são, por isso, conhecidos pela designação geral de férmions pesados (*heavy férmions*).

Finalmente, pode ocorrer uma transição para uma fase supercondutora (em geral a uma temperatura da ordem de 1K). Muitas características dessa fase supercondutora não são compartilhadas pelos supercondutores normais, tais como leis de potência para o calor específico e a condutividade térmica.

Férmions pesados são compostos intermetálicos contendo terras raras ou actínídeos. Pode-se considerar que existem dois tipos de elétrons nesses materiais: elétrons de condução (oriundos de orbitais atômicos s, p e d) e elétrons localizados (de orbitais tipo f). Em geral, a hibridização de elétrons tipo f com os elétrons de condução é muito pequena. Assim, interações eletrônicas entre elétrons do mesmo átomo são a maior escala de energia do problema.

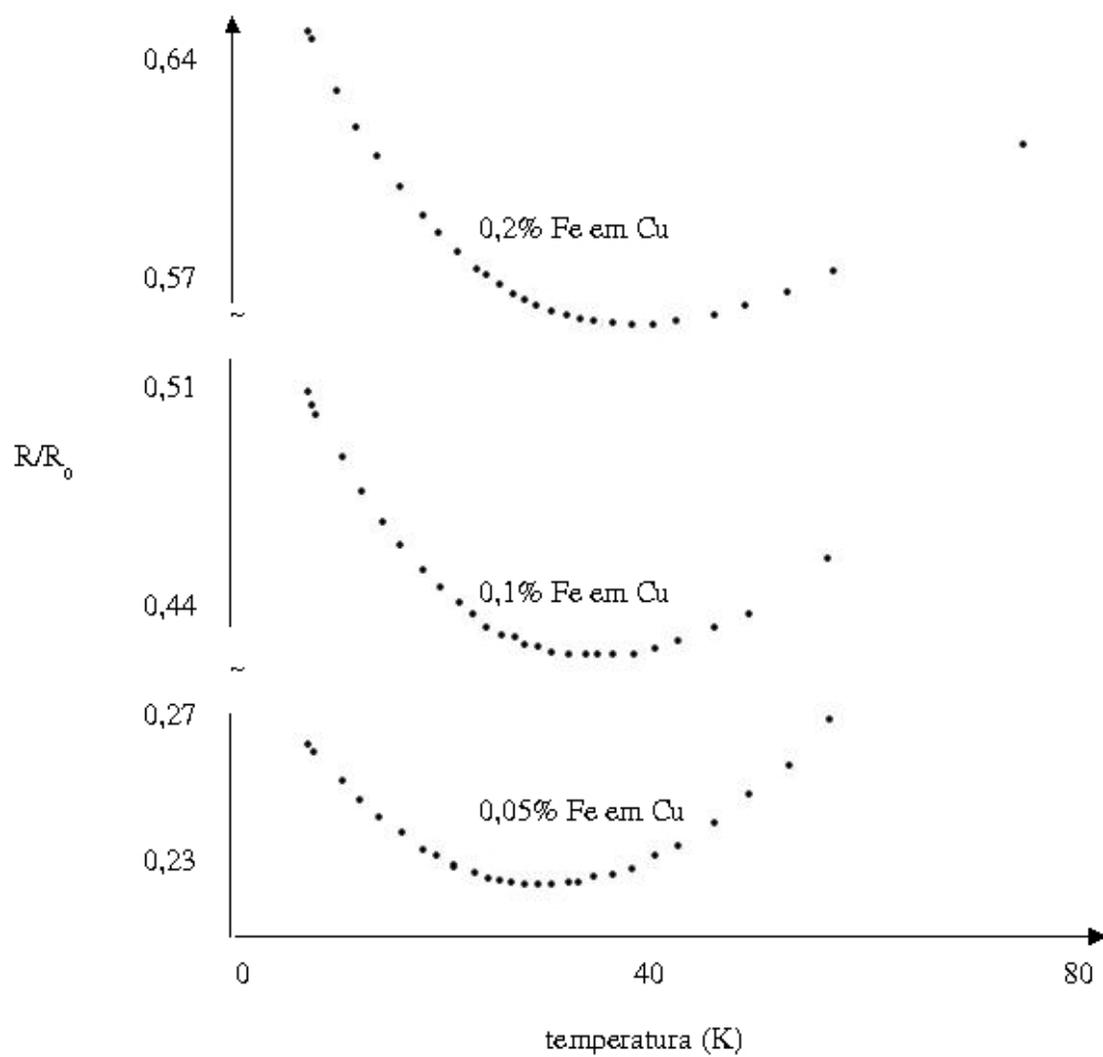


Figura 1.1: curvas experimentais mostrando o aumento da resistividade devido ao efeito Kondo, adaptada da referência [5, página 688].

O modelo de Anderson tenta capturar essa física numa hamiltoniana bem simplificada:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} C_{i,\sigma}^\dagger C_{j,\sigma} + H.c. + \sum_{i\sigma} \varepsilon_f n_{i\sigma}^f \\ + V \sum_{i\sigma} \left(C_{i,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + f_{i,\sigma}^\dagger C_{j,\sigma} \right) + U \sum n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f$$

Como dito na citação do início do parágrafo, apesar de bastante simplificada, a hamiltoniana de Anderson é um grande desafio ao tratamento analítico. Uma das possíveis simplificações do modelo é tomarmos o limite de $U \rightarrow \infty$, o chamado regime Kondo. Nessa situação, a dupla ocupação dos orbitais f aparece apenas como um estado virtual. Usando teoria de perturbação em segunda ordem em V é possível obter a hamiltoniana efetiva:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} C_{i,\sigma}^\dagger C_{j,\sigma} + H.c. + J \sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{S}_j^c, \quad (1.2)$$

conhecida como hamiltoniana da rede de Kondo. Esta é a generalização direta da hamiltoniana de Kondo para um arranjo de spins localizados.

A constante J derivada dessa forma é antiferromagnética ($J > 0$) e inversamente proporcional a U (no caso de níveis f simétricos em relação a energia de Fermi $J = \frac{8V^2}{U}$). Ou seja, o limite de forte interação de Coulomb (sendo U a maior escala de energia do problema) corresponde ao caso de J pequeno da rede de Kondo.

Conforme proposto por Doniach [20], existiriam duas escalas de energia relevantes ao problema: a temperatura Kondo, com uma dependência exponencial da constante de acoplamento J , e a temperatura RKKY, com uma dependência quadrática em J . Se isso for verdade, existiria um valor de J , conhecido como J_c , em que as duas escalas de energia seriam da mesma ordem. Para J menor que J_c a temperatura Kondo é menor que a temperatura RKKY, o que implicaria que o sistema ordena magneticamente antes dos momentos serem suprimidos pelo efeito Kondo. Por outro lado, se T_{Kondo} for maior que T_{RKKY} , os momentos são suprimidos antes mesmo de terem a chance que se ordenarem (veja figura 1.2). Este quadro foi confirmado experimentalmente em compostos sem [68] e com desordem [35].

Em uma dimensão, o modelo já foi estudado de diversas formas: diagonalização exata, campo médio, monte carlo, etc. O principal artigo de revisão sobre a cadeia de Kondo antiferromagnética ($J_K > 0$) é o trabalho Tsunetsugu, Sigrist e Ueda[74]. Nele, o diagrama de fase do estado fundamental (fig. 1.3(a)) é estudado do ponto de vista numérico e através de campo médio. Como dissemos, a principal característica desse modelo é a competição entre dois fenômenos bem distintos: o efeito Kondo, a tendência de formação de singletos entre os spins localizados e os elétrons, e a interação RKKY⁴,

⁴RKKY vem de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida, trabalhando em interações indiretas entre spins nucleares (Ruderman e Kittel), oscilações de Friedel na polarização de spin de elétrons de condução (Yosida) e nas propriedades magnéticas de compostos de terras raras (Kasuya).

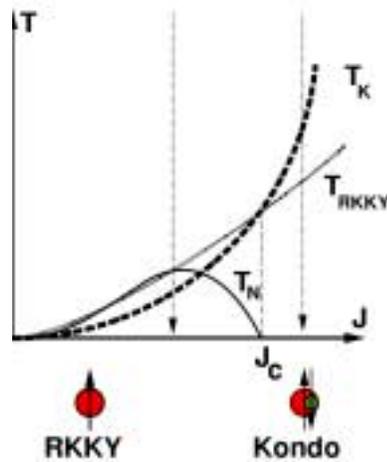


Figura 1.2: diagrama de Doniach (figura adaptada da ref. [13]).

designação geral para os efeitos de correlação entre os spins localizados mediados pelos elétrons.

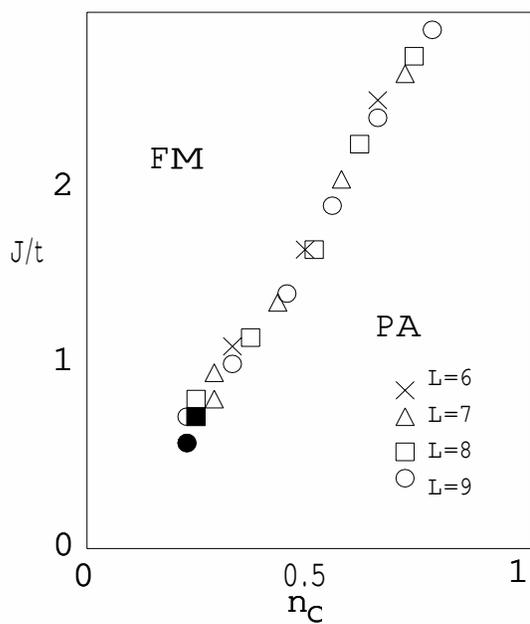
Apesar de conhecido, do ponto de vista numérico, ainda existem muitas perguntas sobre esses diagramas de fase.

Em particular, a estrutura da fase paramagnética da rede antiferro- é muito pouco conhecida, não existindo nenhum tratamento rigoroso para o problema [74, página 821]. Apesar de ser a fase de maior interesse físico do ponto de vista do modelo de Anderson, ela é de difícil caracterização. Citando Le Hur:

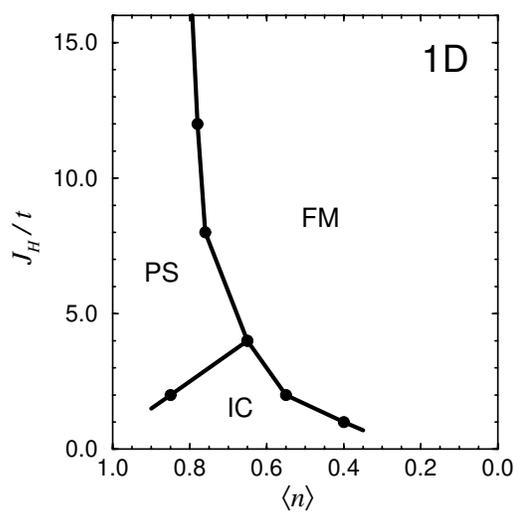
We mention that all the difficulty with this model is to include collective effects occurring in the spin array at low energy. Indeed, at high energy, the magnetic impurities behave like independent scattering centers.

K. Le Hur em *Metal-insulator transition in the one-dimensional kondo lattice model*[48].

Quando $J_K = 0$, a banda de condução está totalmente desacoplada dos spins localizados e o sistema total é altamente degenerado. Nessa situação temos um metal paramagnético, ou seja, não existem *gaps* de carga ou spin. Quando J_K é diferente de 0, essa degenerescência é levantada (pelo menos parcialmente), criando uma dinâmica muito complicada no sistema. A idéia de que toda a fase paramagnética seja uma simples repetição do cenário de $J=0$ foi colocada em dúvida recentemente. Através da bosonização do problema, foi sugerida a existência de uma fase metálica que contém um *gap* de spin [91, 90, 48]. Estudos numéricos não indicam a formação desse *gap*[74]. Porém, devemos ter sempre em mente que o enorme espaço de Hilbert a ser analisado, inviabiliza um estudo de *finite size scaling* conclusivo para o assunto.



(a) caso antiferromagnético [74]



(b) caso ferromagnético [19]

Figura 1.3: diagramas de fase da rede de Kondo obtido por métodos numéricos. FM denota ferromagnetismo, PM paramagnetismo, IC correlações incommensuradas e PS separação de fase. $n_c = 1$ corresponde a banda semi-preenchida.

A transição ferro-para, foi estudada por Honner e Gulácsi através de bosonização[36]. Contudo, a natureza da transição ainda é desconhecida. Em última análise essa transição é controlada pela competição entre os dois fenômenos físicos que existem no problema da rede: o efeito Kondo e as interações RKKY. Apesar dessa visão física muito clara são poucos os cálculos analíticos que a confirmam.

Um dos grandes sucessos de técnicas de teoria de campo aplicadas a cadeia de Kondo foi obtido por Tsvelik[75] ao tratar o caso da banda de condução semi-preenchida, derivando a fase de líquido de spin.

Até agora, apenas falamos da rede de Kondo antiferromagnética⁵. Supostamente, a rede de Kondo ferromagnética tem uma física muito diferente da rede antiferro-, já que para ela não haveria o efeito Kondo. Ela constitui um dos principais modelos usados no estudo de materiais que apresentam o fenômeno de magneto resistência colossal. Em geral, esses materiais são óxidos metálicos ferromagnéticos, tipicamente da forma $R_{1-x}X_xMnO_3$, onde $R = La, Pr, Nd$ e $X = Sr, Ca, Ba, Pb$. Acredita-se que o mecanismo de ordenamento dos spins é o “*double exchange*”, ou seja, o ordenamento permite o aumento da energia cinética dos portadores. Este modelo foi estudado numericamente por Dagotto et al. [19]. Nos seus resultados, além da fase ordenada (FM), existe uma região do diagrama com correlações de curto alcance (IC). É sugerido que a magnetização da cadeia cresce monotonicamente na região IC até a borda da região FM, contudo as funções de correlação spin-spin dessa região incomensurada (fig. 1.3(b)) são idênticas as correlações da região paramagnética do diagrama antiferro- (fig. 1.3(a))⁶. Os resultados numéricos de Dagotto et al. mostram que qualitativamente não há diferenças entre uma rede de spins 1/2, 3/2 ou clássicos. Um estudo por campo médio da rede ferromagnética com spin 3/2 [38] propõe que a região IC corresponde a uma fase espiral, que é exatamente o que se obtém para a região paramagnética da cadeia antiferro- de spin 1/2 [74]. Tudo isso parece indicar que existem mais semelhanças entre as redes ferro- e antiferro- do que se presume a princípio. Isso já havia sido apontado por Honner e Gulácsi [37] através de sua análise por bosonização.

Até o momento não existe uma solução exata, tipo *ansatz* de Bethe, para o problema da rede de Kondo, e há boas razões para que nunca haja uma. O problema Kondo admite uma solução exata [3], porque pode-se usar um sistema de coordenadas esféricas centrada no spin localizado (que chamaremos de agora em diante de impureza). Nesse sistema o problema se reduz a um sistema unidimensional (“ondas eletrônicas” emergentes e incidentes na impureza). Isso obviamente não pode ser feito na rede de Kondo, já que não existe um sistema de coordenada preferencial como no caso da impureza.

⁵simplesmente porque começamos a partir do modelo de Anderson.

⁶veja as figuras 33 da referência [74] e 17 da referência [19].

1.2 hamiltoniano de Heisenberg

O hamiltoniano de Heisenberg é o modelo fundamental para o magnetismo quântico[6]. Ele pode ser derivado como o limite altamente repulsivo do modelo de Hubbard de banda semi-cheia. Apesar de incluir somente os graus de liberdade de spin, tanto o estado fundamental como os estados excitados são altamente correlacionados. Isto faz com que tratamentos tipo campo médio sejam inapropriados, tornando o estudo desses sistemas muito interessante e não trivial. Em sua forma mais geral o hamiltoniano de Heisenberg é escrito como:

$$H = \sum_{i=1}^N J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z$$

Como a interação é anisotrópica em todas as componentes de spin, este modelo também é conhecido como modelo XYZ. Em nosso trabalho vamos considerar o caso particular $J_x = J_y$. Este é conhecido como modelo XXZ, e como veremos, é equivalente ao modelo de férmions sem spin com interação de primeiros vizinhos. O modelo de Heisenberg pertence a uma classe de hamiltonianos conhecida como integrável. De certa forma ele constitui o problema mais simples em que podemos aplicar o *ansatz* de Bethe e o método do espalhamento inverso quântico.

1.3 objetivos iniciais

A relevância do estudo da rede de Kondo é mais que óbvia, constituindo ainda um problema em aberto para o tratamento analítico. A questão que motivou o início desse trabalho foi entender os diagramas de fase do estado fundamental, que haviam sido obtidos numericamente.

No capítulo que se segue, vamos tentar responder às seguintes perguntas para a cadeia de Kondo através do uso de bosonização abeliana:

1. como se dá a competição entre a tendência do ordenamento da rede (interação RKKY) e o efeito Kondo?
2. como entender o diagrama de fase que é conhecido numericamente?
3. qual a natureza da transição de fase?
4. existe *gap* de spin quando estamos fora da situação de banda semi-preenchida?

O desenvolvimento do problema nos levou a estudar a teoria de um gás de Coulomb generalizado. Usaremos esse mapa para aprender como aplicar o grupo de renormalização do problema da rede de Kondo e entender a dinâmica dos spins.

A motivação inicial para o estudo da cadeia de Heisenberg era tentar estudar a dinâmica de tal modelo. Havíamos proposto, inicialmente, usar o *ansatz* de Bethe para construir estados localizados e estudar a dinâmica de relaxação. Nesse sentido os resultados que obtivemos no estudo foram negativos. Não conseguimos construir todas as funções de onda através do *ansatz*, o que impossibilitou o desenvolvimento da parte numérica do projeto. As questões que tentaremos abordar do ponto de vista analítico são:

1. as soluções de Bethe são completas para sistemas finitos?
2. será que podemos melhorar nosso entendimento do grupo de renormalização da matriz de densidade através das soluções do *ansatz*?

A derivação do *ansatz* funcional que apresentamos no capítulo 3 é bastante intuitiva e original. Em seguida, apresentamos o *ansatz* de Bethe algébrico e estudamos as soluções das equações no limite termodinâmico e em sistemas finitos⁷. Finalmente, apresentamos de forma resumida o grupo de renormalização da matriz de densidade. Desenvolvido nos últimos anos, esse é um dos métodos numéricos mais importantes para estudos de sistemas de baixa dimensionalidade. Procuraremos mostrar como entender esse método à luz da experiência que adquirimos com a construção das funções de onda do modelo de Heisenberg.

De uma maneira geral, este texto representa uma síntese de vários métodos analíticos importantes para a física de sistemas fortemente correlacionados: bosonização, *ansatz* de Bethe e o grupo de renormalização, apresentando de forma concreta esses métodos no estudo da rede de Kondo e a cadeia de Heisenberg.

⁷com principal atenção nos métodos de construção das funções de onda.

Capítulo 2

Bosonização Abeliana e a Rede de Kondo

2.1 bosonização abeliana

Bosonização, como o próprio nome diz, se refere à tentativa de descrever um sistema fermiônico em termos de suas excitações bosônicas. Existem muitos textos sobre este assunto e um igual número de notações para o tema. Para não fugirmos à regra, neste capítulo faremos o desenvolvimento da técnica de bosonização seguindo uma mistura da notação de Schulz [62], de Zachar et al. [90, 91] e do artigo de revisão de Deft-Schoeller[78]. O texto de revisão clássico que deve ser citado é o artigo de Emery[22]. Uma visão mais ampla da teoria (que inclui o formalismo de bosonização não abeliana) pode ser encontrado em [30] juntamente com aplicações a diversos sistemas. Este parágrafo de forma alguma é uma revisão (ou mesmo uma visão geral) do assunto. Nossa proposta é apresentar os ingredientes mínimos necessários para o desenvolvimento do problema da rede de Kondo no contexto da bosonização abeliana, desenvolvendo o conjunto de notações e convenções usados posteriormente. Para uma verdadeira introdução à bosonização, o leitor deve se referir à bibliografia citada acima.

2.1.1 hamiltoniana livre

Existem várias formas de construir as “identidades bosônicas” (relação entre o campo fermiônico e o campo bosônico) em 1D. Poderíamos começar com uma lagrangeana bosônica relativística livre e calcular as funções de correlação deste modelo. Em seguida calcularíamos as funções de correlação de férmions de Dirac livres e encontraríamos, de maneira direta, uma relação exponencial entre as funções dos férmions e as dos bósons[12]. Isso nos levaria naturalmente a postular que campos fermiônicos poderiam ser escritos como exponenciais de campos bosônicos. Este é o caminho usado por muitos teóricos de campos, contudo é bem mais natural para os teóricos da matéria condensada construir as identidades bosônicas a partir de uma teoria de rede.

Apesar de termos nos referido a uma hamiltoniana de Dirac (o que implicaria em uma relação

de dispersão linear), as identidades bosônicas são válidas para qualquer hamiltoniana fermiônica em 1D[78], sendo uma identidade de operadores e não uma fortuita coincidência.

Consideremos o hamiltoniano fermiônico livre tipo *tight-binding*:

$$H_0 = -t \sum_{i,\sigma} C_{i+1,\sigma}^\dagger C_{i,\sigma} + C_{i,\sigma}^\dagger C_{i+1,\sigma}.$$

Este é o ponto de partida para o estudo da rede de Kondo em seu limite com maior sentido físico, $J_{kondo} \ll t^1$.

Por definição a transformada de Fourier dos operadores fermiônicos é:

$$\begin{cases} C_{p,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-ipj} C_{j,\sigma}^\dagger \\ C_{j,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{ipj} C_{p,\sigma}^\dagger \end{cases},$$

onde N é o número de sítios. Na representação de espaço de momentos, a hamiltoniana assume sua forma diagonal:

$$H_0 = -2t \sum_{p,\sigma} \cos(p) C_{p,\sigma}^\dagger C_{p,\sigma}$$

Note que p e j são adimensionais. Introduzimos, então, o parâmetro de rede a e assim definimos:

$$\begin{cases} p = k.a \\ x = j.a \end{cases}.$$

Com isso re-escrevemos a hamiltoniana como:

$$H_0 = -2t \sum_{k,\sigma} \cos(ka) C_{k,\sigma}^\dagger C_{k,\sigma}$$

2.1.2 férmions de Dirac

Se nos restringirmos apenas aos fenômenos de baixa energia (excitações fermiônicas próximas a superfície de Fermi), podemos linearizar a hamiltoniana e obter, assim, férmions de Dirac (com relação de dispersão linear) em torno dos pontos de Fermi: $p_F = \pm \frac{\pi}{2} n_c$ ou $k_F = \pm \frac{\pi}{2a} n_c$ onde $n_c \in [0, 1]$. Definindo: $p = p_F + \delta p$ para $p > 0$ e $p = -p_F + \delta p$ para $p < 0$

¹a representação bosônica é válida sempre, e não apenas neste limite.

$$H_0 = -2t \sum_{\delta p, \sigma} \cos(p_F + \delta p) C_{p, \sigma}^\dagger C_{p, \sigma} + \cos(-p_F + \delta p) C_{p, \sigma}^\dagger C_{p, \sigma}$$

$$H_0 \approx E_F + 2t \sin(p_F) \sum_{\delta p, \sigma} \pm \delta p C_{\pm p_F + \delta p, \sigma}^\dagger C_{\pm p_F + \delta p, \sigma}$$

Para baixas energias, os canais permitidos para espalhamentos são muito restritos, o que nos leva a dividir os operadores fermiônicos em quatro espécies: operadores esquerdos e direitos (*left/right movers*) e spin para cima e para baixo (up/down).

$$\begin{aligned} R_{p, \sigma} &= C_{p_F + \delta p, \sigma} \\ L_{p, \sigma} &= C_{-p_F + \delta p, \sigma} \end{aligned}$$

Definindo a velocidade de Fermi como $v_F = 2ta \sin(p_F)$, a hamiltoniana efetiva para baixas energias se torna:

$$H_0 \approx E_F + v_F \sum_{k, \sigma} k R_{k, \sigma}^\dagger R_{k, \sigma} - v_F \sum_{k, \sigma} k L_{k, \sigma}^\dagger L_{k, \sigma}$$

O limite contínuo de nossa teoria é obtido a partir dos “campos fermiônicos”:

$$\psi_{R, \sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} R_{k, \sigma}$$

$$\psi_{L, \sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} L_{k, \sigma}$$

onde usamos $L = Na$ e tomamos o limite de $L \rightarrow \infty$. A partir deles é trivial mostrar as relações de comutação fermiônicas usuais:

$$\left\{ \psi_\eta(x), \psi_{\eta'}^\dagger(y) \right\} = \delta(y - x) \delta_{\eta, \eta'},$$

e que H_0 é a hamiltonia livre de Dirac para as quatro espécies fermiônicas:

$$H_0 = -iv_F \sum_\sigma \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \left(\psi_{R, \sigma}^\dagger(x) \partial_x \psi_{R, \sigma}(x) - \psi_{L, \sigma}^\dagger(x) \partial_x \psi_{L, \sigma}(x) \right).$$

A inclusão de interações, em geral, é feita através de termos que usam as densidades fermiônicas (correntes, na linguagem de teoria de campo, $J_{\mu\lambda, \sigma}(x) = \psi_{\mu, \sigma}^\dagger(x) \psi_{\lambda, \sigma}(x)$)[63]:

$$H_{I\sigma}^{(2)} = v_F g_1 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \left(\psi_{R,\sigma}^\dagger(x) \psi_{L,\sigma}(x) \psi_{L,-\sigma}^\dagger(x) \psi_{R,-\sigma}(x) \right) \text{ (back scattering)}$$

$$H_I^{(1,c)} = g_{2,c} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx (J_{R\uparrow}(x) + J_{R\downarrow}(x)) (J_{L\uparrow}(x) + J_{L\downarrow}(x)) \text{ (foward scattering)}$$

$$H_I^{(1,s)} = g_{2,s} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx (J_{R\uparrow}(x) - J_{R\downarrow}(x)) (J_{L\uparrow}(x) - J_{L\downarrow}(x)) \text{ (foward scattering)}$$

$$H_{I\sigma}^{(3)} = \frac{v_F g_3}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \left(\psi_{R,\sigma}^\dagger(x) \psi_{R,-\sigma}^\dagger(x) \psi_{L,\sigma}(x) \psi_{L,-\sigma}(x) + H.C. \right) \text{ (umklapp)}$$

$$H_I^{(4,c)} = \frac{v_F g_{4,c}}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \left[(J_{R\uparrow}(x) + J_{R\downarrow}(x))^2 + (J_{L\uparrow}(x) + J_{L\downarrow}(x))^2 \right] \text{ (foward scattering)}$$

$$H_I^{(4,s)} = \frac{v_F g_{4,s}}{2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \left[(J_{R\uparrow}(x) - J_{R\downarrow}(x))^2 + (J_{L\uparrow}(x) - J_{L\downarrow}(x))^2 \right] \text{ (foward scattering)},$$

As interações tipo *foward-scattering* apenas renormalizam a velocidade de Fermi do problema. Por outro lado, os termos de *back-scattering* e os de *umklapp* podem levar à formação de um *gap* no setor de spin e um no setor de carga, respectivamente[63, 30].

2.1.3 operadores partícula-buraco

Como havíamos linearizado a hamiltoniana em torno da superfície de Fermi, é evidente que o mar de Dirac está totalmente preenchido, caracterizando, assim, o estado de vácuo fermiônico.

Excitações desse mar correspondem aos férmions com energia maior que a energia de Fermi e “buracos” fermiônicos com energia menor.

Excitações partícula-buraco têm especial importância em sistemas de baixa dimensionalidade. Como a superfície de Fermi é reduzida, as excitações dos férmions podem gerar pares partícula-buraco altamente correlacionados. Para sistemas unidimensionais, as pseudopartículas, criadas desta forma, obedecem a uma estrutura bosônica (ou quase bosônica). Assim, se definirmos:

$$\begin{cases} \rho_R(q, \sigma) = \sum_k R_{k+q, \sigma}^\dagger R_{k, \sigma} \quad , q \neq 0 \\ \rho_L(q, \sigma) = \sum_k L_{k+q, \sigma}^\dagger L_{k, \sigma} \end{cases} ,$$

podemos mostrar que (o único cuidado que deve ser tomado é não se esquecer de colocar em ordem normal os operadores antes de subtrair os infinitos) [62]:

$$\left\{ \begin{array}{l} [\rho_R(-p, \sigma), \rho_R(q, s)] = \delta_{p,q} \delta_{\sigma,s} \frac{qL}{2\pi} \quad , \quad p \neq q > 0 \\ [\rho_L(p, \sigma), \rho_L(-q, s)] = \delta_{p,q} \delta_{\sigma,s} \frac{qL}{2\pi} \\ [\rho_L(p, \sigma), \rho_R(q, s)] = 0 \end{array} \right. \quad (2.1)$$

Com isso podemos definir operadores que obedecem às relações bosônicas usuais. Para os “*right movers*” escrevemos:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{q\sigma}^\dagger = \frac{i}{\sqrt{n_q}} \rho_R(q, \sigma) \\ a_{q\sigma} = \frac{-i}{\sqrt{n_q}} \rho_R(-q, \sigma) \end{array} \right. ,$$

onde $q > 0$ e $n_q = \frac{L}{2\pi} q$. De forma análoga para os “*left movers*”:

$$\left\{ \begin{array}{l} b_{q\sigma}^\dagger = \frac{i}{\sqrt{n_q}} \rho_L(-q, \sigma) \\ b_{q\sigma} = \frac{-i}{\sqrt{n_q}} \rho_L(q, \sigma) \end{array} \right. .$$

A partir de (2.1) é imediato mostrar as relações de comutação bosônicas:

$$\left\{ \begin{array}{l} [a_{p\sigma}, a_{q\sigma}^\dagger] = \delta_{p,q} \delta_{\sigma,s} \\ [b_{p\sigma}, b_{q\sigma}^\dagger] = \delta_{p,q} \delta_{\sigma,s} \\ [a_{p\sigma}, b_{q\sigma}] = 0 \end{array} \right. .$$

Os operadores $a_{p\sigma}$ e $b_{p\sigma}$ são os operadores bosônicos de aniquilação. Os vácuos correspondem aos estados sem excitações partícula-buraco de N_i^α partículas ($|N_1^{L\uparrow}, N_2^{R\uparrow}, N_3^{L\downarrow}, N_4^{R\downarrow}\rangle \equiv |\vec{N}\rangle_0$).

Das definições de $\psi(x)$ e dos operadores bosônicos é trivial (mas não imediato) mostrarmos:

$$\left\{ \begin{array}{l} [\psi_{R,\sigma}(x), a_{q,\sigma'}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'} \frac{i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} \psi_{R,\sigma}(x) \\ [\psi_{R,\sigma}(x), a_{q,\sigma}] = \delta_{\sigma\sigma'} \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{iqx} \psi_{R,\sigma}(x) \\ [\psi_{L,\sigma}(x), b_{q,\sigma}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'} \frac{i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} \psi_{L,\sigma}(x) \\ [\psi_{L,\sigma}(x), b_{q,\sigma}] = \delta_{\sigma\sigma'} \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{iqx} \psi_{L,\sigma}(x) \end{array} \right. .$$

Como a e b aniquilam $|\vec{N}\rangle_0$, vemos que $\psi(x)|\vec{N}\rangle_0$ é autovetor de $a_{q,\sigma}$ ($b_{q,\sigma}$) e, portanto, admite uma representação tipo estado coerente. Como $\psi(x)$ remove um férmion do problema, somos forçados, neste instante, a introduzir o ingrediente final à bosonização: os fatores de Klein.

2.1.4 fatores de Klein

Os fatores de Klein (F_α) são responsáveis por levar um sub-espço de Hilbert de N partículas em um subespço de $N - 1$. Além de conectarem os sub-espços de Hilbert, os fatores de Klein devem também assegurar que os operadores de campo de férmions de diferentes espécies anticomutem. Por estas razões, exigimos que eles tenham as seguintes propriedades:

$$[a_{q,\sigma}, F_{R,\sigma'}^\dagger] = [a_{q,\sigma}, F_{R,\sigma'}] = 0$$

$$[b_{q,\sigma}, F_{L,\sigma'}^\dagger] = [b_{q,\sigma}, F_{L,\sigma'}] = 0$$

$$\begin{cases} F_{R,\sigma}^\dagger |\vec{N}\rangle = f(a_\sigma^\dagger) R_\sigma^\dagger |\vec{N}\rangle_0 = f(a_\sigma^\dagger) \hat{T}_R |\overline{N-1}\rangle_0 \\ F_{L,\sigma}^\dagger |\vec{N}\rangle = f(b_\sigma^\dagger) L_\sigma^\dagger |\vec{N}\rangle_0 = f(b_\sigma^\dagger) \hat{T}_L |\overline{N-1}\rangle_0 \end{cases},$$

onde $|\vec{N}\rangle$ é um estado arbitrário de N partículas, f uma função de a_σ^\dagger (ou b_σ^\dagger) e $\hat{T}_{R/L} = \pm 1$, dependendo do número de transposições de operadores fermiônicos. Destas condições podemos mostrar que:

$$\{F_\alpha^\dagger, F_{\alpha'}\} = 2\delta_{\alpha\alpha'} \quad \{F_\alpha, F_{\alpha'}\} = 0$$

Se o número de férmions de cada espécie se conserva (por exemplo os canais de espalhamento são simétricos), podemos considerar os fatores de Klein como operadores auto-adjuntos e assim mapeá-los em uma simples álgebra de Clifford[63]:

$$F_{R\sigma}^\dagger = F_{R\sigma} \rightarrow \eta_{R\sigma}, \quad F_{L\sigma}^\dagger = F_{L\sigma} \rightarrow \eta_{L\sigma}$$

$$\{\eta_{R\sigma}, \eta_{R\sigma'}\} = \{\eta_{L\sigma}, \eta_{L\sigma'}\} = 2\delta_{\sigma\sigma'} \quad \{\eta_{R\sigma}, \eta_{L\sigma'}\} = 0$$

Uma representação fiel dessa álgebra, em termos das matrizes de Pauli, é dada por:

$$\begin{aligned} \eta_{R\uparrow} &= \sigma^x \otimes \sigma^x & \eta_{R\downarrow} &= \sigma^z \otimes \sigma^x \\ \eta_{L\uparrow} &= \sigma^y \otimes \sigma^x & \eta_{L\downarrow} &= 1 \otimes \sigma^y \end{aligned}.$$

O espaço formado pelo produto tensorial do espaço de Hilbert das excitações bosônicas e do espaço

de Hilbert da álgebra de Clifford dos fatores de Klein é maior que o espaço fermiônico com número de férmions constante. Para uma hamiltoniana que conserva o número de partículas de cada espécie fermiônica, devemos escolher auto-estados dos produtos de fatores Klein que aparecem na hamiltoniana. Isto equivale a uma escolha de Gauge do problema. Se um vetor comum puder ser escolhido para todos os termos da hamiltoniana, então podemos esquecer da existência desses operadores e nos restringir à análise das excitações bosônicas.

2.1.5 identidades bosônicas (ou Fórmula de Mandelstam)

Voltando a $\psi(x) \left| \vec{N} \right\rangle_0$, escrevemos que:

$$\psi_{R,\sigma}(x) \left| \vec{N} \right\rangle_0 = \lambda_{R,\sigma}(x) e^{\sum_{q>0} \frac{i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} a_{q,\sigma}^\dagger} F_{R,\sigma}^\dagger \left| \vec{N} \right\rangle_0$$

$$\psi_{L,\sigma}(x) \left| \vec{N} \right\rangle_0 = \lambda_{L,\sigma}(x) e^{\sum_{q>0} \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{iqx} b_{q,\sigma}^\dagger} F_{L,\sigma}^\dagger \left| \vec{N} \right\rangle_0,$$

onde $\lambda(x)$ é uma fase que ainda precisa ser determinada.

$${}_0 \langle \vec{N} | F_{L,\sigma}^\dagger \psi_{L,\sigma}(x) \left| \vec{N} \right\rangle_0 = \lambda_{L,\sigma}(x)$$

Por outro lado, abrindo nas componentes de Fourier $\psi_{L,\sigma}(x)$, vemos que:

$${}_0 \langle \vec{N} | F_{L,\sigma}^\dagger \psi_{L,\sigma}(x) \left| \vec{N} \right\rangle_0 = \sqrt{\frac{2\pi}{L}} e^{-i\frac{2\pi}{L} N_{L,\sigma} x} = \lambda_{L,\sigma}(x).$$

No limite de $L \rightarrow \infty$, obtemos simplesmente que:

$$\lambda_{L,\sigma}(x) = \sqrt{\frac{2\pi}{L}}.$$

Para o caso geral, devemos assumir que um estado genérico $\left| \vec{N} \right\rangle$ pode ser escrito como a ação de uma função de $f(a_{q,\sigma}, a_{q,\sigma}^\dagger, b_{q,\sigma}, b_{q,\sigma}^\dagger)$ agindo sobre o estado $\left| \vec{N} \right\rangle_0$. Esta afirmação pode ser demonstrada rigorosamente (remetemos o leitor interessado ao texto [78, pg. 14]). Usando as identidades (A.2) e (A.3) do apêndice A, temos que:

$$\psi_{L,\sigma}(x) f(b_{\sigma'}^\dagger) = f\left(b_{\sigma'}^\dagger - \delta_{\sigma\sigma'} \frac{i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx}\right) \psi_{L,\sigma}(x),$$

e que:

$$f\left(b_{\sigma'}^\dagger - \delta_{\sigma\sigma'} \frac{i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx}\right) = e^{\sum \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} b_{q,\sigma}} f(b_{\sigma'}^\dagger) e^{\sum \frac{i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} b_{q,\sigma}}.$$

Com isso, e usando os resultados anteriores:

$$\begin{aligned}
\psi_{L,\sigma}(x) \left| \vec{N} \right\rangle &= \psi_{L,\sigma}(x) f \left(b_{\sigma'}^\dagger \right) \left| \vec{N} \right\rangle_0 \\
&= f \left(b_{\sigma'}^\dagger - \delta_{\sigma\sigma'} \frac{i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} \right) \psi_{L,\sigma}(x) \left| \vec{N} \right\rangle_0 \\
&= \sqrt{\frac{2\pi}{L}} F_{L,\sigma} e^{\sum_{q>0} \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{iqx} b_{q,\sigma}^\dagger} f \left(b_{\sigma'}^\dagger - \delta_{\sigma\sigma'} \frac{i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} \right) \left| \vec{N} \right\rangle_0 \\
&= \sqrt{\frac{2\pi}{L}} F_{L,\sigma} e^{\sum_{q>0} \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{iqx} b_{q,\sigma}^\dagger} e^{\sum \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} b_{q,\sigma}} \left| \vec{N} \right\rangle
\end{aligned}$$

ou seja:

$$\begin{aligned}
\psi_{L,\sigma}(x) &= \sqrt{\frac{2\pi}{L}} F_{L,\sigma} e^{\sum_{q>0} \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{iqx} b_{q,\sigma}^\dagger} e^{\sum \frac{-i}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} b_{q,\sigma}} \\
&= \frac{F_{L,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i \sum_{q>0} \left(\frac{1}{\sqrt{n_q}} e^{iqx} b_{q,\sigma}^\dagger + \frac{1}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} b_{q,\sigma} \right)} e^{-i \frac{2\pi}{L} N_{L\sigma} x}
\end{aligned}$$

onde usamos que:

$$\left[\sum_{q>0} \frac{e^{-iqx} b_{q,\sigma}}{\sqrt{n_q}} e^{-2\pi\alpha q}, \sum_{k>0} \frac{e^{ikx'} b_{k,\sigma'}^\dagger}{\sqrt{n_k}} e^{-2\pi\alpha k} \right] = -\delta_{\sigma,\sigma'} \ln \left[i \frac{2\pi}{L} (x - x' - i2\pi\alpha) \right]$$

Se o número de férmions de cada espécie se conserva, então $k_F = \frac{\pi n_c}{2a} = \frac{2\pi}{L} N_{L\sigma}$:

$$\psi_{L,\sigma}(x) = \frac{F_{L,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i \sum_{q>0} \left(\frac{1}{\sqrt{n_q}} e^{iqx} b_{q,\sigma}^\dagger + \frac{1}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} b_{q,\sigma} \right) - ik_F x} \quad (2.2)$$

De forma análoga, para os *right movers*, obtemos:

$$\psi_{R,\sigma}(x) = \frac{F_{R,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i \sum_{q>0} \left(\frac{1}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} a_{q,\sigma}^\dagger + \frac{1}{\sqrt{n_q}} e^{-iqx} a_{q,\sigma} \right) + ik_F x} \quad (2.3)$$

Estamos em posição de definir os operadores de campo bosônico:

$$\begin{cases} \phi_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{q>0} \left(\frac{e^{-iqx}}{\sqrt{q}} a_{q,\sigma}^\dagger + \frac{e^{iqx}}{\sqrt{q}} a_{q,\sigma} \right) e^{-2\pi\alpha q} \\ \varphi_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2L}} \sum_{q>0} \left(\frac{e^{iqx}}{\sqrt{q}} b_{q,\sigma}^\dagger + \frac{e^{-iqx}}{\sqrt{q}} b_{q,\sigma} \right) e^{-2\pi\alpha q} \end{cases}, \quad (2.4)$$

onde introduzimos o *cut-off* α .

Normalmente *cut-offs* em matéria condensada estão ligados ao parâmetro de rede do problema, porém aqui a situação é bem distinta. Em bosonização, α está ligado a uma largura de banda efetiva dos bósons, ou seja, a excitações de maior energia disponíveis na nossa representação. Da construção

que fizemos, vemos que α tem de ser da ordem de $\frac{1}{k_F} = \frac{a}{p_F}$, já que para $q > k_F$ começamos a ter inconsistências na separação das espécies fermiônicas.

Em função dessas definições re-escrevemos 2.2 e 2.3 como:

$$\begin{aligned}\psi_{R,\sigma}(x) &= \frac{F_{R,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{2i\sqrt{\pi}\phi_\sigma(x) + ik_F x} \\ \psi_{L,\sigma}(x) &= \frac{F_{L,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-2i\sqrt{\pi}\phi_\sigma(x) - ik_F x}\end{aligned}$$

É trivial demonstrar que $[\phi_\sigma(x), \varphi_{\sigma'}(y)] = 0$, contudo os comutadores $[\phi_\sigma(x), \phi_{\sigma'}(y)]$ e $[\varphi_\sigma(x), \varphi_{\sigma'}(y)]$ precisam de um pouco mais de trabalho:

$$[\phi_\sigma(x), \phi_{\sigma'}(y)] = \frac{i}{L} \sum_{q>0} \frac{e^{-2\pi\alpha q}}{q} \sin[q(x-y)]$$

Se definirmos $\alpha' = \frac{\alpha}{L}$ e $\beta = \frac{2\pi}{L}(x-y)$ (note que $|\beta| < 2\pi$), sem perda de generalidade, consideramos $x-y > 0$ e usando [32, pg. 41]:

$$\begin{aligned}[\phi_\sigma(x), \phi_{\sigma'}(y)] &= \frac{i}{\pi} \sum_{n>0} \frac{(e^{-\alpha'})^n}{n} \sin[n\beta] \delta_{\sigma\sigma'} \\ &= \frac{i}{\pi} \arctan \left[\frac{e^{-\alpha'} \sin \beta}{1 - e^{-\alpha'} \cos \beta} \right] \delta_{\sigma\sigma'} \\ &= \frac{i}{\pi} \arctan \left[\frac{e^{-\frac{2\pi\alpha}{L}} \sin \left[\frac{2\pi}{L}(x-y) \right]}{1 - e^{-\frac{2\pi\alpha}{L}} \cos \left[\frac{2\pi}{L}(x-y) \right]} \right] \delta_{\sigma\sigma'}\end{aligned}$$

Em seguida, expandimos em primeira ordem em $\frac{1}{L}$ e consideramos $L \gg x-y$:

$$[\phi_\sigma(x), \phi_{\sigma'}(y)] = \frac{i}{2\pi} \arctan \left(\frac{x-y}{2\pi\alpha} \right) - \frac{4\pi^2 i}{L} \frac{\alpha^2}{x-y} \delta_{\sigma\sigma'}.$$

No limite de $L \rightarrow \infty$:

$$[\phi_\sigma(x), \phi_{\sigma'}(y)] = \frac{i}{2\pi} \arctan \left(\frac{x-y}{2\pi\alpha} \right) \delta_{\sigma\sigma'}.$$

Finalmente, tomando $\alpha \rightarrow 0$:

$$[\phi_\sigma(x), \phi_{\sigma'}(y)] = \frac{i}{4} \Xi(x-y) \delta_{\sigma\sigma'}$$

onde $\Xi(x-y)$ é a função sinal (definida no apêndice A).

De maneira análoga:

$$[\varphi_\sigma(x), \varphi_{\sigma'}(y)] = -\frac{i}{4} \Xi(x-y) \delta_{\sigma\sigma'}$$

Se definirmos o campo bosônico $\hat{\phi}(x)$ e o campo dual $\hat{\theta}(x)$ como:

$$\begin{cases} \hat{\phi}_\sigma(x) = \phi_\sigma(x) + \varphi_\sigma(x) \\ \hat{\theta}_\sigma(x) = \varphi_\sigma(x) - \phi_\sigma(x) \end{cases}, \quad (2.5)$$

obtemos as relações de comutação:

$$\left[\hat{\phi}_\sigma(x), \hat{\theta}_{\sigma'}(y) \right] = -\frac{i}{2} \Xi(x-y) \delta_{\sigma\sigma'}.$$

Por definição o operador de campo de momentos é:

$$\hat{\Pi}_\sigma(x) = \partial_x \hat{\theta}(x).$$

Este operador e $\hat{\phi}(x)$ são campos canonicamente conjugados:

$$\left[\hat{\phi}_\sigma(x), \hat{\Pi}_{\sigma'}(y) \right] = i\delta(x-y) \delta_{\sigma\sigma'}.$$

Finalmente chegamos na forma usual das “identidades bosônicas” ou fórmulas de Mandelstam²[78]:

$$\begin{aligned} \psi_{R,\sigma}(x) &= \frac{F_{R,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\sqrt{\pi}\hat{\phi}_\sigma(x) - i\sqrt{\pi}\hat{\theta}_\sigma(x) + ik_F x} \\ \psi_{L,\sigma}(x) &= \frac{F_{L,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i\sqrt{\pi}\hat{\phi}_\sigma(x) - i\sqrt{\pi}\hat{\theta}_\sigma(x) - ik_F x}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Por *point-splitting* ou por ordem normal, podemos demonstrar o resultado:

$$: \psi_{R,\sigma}^\dagger(x) \psi_{R,\sigma}(x) + \psi_{L,\sigma}^\dagger(x) \psi_{L,\sigma}(x) : = \rho(x) - \rho_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \hat{\phi}_\sigma(x). \quad (2.7)$$

Em 1D, normalmente é possível definir campos que separam os graus de liberdade de spin dos de carga. Sujeito a que as duas velocidades de Fermi sejam iguais, isto é obtido através dos campos $\hat{\phi}_c(x)$ (carga) e o campo $\hat{\phi}_s(x)$ (spin)[62]:

²Estamos seguindo a convenção de Schulz para o sinal do comutador do campo com seu dual[62]. Para que não tivéssemos de trabalhar com:

$$\rho(x) - \rho_0 = \frac{-1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \hat{\phi}_\sigma(x),$$

redefinimos os campos de Schulz para $\hat{\theta}(x) \rightarrow -\hat{\theta}(x)$ e $\hat{\phi}(x) \rightarrow -\hat{\phi}(x)$.

A notação de Gogolin, Nersesyan e Tsvelik[30] é obtida com: $\hat{\theta}(x) \rightarrow -\hat{\theta}(x)$.

$$\begin{cases} \hat{\phi}_s(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} (\hat{\phi}_\uparrow(x) - \hat{\phi}_\downarrow(x)) \\ \hat{\phi}_c(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} (\hat{\phi}_\uparrow(x) + \hat{\phi}_\downarrow(x)) \end{cases}, \quad (2.8)$$

e os seus campos duais:

$$\begin{cases} \hat{\theta}_s(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} (\hat{\theta}_\uparrow(x) - \hat{\theta}_\downarrow(x)) \\ \hat{\theta}_c(x) = \frac{\sqrt{2}}{2} (\hat{\theta}_\uparrow(x) + \hat{\theta}_\downarrow(x)) \end{cases}. \quad (2.9)$$

As equações (2.6) e (2.7) são os resultados mais importantes da discussão até agora. Elas representam a bosonização propriamente dita. Daqui para frente, devemos aplicar estes resultados e as demais definições aos nossos problemas de interesse. Voltemos, então, ao problema da hamiltoniana de Dirac.

2.1.6 hamiltoniana livre na base bosônica

Calculando o comutador desses operadores com a hamiltoniana livre,

$$\begin{cases} [H_0, a_{q,\sigma}^\dagger] = -v_F q a_{q,\sigma}^\dagger & [H_0, b_{q,\sigma}^\dagger] = v_F q b_{q,\sigma}^\dagger \\ [H_0, a_{q,\sigma}] = v_F q a_{q,\sigma} & [H_0, b_{q,\sigma}] = -v_F q b_{q,\sigma} \end{cases},$$

vemos que podemos reescrever a hamiltoniana em ordem normal como:

$$: H_0 := H_0 - \langle \Omega | H_0 | \Omega \rangle = v_F \sum_{q>0, \sigma} q (a_{q,\sigma}^\dagger a_{q,\sigma} + b_{q,\sigma}^\dagger b_{q,\sigma}),$$

onde passamos a denotar o estado de “vácuo bosônico” (sem excitações partícula-buraco) como $|\Omega\rangle$. Se retornarmos à definição dos campos esquerdo e direito (2.4), vemos que:

$$\partial_x \phi_\sigma(x) = \frac{-i}{\sqrt{2L}} \sum_{q>0} \sqrt{q} (e^{-iqx} a_{q,\sigma}^\dagger - e^{iqx} a_{q,\sigma})$$

$$\partial_x \varphi_\sigma(x) = \frac{i}{\sqrt{2L}} \sum_{q>0} \sqrt{q} (e^{iqx} b_{q,\sigma}^\dagger - e^{-iqx} b_{q,\sigma}),$$

o que de imediato nos leva a:

$$\int dx (\partial_x \phi_\sigma(x))^2 = \sum_{q>0} q (a_{q,\sigma}^\dagger a_{q,\sigma} + \frac{1}{2})$$

$$\int dx (\partial_x \varphi_\sigma(x))^2 = \sum_{q>0} q (b_{q,\sigma}^\dagger b_{q,\sigma} + \frac{1}{2}).$$

Com isso, a hamiltoniana no espaço real pode ser escrita como:

$$: H_0 := v_F \sum_{\sigma} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx : (\partial_x \phi_{\sigma}(x))^2 : + : (\partial_x \varphi_{\sigma}(x))^2 :,$$

ou em termos do campo $\hat{\phi}$ e do campo dual $\hat{\theta}$ (2.5):

$$: H_0 := \frac{v_F}{2} \sum_{\sigma} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx : \left(\partial_x \hat{\phi}_{\sigma}(x) \right)^2 : + : \left(\partial_x \hat{\theta}_{\sigma}(x) \right)^2 : .$$

2.1.7 modelo de Luttinger

Incluir os termos de interação tipo *forward-scattering* é apenas um exercício algébrico [78, 63]:

$$H_I = \frac{v}{2} \sum_{\sigma} \left\{ \left(\frac{1}{g} + g \right) \left[\sum_{\mu=R,L} \frac{\hat{N}_{\mu,\sigma}^2}{2} + \sum_{q>0} n_q \left(a_{q,\sigma}^{\dagger} a_{q,\sigma} + b_{q,\sigma}^{\dagger} b_{q,\sigma} \right) \right] + \right. \\ \left. \left(\frac{1}{g} - g \right) \left[\frac{\hat{N}_{L,\sigma} \hat{N}_{R,\sigma}}{2} - \sum_{q>0} n_q \left(a_{q,\sigma} b_{q,\sigma} + a_{q,\sigma}^{\dagger} b_{q,\sigma}^{\dagger} \right) \right] \right\}$$

onde usamos a notação padrão de “g-ologia” [78, 63, 77]:

$$\begin{cases} g = \sqrt{\frac{1+g_4-g_2}{1+g_4+g_2}} \\ \nu = \sqrt{(1+g_4)^2 - (g_2)^2} \\ v = \nu \times v_F \end{cases} .$$

A hamiltoniana $\tilde{H}_0 = H_0 + H_I$ é conhecida como hamiltoniana de Tomonaga-Luttinger. Através da transformação unitária dos operadores bosônicos:

$$\begin{bmatrix} a_q^{\dagger} \\ a_q \\ b_q^{\dagger} \\ b_q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\iota & -\kappa & \iota & -\kappa \\ -\kappa & -\iota & -\kappa & \iota \\ \iota & \kappa & \iota & -\kappa \\ \kappa & \iota & -\kappa & \iota \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_q^{\dagger} \\ A_q \\ B_q^{\dagger} \\ B_q \end{bmatrix},$$

onde $\iota = \frac{g+1}{\sqrt{8g}}$ e $\kappa = \frac{g-1}{\sqrt{8g}}$, podemos re-escrever a hamiltoniana \tilde{H}_0 como:

$$\tilde{H}_0 = v \sum_{q>0,\sigma} q \left(A_{q,\sigma}^{\dagger} A_{q,\sigma} + B_{q,\sigma}^{\dagger} B_{q,\sigma} \right) .$$

Ou seja, nessa nova base bosônica, a inclusão da interação apenas renormalizou a velocidade de Fermi. Os campos bosônicos agora se escrevem como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{\theta}_\sigma(x) = -\frac{1}{\sqrt{4gL}} \sum \frac{e^{-iqx}}{\sqrt{q}} (A_{q,\sigma}^\dagger - A_{q,\sigma} - B_{q,\sigma}^\dagger + B_{q,\sigma}) + \\ \qquad \qquad \qquad \frac{e^{iqx}}{\sqrt{q}} (-A_{q,\sigma}^\dagger + A_{q,\sigma} - B_{q,\sigma}^\dagger - B_{q,\sigma}) \\ \hat{\phi}_\sigma(x) = \sqrt{\frac{g}{4L}} \sum \frac{e^{-iqx}}{\sqrt{q}} (A_{q,\sigma}^\dagger + A_{q,\sigma} - B_{q,\sigma}^\dagger + B_{q,\sigma}) + \\ \qquad \qquad \qquad \frac{e^{iqx}}{\sqrt{q}} (A_{q,\sigma}^\dagger + A_{q,\sigma} + B_{q,\sigma}^\dagger - B_{q,\sigma}) \end{array} \right. .$$

Se renormalizarmos os campos $\tilde{\phi}_\sigma(x) = \sqrt{g}\hat{\phi}_\sigma(x)$ e $\tilde{\theta}_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{g}}\hat{\theta}_\sigma(x)$, devido ao cancelamento dos termos cruzados, obtemos:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= \frac{v_F}{2} \sum_\sigma \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx : \left(\partial_x \tilde{\phi}_\sigma(x) \right)^2 : + : \left(\partial_x \tilde{\theta}_\sigma(x) \right)^2 : \\ &= \frac{v_F}{2} \sum_\sigma \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx g : \left(\partial_x \hat{\phi}_\sigma(x) \right)^2 : + \frac{1}{g} : \left(\partial_x \hat{\theta}_\sigma(x) \right)^2 : \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.1.8 interações não triviais

termo de *back scattering*

Este parágrafo serve para ilustrar o tratamento dos fatores de Klein em um termo não trivial. Na linguagem bosônica, o termo de *back-scattering* se escreve como[63]:

$$H_I^{(2)} = \frac{v_F g_1}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \left(\eta_{R\uparrow} \eta_{L\uparrow} \eta_{L\downarrow} \eta_{R\downarrow} e^{i\sqrt{4\pi}\hat{\phi}_s(x)} + \eta_{R\downarrow} \eta_{L\downarrow} \eta_{L\uparrow} \eta_{R\uparrow} e^{-i\sqrt{4\pi}\hat{\phi}_s(x)} \right) .$$

Todos os fatores de Klein anticomutam, o que nos leva a escrever:

$$H_I^{(2)} = \frac{v_F g_1}{2\pi^2} \eta_{R\uparrow} \eta_{L\uparrow} \eta_{L\downarrow} \eta_{R\downarrow} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \cos \left(\sqrt{8\pi}\hat{\phi}_s(x) \right) .$$

Usando a representação das matrizes de Pauli para os fatores de Klein, temos que:

$$\eta_{R\uparrow} \eta_{L\uparrow} \eta_{L\downarrow} \eta_{R\downarrow} = 1 \otimes \sigma^z ,$$

que é diagonal com autovalores ± 1 . Por isso podemos escolher um autovetor de autovalor 1 para o espaço de Hilbert dos fatores de Klein e, assim, esquecer totalmente de sua existência a partir deste instante.

termo de *umklapp*

De maneira análoga, o termo de *umklapp* pode ser escrito como:

$$H_I^{(3)} = \frac{v_F g_3}{2\pi^2} \eta_{R\uparrow} \eta_{R\downarrow} \eta_{L\uparrow} \eta_{L\downarrow} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \cos \left(\sqrt{8\pi} \hat{\phi}_c(x) \right).$$

Novamente, o termo com os fatores de Klein pode ser escrito como:

$$\eta_{R\uparrow} \eta_{R\downarrow} \eta_{L\uparrow} \eta_{L\downarrow} = 1 \otimes \sigma^z.$$

Ou seja, podemos usar o mesmo auto-estado usado para o termo de *back-scattering* e, assim, escrever a hamiltoniana total do problema:

$$H = \frac{v}{2} \sum_{\mu=c,s} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx g : \left(\partial_x \hat{\phi}_\mu(x) \right)^2 : + \frac{1}{g} : \left(\hat{\Pi}_\mu(x) \right)^2 : + \frac{v_F g_1}{2\pi^2} \cos \left(\sqrt{8\pi} \hat{\phi}_s(x) \right) + \frac{v_F g_3}{2\pi^2} \cos \left(\sqrt{8\pi} \hat{\phi}_c(x) \right)$$

2.2 bosonização do problema Kondo

Um dos possíveis caminhos para estudar o problema Kondo é bosonizar os graus de liberdade eletrônico. Esse estudo foi feito por vários autores, entre eles Leggett et al. [51], que é um excelente artigo de revisão onde é mostrado que o problema Kondo dentro da aproximação abeliana pode ser pensado como um problema de dois níveis em contato com um reservatório.

O primeiro passo para procedermos com a bosonização é reduzirmos o problema eletrônico tridimensional para um problema unidimensional.

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left\{ C_{i,\sigma}^\dagger C_{j,\sigma} + H.c. \right\} + J_K \vec{S} \cdot \vec{S}^c \quad (2.11)$$

Em seguida linearizamos a relação de dispersão.

$$H = v_F \sum_{\vec{k}, \sigma} C_{\vec{k}, \sigma}^\dagger C_{\vec{k}, \sigma} + J_K \vec{S} \cdot \vec{S}^c, \quad (2.12)$$

Isso é bastante padrão e na realidade também é o passo inicial para a solução via *ansatz* de Bethe[40]. Em primeiro lugar mudamos o sistema de coordenadas para colocarmos a impureza magnética na origem do sistema coordenado, em seguida Fourier transformamos os operadores de criação e destruição eletrônicos. Escrevendo o problema em coordenadas esféricas, expandimos os operadores eletrônicos na base dos harmônicos esféricos:

$$C_{\vec{k}\sigma}^\dagger = \sum_l \sum_{m=-l}^l Y_{l,m} \left(\frac{\vec{k}}{|\vec{k}|} \right) C_{|\vec{k}|lm\sigma}^\dagger$$

A ortogonalidade dos harmônicos esféricos faz com que apenas operadores com $l = 0$ estejam presentes no termo de interação. Usando este fato e esquecendo os modos irrelevantes no termo livre, re-escrevemos 2.11 como um modelo efetivo unidimensional:

$$H = v_F \sum_{k,\sigma} k C_{k,0,0,\sigma}^\dagger C_{k,0,0,\sigma} + J_K \vec{S} \cdot \vec{S}^c, \quad (2.13)$$

O significado físico desse hamiltoniano é que reduzimos o problema a ondas eletrônicas tipo s emergentes e incidentes espalhadas pela impureza. Usando os resultados do parágrafo 2.1, escrevemos esse hamiltoniano no espaço real como férmions de Dirac:

$$H = -iv_F \sum_{\sigma} \int_0^{\frac{L}{2}} dx \psi_{R,\sigma}^\dagger(x) \partial_x \psi_{R,\sigma}(x) - \psi_{L,\sigma}^\dagger(x) \partial_x \psi_{L,\sigma}(x) + J_K \vec{S} \cdot \vec{S}^c$$

O índice R corresponde ao conjunto de ondas incidentes sobre a impureza, enquanto o sub-índice L às ondas emergentes. Fica claro que podemos levar o problema em um problema de uma única quiralidade definido de $-\infty$ à $+\infty$.

$$\psi_L(x) = \psi_R(-x)$$

$$\partial_x \psi_L(x) = -\partial_x \psi_R(-x)$$

Com isso, a hamiltoniana Kondo pode ser escrita como:

$$H = -iv_F \sum_{\sigma} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \psi_{R,\sigma}^\dagger(x) \partial_x \psi_{R,\sigma}(x) + J_K \vec{S} \cdot \vec{S}^c \quad (2.14)$$

A generalização imediata, que será de nosso interesse nos parágrafos posteriores, é o problema de dois canais:

$$H = -iv_F \sum_{\sigma} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \psi_{1,\sigma}^\dagger(x) \partial_x \psi_{1,\sigma}(x) + \psi_{2,\sigma}^\dagger(x) \partial_x \psi_{2,\sigma}(x) + J_K \vec{S} \cdot \vec{S}^c, \quad (2.15)$$

onde ψ_1 e ψ_2 tem quiralidade opostas. Fica evidente que este é o caso de interesse para o estudo da rede de Kondo. Por si só o problema de dois canais é muito interessante e desenvolveu uma vasta literatura. O grande interesse que esse tipo de modelo despertou deveu-se à previsão de Nozières e Bladin[58] sobre um possível comportamento de não-líquido de Fermi (NFL, ou líquido de Fermi anômalo) de sistemas Kondo de múltiplos canais (*multi channel Kondo problem*). A solução de Emery e Kivelson

nos permitirá observar esse fato de maneira bem simples.

É conveniente normalizarmos a hamiltoniana pela velocidade de Fermi. Definindo, $J = \frac{J^{original}}{v_F}$:

$$H = \frac{H^{original}}{v_F} = -i \sum_{\sigma} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \psi_{R,\sigma}^{\dagger}(x) \partial_x \psi_{R,\sigma}(x) + J \vec{S} \cdot \vec{S}^c$$

ou

$$= -i \sum_{\sigma} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \psi_{1,\sigma}^{\dagger}(x) \partial_x \psi_{1,\sigma}(x) + \psi_{2,\sigma}^{\dagger}(x) \partial_x \psi_{2,\sigma}(x) + J \vec{S} \cdot \vec{S}^c$$

Usando as expressões derivadas do parágrafo 2.1, é trivial escrever a forma bosonizada dessas hamiltonianas. Para a hamiltoniana Kondo de um canal :

$$H = H_0 + \frac{J}{\sqrt{\pi}} (\partial_x \phi_{R,\uparrow}(0) - \partial_x \phi_{R,\downarrow}(0)) S^z + \frac{J}{4\pi\alpha} F_{R,\uparrow}^{\dagger} F_{R,\downarrow} e^{-i\sqrt{4\pi}[\phi_{R,\uparrow}(0) - \phi_{R,\downarrow}(0)]} S^{-} + H.c.$$

Definindo os campos de carga e spin e um novo fator de Klein $F_{R,s}^{\dagger} = F_{R,\uparrow}^{\dagger} F_{R,\downarrow}$:

$$H = H_0^{(s)} + H_0^{(c)} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} J \partial_x \phi_{R,s}(0) S^z + \frac{J}{4\pi\alpha} F_{R,s}^{\dagger} e^{-i\sqrt{8\pi}\phi_{R,s}(0)} S^{-} +$$

$$+ \frac{J}{4\pi\alpha} F_{R,s} e^{-i\sqrt{8\pi}\phi_{R,s}(0)} S^{+}.$$
(2.16)

O problema de dois canais tem uma expressão exatamente análoga.

$$H = H_0^{(s)} + H_0^{(c)} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} J [\partial_x \phi_{1,s}(0) + \partial_x \phi_{2,s}(0)] S^z$$

$$+ \frac{J}{4\pi\alpha} \left[F_{1,s}^{\dagger} e^{-i\sqrt{8\pi}\phi_{1,s}(0)} + F_{2,s}^{\dagger} e^{-i\sqrt{8\pi}\phi_{2,s}(0)} \right] S^{-}$$

$$+ \frac{J}{4\pi\alpha} \left[F_{1,s} e^{i\sqrt{8\pi}\phi_{1,s}(0)} + F_{2,s} e^{i\sqrt{8\pi}\phi_{2,s}(0)} \right] S^{+}$$
(2.17)

Um ponto importante é que não há termos de *back-scattering*. Essa é a principal diferença do modelo de Kondo de dois canais e o limite “diluído” da cadeia de Kondo. Os campos aqui ($\phi_{1/2}$) são quirais:

$$[\phi_{\alpha}(x), \phi_{\beta}(y)] = \frac{i}{4} \Xi(x-y) \delta_{\alpha,\beta}.$$

2.2.1 grupo de renormalização: análise de Anderson-Yuval

A análise de Anderson e Yuval [1, 2, 89] foi a primeira a explicar a transição de *weak-* para *strong-coupling* do problema Kondo no contexto de grupo de renormalização. O método usado foi bem direto: passando para uma representação de integrais de caminho (usando variáveis de Grassmann), os autores traçaram os campos fermiônicos, derivando, desta forma, uma ação efetiva para os spins. O resultado final é um modelo de Ising 1-D (a dimensão é o tempo imaginário) com interação de longo alcance do tipo $\frac{1}{r^2}$ [51, equação 3.83], ou equivalentemente, um gás de Coulomb de barras rígidas carregadas alternadamente [51, equação 3.80]. Vamos proceder de forma análoga, só que usando a versão bosonizada da hamiltoniana 2.16.

Considere a rotação do campo bosônico:

$$U = e^{i\sqrt{8\pi}\phi_{R,s}(0)S^z} \quad (2.18)$$

Ao aplicarmos esta rotação sobre o hamiltoniano de Kondo 2.16, obtemos³:

$$H = U^\dagger H U = H_0 + \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} J - \sqrt{8\pi} \right) \partial_x \phi_{R,s}(0) S^z + \frac{J}{4\pi\alpha} \left(F_{R,s}^\dagger S^- + F_{R,s} S^+ \right)$$

Vestindo os operadores de spin com os fatores de Klein:

$$\sigma^-(x) = F_R^\dagger S^-(x) \text{ e } \sigma^z(x) = S^z(x), \quad (2.19)$$

re-escrevemos a hamiltoniana:

$$H = H_0 + \sqrt{\frac{2}{\pi}} (J - 2\pi) \partial_x \phi_{R,s}(0) \sigma^z + \frac{J}{2\pi\alpha} \sigma^x. \quad (2.20)$$

Devido à forma simplificada que a hamiltoniana tomou nesta base bosônica, é natural usarmos a base σ^z ao escrevermos a função de partição. Como veremos adiante seremos forçados a introduzir um *cut-off* nas frequências de Matsubara para acomodar α . Isto será equivalente a impormos a isotropia no espaço-tempo imaginário. A passagem para a função de partição é análoga à que desenvolveremos no parágrafo 2.5 e o resultado do cálculo, após traçarmos o campo bosônico, é um gás de Coulomb com cargas alternadas⁴. As equações de renormalização para o problema Kondo se encontram no apêndice C.1⁵. Essas equações nos mostram que o problema Kondo apresenta uma transição tipo Kosterlitz-Thouless[73] de maneira semelhante ao modelo de sine-Gordon[30] (e o XY clássico em duas dimensões [39]). A figura 2.1 apresenta as trajetórias das equações de renormalização no espaço

³iremos fazer este cálculo em detalhes no parágrafo 2.3.3.

⁴isto será derivado no parágrafo 2.6.5.

⁵Nesse apêndice, as equações de renormalização foram derivadas seguindo a renormalização no espaço real proposta por Nienhus em [57] para o gás de Coulomb, que corresponde a forma original em que Anderson e Yuval as obtiveram[1, 89, 2].

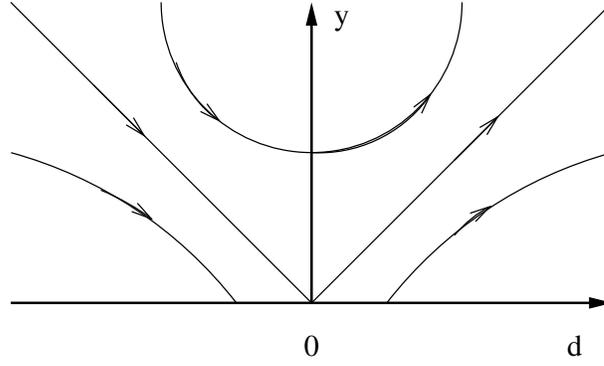


Figura 2.1: transição Kosterlitz-Thouless no problema Kondo.

de parâmetros⁶, onde $y = J_{\perp}$ e $d = 2 - 4J_z + J_z^2$.

2.2.2 refermionização: análise de Emery-Kivelson

O estudo de grupo de renormalização feito por Anderson-Yuval mostrou que no modelo de Kondo, $J = 0$ é um ponto tipo sela no grupo de renormalização. O sistema livre é estável com relação às perturbações ferromagnéticas ($J < 0$), enquanto que para perturbações antiferromagnéticas ($J > 0$), J cresce com o fluxo de renormalização, eventualmente levando o modelo para uma região de acoplamento forte. A abordagem de Emery-Kivelson ao problema vem na direção de tentar entender a física de um eventual ponto fixo do grupo de renormalização nesta região do espaço de parâmetros.

A idéia é tentar refermionizar o problema. Para tanto, considere a rotação do campo bosônico:

$$U = e^{i\sqrt{4\pi}(\sqrt{2}-1)\phi_{R,s}(0)S^z}.$$

Ao aplicarmos no hamiltoniano, encontramos:

$$H = U^{\dagger} H U = H_0 + \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} J - \sqrt{4\pi} (\sqrt{2} - 1) \right) \partial_x \phi_{R,s}(0) S^z + \frac{J}{4\pi\alpha} \left(F_{R,s}^{\dagger} e^{-i\sqrt{4\pi}\phi_{R,s}(0)} S^{-} + H.c \right).$$

Seguindo a notação de [30], definimos $\lambda = \sqrt{4\pi} (\sqrt{2} - 1) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} J$:

$$H = H_0 + \lambda \partial_x \phi_{R,s}(0) S^z + \frac{J}{4\pi\alpha} \left(F_{R,s}^{\dagger} e^{-i\sqrt{4\pi}\phi_{R,s}(0)} S^{-} + H.c \right),$$

um ponto importante é que a álgebra do spin S é idêntica a álgebra fermiônica (já que todos os comutadores não triviais são calculados no mesmo ponto do espaço):

⁶os acoplamentos estão normalizados pela velocidade de Fermi.

$$S^+ = d^\dagger \quad e \quad S^z = d^\dagger d - \frac{1}{2}. \quad (2.21)$$

Estamos em posição de definir um novo campo fermiônico:

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \left(F_{R,s}^\dagger e^{i\pi d^\dagger d} \right) e^{-i\sqrt{4\pi}\phi_{R,s}(x)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} F^\dagger e^{-i\sqrt{4\pi}\phi_{R,s}(x)} \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \left(F_{R,s} e^{-i\pi d^\dagger d} \right) e^{i\sqrt{4\pi}\phi_{R,s}(x)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} F e^{i\sqrt{4\pi}\phi_{R,s}(x)} \end{aligned}$$

A fase $e^{i\pi d^\dagger d}$ foi introduzida na definição dos fatores de Klein para forçar a relação de anticomutação entre ψ e d . Ela faz o papel análogo da fase na transformação de Jordan-Wigner. Finalmente encontramos o modelo de níveis ressonantes (*resonant level model* - RLV):

$$H = H_0 + \lambda \left(d^\dagger d - \frac{1}{2} \right) : \psi^\dagger(0) \psi(0) : + \frac{J}{2\sqrt{2\pi\alpha}} [\psi^\dagger(0) d + d^\dagger \psi(0)], \quad (2.22)$$

O ponto de Toulouse seria quando $\lambda = 0$, ou seja:

$$J = \pi \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{2} \right),$$

que não tem um valor universal[30], dependendo do tipo de abordagem que se dá ao problema.

A generalização desse procedimento para o problema de 2 canais foi feita por Emery e Kivelson. O ponto inicial é a hamiltoniana 2.17. Devemos inicialmente definir dois novos campos:

$$\begin{aligned} \phi_s(x) &= \frac{\sqrt{2}}{2} (\phi_1(x) + \phi_2(x)) \\ \phi_{sf}(x) &= \frac{\sqrt{2}}{2} (\phi_1(x) - \phi_2(x)), \end{aligned}$$

onde usamos a notação de [30]: $\phi_s \rightarrow$ spin total (e não o índice de spin da hamiltoniana original) e $\phi_{sf} \rightarrow$ spin *flavour*. Note que como os campos originais tinham a mesma quiralidade (arbitrada direita (*right*)) então os campos ϕ_s e ϕ_{sf} também são quirais, isso é uma importante tecnicidade nesse problema, já que poderíamos promover uma inversão espacial em um dos campos e transforma-los em campos com quiralidades opostas e assim definir o campo bosônico e seu dual (fazendo a ligação com o problema da cadeia diluída). A maneira como parametrizamos as ondas emergentes e incidentes no caso da impureza é arbitrário. No problema da cadeia a situação é bem distintas, agora esquerda e direita tem um significado físico adicional e por isso perdemos essa liberdade.

Em termos dos campos de spin e sabor, re-escrevemos a hamiltoniana:

$$\begin{aligned}
H = & H_0^{(s)} + H_0^{(sf)} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} J [\partial_x \phi_s(0) + \partial_x \phi_{sf}(0)] S^z \\
& + \frac{J}{4\pi\alpha} \left[F_{1,s}^\dagger e^{-i\sqrt{4\pi}(\phi_s(0)+\phi_{sf}(0))} + F_{2,s}^\dagger e^{-i\sqrt{4\pi}(\phi_s(0)-\phi_{sf}(0))} \right] S^- \\
& + \frac{J}{4\pi\alpha} \left[F_{R,s} e^{i\sqrt{4\pi}(\phi_s(0)+\phi_{sf}(0))} + F_{L,s} e^{i\sqrt{4\pi}(\phi_s(0)-\phi_{sf}(0))} \right] S^+
\end{aligned}$$

Se esquecermos os fatores de Klein, podemos simplificar um pouco mais essa expressão:

$$\begin{aligned}
H = & H_0^{(s)} + H_0^{(sf)} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} J \partial_x \phi_s(0) S^z + \frac{J}{2\pi\alpha} e^{-i\sqrt{4\pi}\phi_s(0)} \cos [\sqrt{4\pi}\phi_{sf}(0)] S^- \\
& + \frac{J}{2\pi\alpha} e^{i\sqrt{4\pi}\phi_s(0)} \cos [\sqrt{4\pi}\phi_{sf}(0)] S^+
\end{aligned}$$

Uma característica importante já pode ser vista nessa hamiltoniana: apenas um dos campos tem sua derivada primeira acoplado com a S^z , veremos mais tarde que esse é o campo responsável pelo efeito Kondo, enquanto o outro é responsável pelo comportamento de não-líquido de Fermi.

Exatamente como no cálculo anterior, aplicamos a rotação:

$$U = e^{i\sqrt{4\pi}\phi_s(0)S^z},$$

e obtemos:

$$\begin{aligned}
H = U^\dagger H U = & H_0^{(s)} + H_0^{(sf)} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} (J - \sqrt{2\pi}) \partial_x \phi_s(0) S^z \\
& + \frac{J}{\pi\alpha} \cos [\sqrt{4\pi}\phi_{sf}(0)] S^x
\end{aligned}$$

Que pode ser refermionizada como no caso de uma banda. Usando 2.21 e definindo:

$$\begin{aligned}
\psi_s(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\sqrt{4\pi}\phi_s(x)} \\
\psi_{sf}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i\pi d^\dagger d} e^{i\sqrt{4\pi}\phi_{sf}(x)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} F e^{i\sqrt{4\pi}\phi_{R,s}(x)}
\end{aligned}$$

, obtemos:

$$\begin{aligned}
H = & H_0^{(s)} + H_0^{(sf)} + \sqrt{\frac{2}{\pi}} (J - \sqrt{2\pi}) \left(d^\dagger d - \frac{1}{2} \right) : \psi_s^\dagger(0) \psi_s(0) : \\
& + \frac{J}{4\pi\alpha} \left(\psi_{sf}^\dagger(0) + \psi_{sf}(0) \right) (d^\dagger + d).
\end{aligned}$$

A generalização do ponto de Toulouse seria então $J = \sqrt{2\pi}$, onde obtemos um RLM como no caso

Kondo. Exatamente no ponto de Toulouse os campos de spin e de sabor desacoplam, e a degenerescência decorrente desse fato provoca o comportamento de não-liquido de Fermi (NFL). A generalização para o caso anisotrópico ou com acoplamentos diferentes para cada canal pode ser feita de maneira imediata, o único ingrediente adicional é que devemos decompor os campos fermiônicos em suas componentes de Majorana[30].

2.3 bosonização da rede de Kondo

Como vimos em 1.2, o termo de Kondo pode ser escrito como:

$$H_K = J_K \sum_x \tau^z(x) S^z(x) + \frac{1}{2} (S^+(x) \tau^-(x) + S^-(x) \tau^+(x)), \quad (2.23)$$

sendo que:

$$\tau^\eta = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} C_s^\dagger(x) \sigma_{s,s'}^\eta C_{s'}(x),$$

e S^η e σ^η são os operadores de spin 1/2 e as matrizes de Pauli definidos no apêndice A.

Definimos os operadores de campo fermiônicos em 2.4 no parágrafo 2.1. Podemos separar o hamiltoniano segundo o tipo de espalhamento envolvido: *forward-* e *back-scattering*. Nessa linguagem, o termo de Kondo será a soma dos operadores:

$$H_1^{(f)} = \frac{aJ_K}{2} \sum_x \sum_{\eta=R,L} \left[\psi_{\eta\uparrow}^\dagger(x) \psi_{\eta\uparrow}(x) - \psi_{\eta\downarrow}^\dagger(x) \psi_{\eta\downarrow}(x) \right] S^z(x) \quad (2.24)$$

$$H_1^{(b)} = \frac{aJ_K}{2} \sum_x \sum_{\substack{\eta\eta' = R, L \\ \eta \neq \eta'}} \left[\psi_{\eta\uparrow}^\dagger(x) \psi_{\eta'\uparrow}(x) - \psi_{\eta\downarrow}^\dagger(x) \psi_{\eta'\downarrow}(x) \right] S^z(x) \quad (2.25)$$

$$H_2^{(f)} = \frac{aJ_K}{2} \sum_x \sum_{\eta=R,L} \left[\psi_{\eta\uparrow}^\dagger(x) \psi_{\eta\downarrow}(x) \right] S^-(x) + h.c. \quad (2.26)$$

$$H_2^{(b)} = \frac{aJ_K}{2} \sum_x \sum_{\substack{\eta\eta' = R, L \\ \eta \neq \eta'}} \left[\psi_{\eta\uparrow}^\dagger(x) \psi_{\eta'\downarrow}(x) \right] S^-(x) + h.c. \quad (2.27)$$

onde a é o parâmetro de rede dos férmions.

Como o parâmetro adimensional relevante é a razão do parâmetro J_K é a velocidade de Fermi,

renormalizamos o hamiltoniano para:

$$H_K = \frac{H_K}{v_F},$$

o que imediatamente nos leva a definir o paramento adimensional:

$$J = \frac{aJ_K}{v_F} = \frac{J_K}{2t \sin\left(\frac{\pi}{2}n_c\right)}.$$

Usando as equações 2.7 e 2.8, obtemos a versão bosonizada :

$$H_1^{(f)} = J \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_x \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x)$$

Os outros termos são obtidos através das identidades bosônicas 2.6:

$$H_1^{(b)} = \frac{J}{2\pi\alpha} \sum_x \sum_{\substack{\eta\eta' = R, L \\ \eta \neq \eta'}} \left[F_{\eta\uparrow}^\dagger F_{\eta'\uparrow} e^{-2ik_F x + 2i\sqrt{\pi}\hat{\phi}_\uparrow(x)} - F_{\eta\downarrow}^\dagger F_{\eta'\downarrow} e^{-2ik_F x + 2i\sqrt{\pi}\hat{\phi}_\downarrow(x)} + h.c. \right] S^z(x)$$

$$H_2^{(f)} = \frac{J}{4\pi\alpha} \sum_x \left[F_{R\uparrow}^\dagger F_{R\downarrow} e^{-i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(x) - \hat{\theta}_s(x))} + F_{L\uparrow}^\dagger F_{L\downarrow} e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(x) + \hat{\theta}_s(x))} \right] S^-(x) + h.c.$$

$$H_2^{(b)} = \frac{J}{4\pi\alpha} \sum_x \left[F_{R\uparrow}^\dagger F_{L\downarrow} e^{2ik_F x - i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_c(x) - \hat{\theta}_s(x))} + F_{L\uparrow}^\dagger F_{R\downarrow} e^{-2ik_F x + i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_c(x) + \hat{\theta}_s(x))} \right] S^-(x) + h.c.$$

Se os fatores de Klein puderem ser esquecidos (veja discussão do parágrafo 2.1), podemos simplificar estas expressões:

$$H_1^{(b)} = \frac{2J}{\pi\alpha} \sum_x \left\{ \sin \left[-2k_F x + \sqrt{2\pi}\hat{\phi}_c(x) \right] \sin \left[\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_s(x) \right] \right\} S^z(x)$$

$$H_2^{(f)} = \frac{J}{2\pi\alpha} \sum_x e^{i\sqrt{2\pi}\hat{\theta}_s(x)} \cos \left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_s(x) \right) S^-(x) + h.c.$$

$$H_2^{(b)} = \frac{J}{2\pi\alpha} \sum_x e^{i\sqrt{2\pi}\hat{\theta}_s(x)} \cos \left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_c(x) + 2k_F x \right) S^-(x) + h.c.$$

De maneira geral, se argumenta que nos casos incomensuráveis ($2k_F x \neq n\pi$), os termos de *back-scattering* podem ser negligenciados na análise de longos comprimentos de onda e baixas energias[91].

Esquecer os fatores de Klein não é totalmente lícito no caso da rede de Kondo[21]. Podemos ver isso de maneira rápida, se usarmos a representação das matrizes de Pauli da álgebra de Clifford associada aos fatores de Klein. Para o termo $H_2^{(f)}$, os fatores de Klein podem ser representados como:

$$\eta_{R\uparrow}\eta_{R\downarrow} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\eta_{L\uparrow}\eta_{L\downarrow} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

que claramente têm o autovetor comum:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

de autovalor $\mp i$. Se considerássemos apenas $H_2^{(f)}$ e os termos com fatores de Klein múltiplos da identidade (no caso $H_1^{(f)}$) poderíamos efetivamente esquecer os fatores de Klein de $H_2^{(f)}$ ao escolhermos esse autovetor. O problema aparece ao tentarmos escrever simultaneamente os termos de *back-scattering*. Por exemplo, para $H_1^{(b)}$:

$$\eta_{R\uparrow}\eta_{L\downarrow} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix},$$

que não tem 2.28 como autovetor. Portanto não é possível encontrarmos um auto-estado simultâneo de todos os fatores de Klein envolvidos no problema. Porém, termo a termo, estes podem ser esquecidos e analisados conjuntamente com o termo múltiplo da identidade ($H_1^{(f)}$). De agora em diante esqueceremos os fatores de Klein, contudo as ressalvas colocadas aqui não podem ser desconsideradas.

2.3.1 introduzindo interações eletrônicas

Como vimos no capítulo 2.1, as interações do modelo de Tomonaga-Luttinger apenas renormalizam os campos bosônicos (veja equações 2.10). Para referências futuras, escreveremos explicitamente os termos do hamiltoniano da rede de Kondo com esses campos renormalizados:

$$H_1^{(f)} = J \sqrt{\frac{2}{\pi g}} \sum_x \partial_x \tilde{\phi}_s(x) S^z(x)$$

$$H_1^{(b)} = \frac{2J}{\pi \alpha} \sum_x \left\{ \sin \left[-2k_F x + \sqrt{\frac{2\pi}{g}} \tilde{\phi}_c(x) \right] \sin \left[\sqrt{\frac{2\pi}{g}} \tilde{\phi}_s(x) \right] \right\} S^z(x)$$

$$H_2^{(f)} = \frac{J}{2\pi \alpha} \sum_x e^{i\sqrt{2\pi g} \tilde{\theta}_s(x)} \cos \left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}} \tilde{\phi}_s(x) \right) S^-(x) + h.c.$$

$$H_2^{(b)} = \frac{J}{2\pi \alpha} \sum_x e^{i\sqrt{2\pi g} \tilde{\theta}_s(x)} \cos \left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}} \tilde{\phi}_c(x) + 2k_F x \right) S^-(x) + h.c.$$

2.3.2 modelo efetivo para os spins com estados coerentes de spin

Um dos primeiros resultados, que devemos derivar, é a “interação” RKKY a partir dos campos bosônicos.

Na base fermiônica este é um resultado bastante comum, e de certa forma trivial, pois a integral gaussiana que aparece é muito simples. Para obtermos a RKKY traçamos os férmions para fora do problema, usando uma expansão perturbativa até segunda ordem[15, 14]. O resultado encontrado é:

$$S_{eff} = -J^2 \sum_{a,b,c} \int dt \int dt' \int dr \int dr' S^a(r', t') \Pi^0(r - r', t - t') S^b(r, t),$$

onde Π^0 é a função de polarização retardada densidade-densidade do gás de elétrons. Esquecendo os termos de retardamento (aproximação instantânea) e considerando uma superfície de Fermi esférica, podemos aproximar $\Pi^0(p, \omega)$ por sua parte real $\Re(\Pi^0(p, 0))$:

$$\Re(\Pi^0(\Delta r, t)) = -\delta(\Delta t) \frac{m^*}{4(2\pi)^3} \left[\frac{\sin(2k_F \Delta r) - 2k_F \Delta r \cos(2k_F \Delta r)}{(\Delta r)^4} \right].$$

Este é o resultado para a RKKY em 3 dimensões espaciais. Em uma dimensão isto se modifica um pouco, na representação de momentos[74]:

$$H_{RKKY} = -J^2 \sum_q \chi_c(q) \vec{S}_q \cdot \vec{S}_{-q} + O(J^4),$$

onde χ_c é a suscetibilidade estática dos elétrons de condução. Para uma banda eletrônica parabólica $\varepsilon(k) = \frac{k^2}{2m}$, χ_c pode ser calculada de forma exata:

$$\begin{aligned} \chi_c(q) &= \frac{1}{2L} \sum_k \frac{\langle n_{k+q, \uparrow} \rangle - \langle n_{k, \downarrow} \rangle}{\varepsilon(k) - \varepsilon(k+q)} \\ &= \frac{1}{q} \log \left| \frac{q-2k_F}{q+2k_F} \right|. \end{aligned}$$

Isto mostra que χ_c tem uma divergência logarítmica em $q = 2k_F$. Esta singularidade significa que não podemos tratar de forma perturbativa a constante de acoplamento de Kondo. Isto se deve ao fato de que em uma dimensão as correlações quânticas são acentuadas, o que impossibilita tratarmos de forma independente os graus de liberdade eletrônicos e de spin.

Apesar disso, apenas como um exercício do formalismo, vamos seguir os passos tomados no caso fermiônico e tentar “derivar” o equivalente bosônico da RKKY. É importante lembrarmos que a banda de condução nesse instante já foi linearizada. Inicialmente passamos para o formalismo de integrais de caminho[55] usando a base de estados coerentes de ϕ e φ (veja apêndice B.3):

$$Z = \int D\vec{S} \prod_{\sigma} D\phi_{\sigma} D\varphi_{\sigma} e^{-S_0 - S_{Kondo} - \frac{i}{2} \sum_x S_{Wess-Zumino-Witten}(x)}.$$

O termo topológico de Wess-Zumino-Witten pode ser esquecido no caso da banda semipreenchida, quando $|M - 2S|$ é um número par (onde M é a componente z da magnetização do estado e S é a representação do SU(2) usada no modelo)[75]. Em princípio, este termo pode ser muito importante para o entendimento da dinâmica do problema. Contudo, os demais termos já constituem um desafio suficiente para qualquer um. Por isso, dentro desse trabalho, não consideraremos o termo $S_{Wess-Zumino-Witten}$.

$$S_0 = \frac{1}{2} \int_0^{\beta} dt \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \left[v_F \left(\partial_x \hat{\phi} \right)^2 + v_F \left(\partial_x \hat{\theta} \right)^2 \right],$$

Como havíamos normalizado a hamiltoniana de interação pela velocidade de Fermi isto se simplifica para:

$$S_0 = \frac{1}{2} \int_0^{\beta} dt \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx \left[\left(\partial_x \hat{\phi} \right)^2 + \left(\partial_x \hat{\theta} \right)^2 \right],$$

O termo de Kondo se transporta de forma direta para a representação de integrais de caminho:

$$S_{Kondo} = S_1^{(f)} + S_1^{(b)} + S_2^{(f)} + S_2^{(b)}$$

$$S_1^{(f)} = J \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int dt \sum_x \partial_x \hat{\phi}_s(x, t) S^z(x, t)$$

$$S_1^{(b)} = \frac{2J}{\pi\alpha} \int dt \sum_x \left\{ \sin \left[-2k_F x + \sqrt{2\pi} \hat{\phi}_c(x, t) \right] \sin \left[\sqrt{2\pi} \hat{\phi}_s(x, t) \right] \right\} S^z(x, t)$$

$$S_2^{(f)} = \frac{J}{2\pi\alpha} \int dt \sum_x e^{i\sqrt{2\pi} \hat{\theta}_s(x, t)} \cos \left(\sqrt{2\pi} \hat{\phi}_s(x, t) \right) S^-(x, t) + h.c.$$

$$S_2^{(b)} = \frac{J}{2\pi\alpha} \int dt \sum_x e^{i\sqrt{2\pi} \hat{\theta}_s(x, t)} \cos \left(\sqrt{2\pi} \hat{\phi}_c(x, t) + 2k_F x \right) S^-(x, t) + h.c.$$

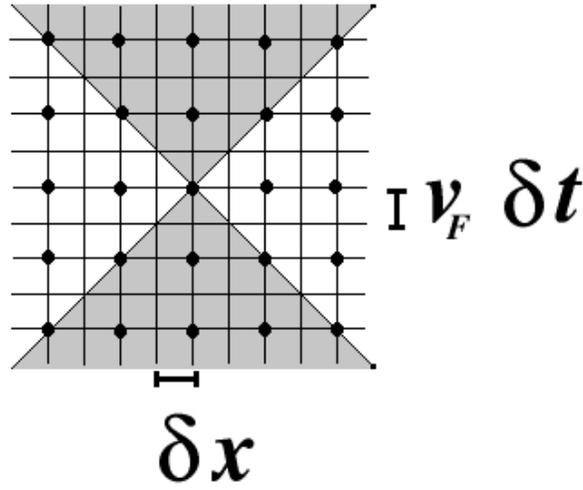


Figura 2.2: cone de luz referente a um sítio da rede de Kondo.

O cálculo das diversas funções de correlação envolvidas no problema é extremamente tedioso e como a maior parte delas já se encontra na literatura não as derivaremos aqui. O termo mais interessante é $S_1^{(f)}$. Dele se obtém a função de partição reduzida:

$$\bar{Z} = \int D\vec{S} \left(1 - 4J^2 \int dt dt' \sum_{x,x'} \frac{\Delta t^2 - \Delta x^2}{(\Delta t^2 + \Delta x^2)^2} S^z(x, t) S^z(x', t') \right)$$

Para todos os demais termos obtemos o pré-fator usual [30] ao se traçar os campos bosônicos. Por exemplo para $S_1^{(b)}$:

$$\bar{Z} = \int D\vec{S} \left(1 - 16J^2 \int dt dt' \sum_{x,x'} \frac{\cos(2k_F \Delta x)}{\Delta t^2 + \Delta x^2} S^z(x, t) S^z(x', t') \right)$$

De maneira análoga para $S_2^{(f)}$:

$$\bar{Z} = \int D\vec{S} \left(1 - 16J^2 \int dt dt' \sum_{x,x'} \frac{1}{\Delta t^2 + \Delta x^2} (S^x(x, t) S^x(x', t') + S^y(x, t) S^y(x', t')) \right)$$

É claro que os termos de *back-scattering* são os responsáveis pela RKKY. O ponto interessante é que o termo $S_1^{(f)}$ tem um pré-fator dependente do tempo (oriundo da função de correlação de dois pontos da corrente bosônica) bem distinta dos demais (funções de correlação de dois pontos do campo bosônico). Em coordenadas polares fica evidente essa diferença:

$$\Delta t = \rho \sin \xi \text{ e } \Delta x = \rho \cos \xi,$$

o pré-fator de $S_1^{(f)}$ tem a forma:

$$\frac{\cos(2\xi)}{\rho^2}, \quad (2.29)$$

enquanto todos os demais tem a forma:

$$\frac{1}{\rho^2}. \quad (2.30)$$

Note que, se consideramos apenas os efeitos instantâneos, perdemos este detalhe, já que então $\xi=0$. Apesar de 2.29 e 2.30 apresentarem o mesmo decaimento com $\frac{1}{\rho^2}$, 2.29 apresenta uma dependência com a direção considerada no plano espaço-tempo. Em particular, para $\xi=\frac{\pi}{4}$ a correlação é nula. Ou seja, as correlações de segundos vizinhos do termo $S_1^{(f)}$ da rede no espaço-tempo são nulas. Além disso, a interação efetiva muda de sinal dentro e fora do cone de luz. Para sítios dentro do cone de luz temos uma interação ferromagnética, enquanto para sítios fora do cone de luz a interação é antiferromagnética. Essa constatação é uma primeira pista de que existe algo especial com relação ao termo $H_1^{(f)}$. Como veremos a seguir, após rodarmos o campo bosônico, ele será um termo não perturbativo em relação ao hamiltoniano livre e, por isso, terá de ser tratado separadamente dos demais.

2.3.3 rotação do campo bosônico

Uma das estratégias para conseguirmos avançar em um problema fortemente correlacionado é tentar encontrar uma base que torne mais evidente as propriedades físicas do sistema. No problema Kondo, já se conhece uma transformação canônica dos campos bosônicos que faz esse trabalho (veja a equação 2.18 e a referência [51]). De maneira geral, esse tipo de transformação foi muito bem sucedido no estudo de problemas de impurezas, a referência [30] contém vários exemplos disso. No trabalho de Zachar, Emery e Kivelson[91, 90], os autores generalizaram essa transformação para o problema de rede de Kondo.

$$U = e^{-i\chi \sum_x \hat{\theta}_s(x) S^z(x)}, \quad \chi \in C.$$

A ação por conjugação desse operador sobre os operadores de spin é:

$$\begin{cases} U^{-1} S^z(x) U = S^z(x) \\ U^{-1} S^-(x) U = e^{-i\chi\hat{\theta}_s(x)} S^-(x) \\ U^{-1} S^+(x) U = e^{i\chi\hat{\theta}_s(x)} S^+(x) \end{cases} \quad (2.31)$$

Note que a componente z é mantida invariante, contudo as componentes xy são transformadas de forma não trivial.

rotação em sistemas diluídos

ação sobre o hamiltoniano livre: O único termo que não comuta com a transformação canônica U é $(\partial_x \hat{\phi}_s(x))^2$. Para calcularmos a ação sobre esse termo usamos o teorema de Baker-Hausdorff(A.4):

$$\left[\hat{\theta}_s(y), \left(\partial_x \hat{\phi}_s(x) \right)^2 \right] = 2i\delta(x-y) \partial_x \hat{\phi}_s(x)$$

$$\left[\hat{\theta}_s(y), \left[\hat{\theta}_s(y), \left(\partial_x \hat{\phi}_s(x) \right)^2 \right] \right] = -4[\delta(x-y)]^2$$

Ou seja:

$$\int dy U^{-1} \left(\partial_x \hat{\phi}_s(y) \right)^2 U = \int dy \left(\partial_x \hat{\phi}_s(y) \right)^2 - \chi \sum_x S^z(x) \int dy \delta(x-y) \partial_x \hat{\phi}_s(y) + const.$$

O que implica que:

$$\begin{aligned} U^{-1} H_0 U &= H_0 - \chi \sum_x S^z(x) \int dy \delta(x-y) \partial_x \hat{\phi}_s(y) + const. \\ &= H_0 - \chi \sum_x \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x) + const. \end{aligned}$$

ação sobre o termo de Kondo: O caso mais simples é para o termo de *forward-scattering* da componente z, usando o teorema de Baker-Hausdorff e 2.31:

$$\begin{aligned} U^{-1} H_1^{(f)} U &= J \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_x U^{-1} \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x) U \\ &= J \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_x \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x) + const., \end{aligned}$$

ou seja, esse termo fica invariante sobre a ação da rotação.

Para os demais termos de *forward-scattering* devemos usar a identidade A.4 juntamente com 2.31:

$$\begin{aligned} U^{-1} H_2^{(f)} U &= \frac{J}{2\pi\alpha} \sum_x e^{i\sqrt{2\pi}\hat{\theta}_s(x)} U^{-1} \cos\left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_s(x)\right) U U^{-1} S^-(x) U + H.c. \\ &= \frac{J}{2\pi\alpha} \sum_x e^{i(-\chi+\sqrt{2\pi})\hat{\theta}_s(x)} \cos\left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_s(x) + k(x)\right) S^-(x) + H.c., \end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned} k(x) &= i\sqrt{2\pi}\chi \sum_l \left[\hat{\theta}_s(l), \hat{\phi}_s(x) \right] S^z(l) \\ &= \frac{\sqrt{2\pi}}{2} \chi \sum_l \Xi(x-l) S^z(l). \end{aligned}$$

De forma análoga, os termos de *back-scattering* se escrevem como:

$$\begin{aligned} U^{-1} H_1^{(b)} U &= \frac{2J}{\pi\alpha} \sum_x \left\{ \sin\left[-2k_F x + \sqrt{2\pi}\hat{\phi}_c(x)\right] \sin\left[\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_s(x) + k(x)\right] \right\} S^z(x) \\ U^{-1} H_2^{(b)} U &= \frac{J}{2\pi\alpha} \sum_x e^{i(-\chi+\sqrt{2\pi})\hat{\theta}_s(x)} \cos\left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_c(x) + 2k_F x\right) S^-(x) + H.c. \end{aligned}$$

Fica evidente que se escolhermos $\chi = \sqrt{2\pi}$, $H_2^{(f)}$ e $H_2^{(b)}$ se simplificam para:

$$\begin{aligned} U^{-1} H_2^{(f)} U &= \frac{J}{\pi\alpha} \sum_x \cos\left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_s(x) + k(x)\right) S^x(x) \\ U^{-1} H_2^{(b)} U &= \frac{J}{\pi\alpha} \sum_x \cos\left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_c(x) + 2k_F x\right) S^x(x) \end{aligned}$$

Em resumo, após essa transformação canônica, a hamiltoniana total se escreve como:

$$\boxed{H = H_0 + \Delta J \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x) + \frac{J}{\pi\alpha} \sum_x \cos\left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_s(x) + k(x)\right) S^x(x) + \frac{J}{\pi\alpha} \sum \cos\left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}_c(x) + 2k_F x\right) S^x(x),}$$

onde:

$$\boxed{\Delta J = J - \pi} \text{ e } \boxed{k(x) = \pi \sum_l \Xi(x-l) S^z(l)}.$$

Note que o termo em ΔJ é não perturbativo para J pequeno, já que ele é maior que 1. Além disso será importante termos em mente que a ação de um *ket* da base de S_{total}^z sobre $k(x)$ gera apenas uma fase(veja figura 2.3.3).

o ponto de “Toulouse” O problema Kondo de 2 canais apresenta um importante limite que é exatamente solúvel. Este é conhecido como ponto de Toulouse e consiste em considerarmos $J^z = \pi$ (veja o

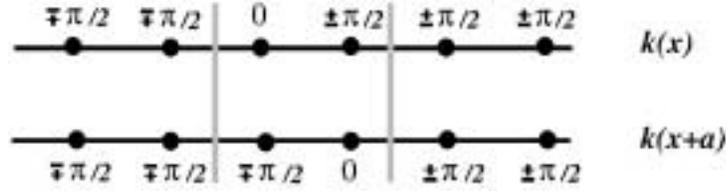


Figura 2.3: ação de um auto-estado de S_{total}^z sobre $k(x)$ e $k(x+a)$.

parágrafo 2.2.2). Esse ponto do espaço de parâmetros é um atrator do fluxo de grupo de renormalização (como esta descrito no parágrafo 2.6.5), Já os pontos $J^z = 0$ e $J^z = 2\pi$ são pontos instáveis do fluxo.

No ponto de “Toulouse”, a hamiltoniana da rede de Kondo, na base transformada, por U tem a forma:

$$H = H_0 + \frac{J}{\pi\alpha} \sum_x \cos \left(\sqrt{2\pi} \hat{\phi}_s(x) + k(x) \right) S^x(x) + \cos \left(\sqrt{2\pi} \hat{\phi}_c(x) + 2k_F x \right) S^x(x)$$

Que formalmente parece muito com uma sine-Gordon. Usando esse fato, os autores de [91, 90], argumentaram que nesse caso haveria um *gap* de spin no espectro.

rotação em sistemas densos

Os resultados do parágrafo anterior são muito instrutivos, contudo podem ser questionados. De forma implícita na demonstração, foi tomado o limite do parâmetro de rede bosônico tendendo a zero antes de se tomar o limite do número de spins tendendo ao infinito. Isso condiz com a idéia de bosonização ser um método de teoria de campo, sendo somente válido no limite contínuo. Contudo, fisicamente, isso quer dizer que os spins estão infinitamente separados do ponto de vista da escala microscópica do problema, e assim resultados obtidos com a ação anterior não são válidos para uma rede densa de spins. Isso foi primeiramente levantado em [36, 37], onde os autores regularizaram a teoria bosônica (considerando uma relação de comutação suave em lugar da delta de Dirac) para simular uma interação spin-spin. O mesmo tipo de resultado pode ser obtido se considerarmos o limite dos parâmetros de rede bosônico e da rede de spin tendendo a zero simultaneamente.

Por simplicidade, vamos considerar somente a hamiltoniana:

$$H^z = H_0 + \frac{J^z}{a} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int dx \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x) \quad (2.32)$$

que é muito próxima da forma hamiltoniana da componente z do efeito Jahn-Teller cooperativo.

Como vimos anteriormente a ação de U sobre o hamiltoniano livre pode ser resumida a calcularmos:

$$U^{-1} \int dx \partial_x \phi^2(x) U$$

como U é aplicação linear, comuta com a integral:

$$\int dx U^{-1} \partial_x \phi^2(x) U = \int dx U^{-1} \partial_x \phi(x) U U^{-1} \partial_x \phi(x) U$$

Usando o teorema de Baker-Hausdorff:

$$\begin{aligned} U^{-1} \partial_x \phi(x) U &= \partial_x \phi(x) + i\chi \left[\sum_y \theta(y) S^z(y), \partial_x \phi(x) \right] \\ &\quad - \frac{\chi^2}{2} \left[\left[\sum_y \theta(y) S^z(y), \partial_x \phi(x) \right], \sum_y \theta(y) S^z(y) \right] + \dots \\ &= \partial_x \phi(x) - \frac{\chi}{2} \sum_y \delta(x-y) S^z(y) \end{aligned}$$

Com isso a ação de U é simplesmente:

$$\begin{aligned} \int dx U^{-1} \partial_x \phi(x) U U^{-1} \partial_x \phi(x) U &= \int dx \partial_x \phi^2(x) - \chi \int dx \sum_y \delta(x-y) \partial_x \phi(x) S^z(y) \\ &\quad + \frac{\chi^2}{4} \int dx \sum_{y\bar{y}} \delta(x-y) \delta(x-\bar{y}) S^z(y) S^z(\bar{y}) \end{aligned}$$

O calculo até aqui é o mesmo que fizemos no parágrafo anterior e a história terminaria se as delta de Dirac fossem “realmente deltas”. O problema é que bosonização é um método assintótico[37]. Dentro do método existe um *cut-off* da ordem do momento de Fermi. Esse *cut-off* diverge com o tamanho do sistema, L , e mais importante ainda com o inverso da largura de banda efetiva α (de certa forma está ligada ao parâmetro de rede, a). Como S^z também é uma função definida na rede, com as sua respectiva delta de Dirac divergindo com a mesma dependência no *cut-off* bosônico, devemos tomar o limite simultâneo para as deltas de Dirac e o termo oscilante $S^z S^z$.

Na representação de momentos:

$$S^z(y) = \sqrt{\frac{c}{M}} \sum_k e^{ikx} S_k^z$$

onde M é o número de sítios bosônicos, c é a razão entre o parâmetro de rede dos spins e da rede bosônica (estamos assumindo que é um inteiro), $k = \frac{2\pi c}{M} I$ ($I \in [-\frac{M}{2c}, \frac{M}{2c}]$), $x \in [-\frac{M}{2c}, \frac{M}{2c}]$.

Por outro lado, a função delta bosônica, pode ser escrita no espaço de momentos como:

$$\delta(x-y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dl e^{i(x-y)l} = \frac{1}{\alpha} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_p e^{i(x-y)p} = \frac{1}{\alpha} \delta_{x,y}$$

onde $p = \frac{2\pi}{M}I$, I é um inteiro e α é o inverso do *cut-off* (ou do parâmetro de rede).

$$U^{-1} \int dx \partial_x \phi^2(x) U = \int dx \partial_x \phi^2(x) - \chi \frac{\delta x}{\alpha} \sum_x \partial_x \phi(x) S^z(x) +$$

$$\frac{\chi^2}{4\alpha} \frac{\delta x}{\alpha} \sum_{xy\bar{y}} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M^2} \sum_{p\bar{p}} e^{i(x-y)p+i(x-y)\bar{p}} S^z(y) S^z(\bar{y})$$

A somatória sobre os sítios também é sobre o limite de $M \rightarrow \infty$, por isso todas comutam.

$$U^{-1} \int dx \partial_x \phi^2(x) U = \int dx \partial_x \phi^2(x) - \chi \frac{\delta x}{\alpha} \sum_x \partial_x \phi(x) S^z(x) +$$

$$\frac{\chi^2}{4\alpha} \frac{\delta x}{\alpha} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M^2} \sum_{xy\bar{y}\bar{p}} e^{i(x-y)p+i(x-y)\bar{p}} S^z(y) S^z(\bar{y})$$

Passando os spins para a representação de momentos:

$$= H_0 - \chi v_F \frac{\delta x}{\alpha} \sum_y \partial_x \phi(y) S^z(y) +$$

$$+ \frac{c\chi^2}{4\alpha} v_F \frac{\delta x}{\alpha} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M^3} \sum_{xy\bar{y}\bar{p}pkq} e^{i(k-p)y+i(p+\bar{p})x+i(q-\bar{p})\bar{y}} S_k^z S_q^z$$

As somas x, y, \bar{y} , são sobre a subrede dos spins. A soma sobre essa subrede é uma delta de Kronecker para os componentes de Fourier dos spins (k, q) , com isso: $k = p, q = \bar{p}$ e $p = -\bar{p}$, ou seja: $k = -q$.

$$U^{-1} H_0 U = H_0 - \chi v_F \frac{\delta x}{\alpha} \sum_y \partial_x \phi(y) S^z(y) +$$

$$+ \frac{\chi^2}{2c^2} \frac{v_F}{\alpha} \frac{\delta x}{\alpha} \sum_{k>0}^{\Lambda} S_k^z S_{-k}^z$$

Onde Λ é o maior momento comum a rede bosônica e a rede dos spins, como a maior componente de Fourier dos bósons é da ordem do momento de Fermi:

$$\Lambda \sim k_F \leq \frac{\pi}{a}$$

Usando que $\delta x/\alpha \cong 1$:

$$U^{-1} H_0 U = H_0 - \chi v_F \sum_y \partial_x \phi(y) S^z(y) +$$

$$+ \frac{\chi^2}{2c^2} \frac{v_F}{\alpha} \sum_{k>0}^{\Lambda} S_k^z S_{-k}^z$$

Fourier transformando o termo independente do campo bosônico:

$$\sum_{k>0}^{\Lambda} S_k^z S_{-k}^z = \sum_{x,y} \frac{c}{M} \sum_{k>0}^{\Lambda} e^{-i(x-y)k} S^z(x) S^z(y)$$

o que no limite contínuo tem a forma⁷ :

$$\begin{aligned} \sum_{k>0}^{\Lambda} S_k^z S_{-k}^z &= \frac{a}{2\pi} \sum_{x,y} \int_0^{\Lambda} dk e^{-i(x-y)k} S^z(x) S^z(y) \\ &= \frac{a}{\pi} \sum_{x \neq y} \frac{e^{-i(x-y)\Lambda} - 1}{2i(x-y)} S^z(x) S^z(y) + const. \\ &= \frac{2a}{\pi} \sum_{x>y} \frac{\sin(\Lambda(x-y))}{(x-y)} S^z(x) S^z(y) + const. \end{aligned}$$

Assim a hamiltoniana na base transformada por U é:

$$\begin{aligned} \bar{H}_0 &= H_0 - \chi v_F \sum_y \partial_x \phi(y) S^z(y) + \\ &+ \frac{\chi^2}{\pi c^2} \frac{v_F a}{\alpha} \sum_{x>y} \frac{\sin(\Lambda \Delta x)}{\Delta x} S^z(x) S^z(y) + const. \end{aligned}$$

Se escolhermos $-\chi v_F = J^z \sqrt{\frac{2}{\pi}}$ e considerarmos $\alpha \sim \frac{a}{2\pi}$:

$$\begin{aligned} \bar{H}_0 &= H_0 + J^z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_y \partial_x \phi(y) S^z(y) + \\ &+ \frac{1}{c^2} \frac{2J_z^2}{\pi^2 t \sin(\frac{\pi}{2} n_c) a} \int_{x>y} dx dy \frac{\sin(\Lambda \Delta x)}{\Delta x} S^z(x) S^z(y) + const. \end{aligned}$$

Ou seja:

$$H^z = \bar{H}_0 - \frac{1}{c^2} \frac{2J_z^2}{\pi^2 t \sin(\frac{\pi}{2} n_c) a} \int_{x>y} dx dy \frac{\sin(\Lambda \Delta x)}{\Delta x} S^z(x) S^z(y) \quad (2.33)$$

Onde \bar{H}_0 é simplesmente $U^{-1} H_0 U$, tendo então os autovetores:

$$\left| \psi \left(\vec{S} \right) \right\rangle = U^{-1} |\psi\rangle \otimes \left| \vec{S} \right\rangle = e^{-i\chi \sum_y \theta(y) S^z(y)} |\psi\rangle \otimes \left| \vec{S} \right\rangle \quad (2.34)$$

onde \vec{S} é uma configuração Ising dos spins e ψ auto-estado da hamiltoniana bosônica livre.

Esse tipo de análise é bem conhecido na literatura do problema Jahn-Teller cooperativo[29]. Sendo denominado de método do operador de deslocamento. Usualmente ele é desenvolvido no espaço de momentos através das definições dos campos compostos:

⁷definindo $dk = \frac{2\pi}{Ma}$

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{a}_{k,s}^\dagger = a_{k,s}^\dagger(k) - i\frac{\eta}{\sqrt{k}}S_{-k}^z \\ \bar{b}_{k,s}^\dagger = b_{k,s}^\dagger(k) - i\frac{\eta}{\sqrt{k}}S_k^z \end{array} \right.$$

No apêndice B.6 usamos essas definições para re-obter 2.33. Com os novos operadores, podemos re-escrever 2.34 como:

$$|\psi(\vec{S})\rangle = \prod_{\{j,l\}} \bar{a}_{q_j}^\dagger \bar{b}_{q_l}^\dagger |\Omega(\vec{S})\rangle.$$

No parágrafo 2.6.4 mostraremos que o termo de interação $S^z S^z$ é de curto alcance ao introduzirmo um procedimento de *cut-off* suave.

2.4 objetivos e hipóteses

Apresentamos no parágrafo 1.1 que dentro de um tratamento de bosonização existem duas maneiras de tratarmos o problema Kondo: à moda Anderson-Yuval, com uma análise tipo grupo de renormalização; ou uma solução tipo Emery-Kivelson, que tenta refermionizar o problema evidenciando nesse novo campo as características físicas de muitos corpos.

Para a rede, nada mais natural que tentarmos seguir essas duas possíveis linhas de trabalho.

A procura de um ponto refermionizável, ou ao menos integrável, do espaço de parâmetros foi o norte de vários trabalhos. Sem dúvida o mais evidente foi o trabalho de Zachar et al. [91]. Infelizmente ainda não foi encontrada uma solução tão convincente quanto a do problema de uma única impureza.

Já uma análise tipo grupo de renormalização parece ser um objetivo mais próximo de ser atingido. Apesar de ser uma técnica aproximada, ela tem uma história muito grande de sucesso na física de matéria condensada. Como estamos trabalhando com um número muito grande de graus de liberdade, em geral, assumimos que alguns são mais relevantes que outros. O que o grupo de renormalização⁸ (RG) nos possibilita é uma maneira qualitativa de julgar quais são esses graus de liberdade relevantes. Aqueles que dominam a “física de baixas energias” do problema.

Qual a dificuldade de se estudar o grupo de renormalização da rede de Kondo?

A resposta é que não sabemos tratar a dinâmica dos spins. Como não existe uma hamiltoniana livre para eles (independente dos elétrons), não sabemos como construir sua dinâmica inicial, ou seja não conseguimos equacionar o problema de forma que nos permita aplicar a técnica. Muitos autores procuram fugir dessa situação colocando ad hoc uma interação direta entre os spins (tanto tipo RKKY como Heisenberg). Quando fazemos isso estamos assumindo uma determinada forma para a superfi-

⁸veja por exemplo o trabalho de Shankar [64] ou para problemas bosônicos o livro de Gogolin et al. [30].

cie de Fermi dos spins, só que não sabemos nem se ela existe. Além disso, estamos induzindo uma resposta a uma das maiores perguntas da física desse sistemas: os spins participam ou não do volume da esfera de Fermi? Apesar de básica, essa pergunta ainda esta em aberto[74, 65]. Outra possibilidade seria simplesmente fecharmos os olhos a essas questões e aplicarmos os critérios de relevância usuais aos operadores bosônicos[91, 48, 28], só que ao agirmos assim, fomos ao extremo oposto e não consideramos a possibilidade da dinâmica dos spins alterar tais critérios.

Nosso principal objetivo será tentar entender a natureza da transição de ordem-desordem que ocorre na cadeia de Kondo. Esse tipo de pergunta é precisamente o que uma análise tipo grupo de renormalização poderá nos responder.

O que faremos será a abordagem mais clássica que se pode ter a um problema que não se sabe tratar: vamos mapeá-lo em um problema que nos sabemos como operar o grupo de renormalização.

Para fazermos isso vamos assumir duas hipóteses simplificadoras:

i) bosonização é completamente válida em sua forma padrão.

Isso automaticamente implica que os spins serão tratados como um sistema discreto nas variáveis bosônicas. Apesar dessa hipótese parecer óbvia ela carrega em si um caráter físico muito grande, afinal apenas flutuações do campo eletrônico é que serão consideradas e não o campo em si. Nesse ponto nosso trabalho diverge na análise feita por Honner e Gulácsi[36], já que eles modificaram as relações de comutação do campo bosônico e com isso colocaram ad-hoc a interação entre os spins.

ii) Os termos de “*back-scattering*” podem ser negligenciados na análise da transição de fase de ordem-desordem.

Os termos de “*back-scattering*” estão conectados ao líquido RKKY encontrado em [74], já que são eles que apresentam uma oscilação tipo $2k_F$. No problema de uma única impureza esse termos não estão presentes, o que por si só já é um argumento para que em uma primeira análise da relação entre efeitos de correlação e o efeito Kondo nos esqueçamos deles. O argumento padrão [90] é que dentro da fase incomensurada esses termos oscilantes seriam irrelevantes. Isto é extremamente qualitativo, mas parece ser “universalmente” aceito. A consequência mais óbvia de não incluirmos esses termos será o fato de não podermos explicar com nossa análise os picos tipo $2k_F$ nos fatores de estrutura de spin. De forma mais sutil, devemos ter em mente que estamos negligenciando parte das correlações entre os spins, ou seja, privilegiando o efeito Kondo no problema. A manifestação concreta no formalismo dessa negligência é que estamos desacoplando completamente os campos de carga e spin e esquecendo do acoplamento do campo de carga com os spins localizados. Isso poderá nos levar a um diagrama de fase que não corresponde quantitativamente aos resultados existentes. Finalmente, existe um problema de método, o qual apontamos no parágrafo 2.3. Como não podemos encontrar um auto-estado simultâneo de todos os fatores de Klein, pode não ser lícito esquecer da existência desses fatores⁹.

⁹o que a maioria dos autores faz.

Com essas duas hipóteses, a hamiltoniana renormalizada pela velocidade de Fermi que iremos considerar de agora em diante é:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (2.35)$$

$$H_1 = J_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_x \partial_x \hat{\phi}(x) S^z(x)$$

$$H_2 = \frac{J_{\perp}}{4\pi\alpha} \sum_x \left[F_R^\dagger e^{-i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}(x)-\hat{\theta}(x))} + F_L^\dagger e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}(x)+\hat{\theta}(x))} \right] S^-(x) + h.c.$$

onde $F_L^\dagger = F_{L\uparrow}^\dagger F_{L\downarrow}$, $F_R^\dagger = F_{R\uparrow}^\dagger F_{R\downarrow}$ e $J_{z,\perp} = \frac{J_{z,\perp}^{original}}{v_F}$. Esquecemos o sub-índice s porque a dinâmica do campo de carga se tornou trivial (é um campo livre) e não mais precisamos nos preocupar com ele.

Todo tratamento de um problema físico envolve algum grau de simplificação, o que podemos é apenas esperar não termos simplificado em demasia.

2.5 função de partição e integrais de caminho na base S^z

A hamiltoniana que estamos interessados em estudar é a dada pelas equações 2.35. Podemos mostrar que os fatores de Klein são irrelevantes (veja apêndice B.5). Nosso principal objetivo nesse parágrafo será encontrar uma forma conveniente de escrevermos a função de partição do problema.

$$Z = e^{-\beta H}$$

Lembrando que já que havíamos normalizado a hamiltoniana pela velocidade de Fermi, devemos também renormalizar a temperatura: $\beta = v_F \beta_{real}$.

Para passarmos para integrais de caminho e calcularmos a função de partição, usaremos os estados coerentes do campo bosônico e a base de S^z . Após dividirmos em fatias temporais infinitesimais, $\delta\tau$, e expandirmos a exponencial, obtemos:

$$Z = \sum_{n=0} \frac{1}{n!} (\delta\tau)^n \langle \psi(\tau_j) | H^n | \psi(\tau_{j+1}) \rangle$$

Como $\delta\tau$ deve tender a zero, podemos considerar apenas a correção de primeira ordem aos termos não divergentes:

$$Z = 1 + \delta\tau \langle \psi(\tau_j) | \text{termos não divergentes} | \psi(\tau_{j+1}) \rangle + \text{termos diverg.}$$

Para os termos divergentes vamos assumir que a divergência do *cut-off* é o inverso da divergência das frequências de Matsubara. Isso imediatamente implica que a única contribuição da n -ésima potência da hamiltoniana, será a n -ésima potência do termo divergente.

Devemos calcular:

$$\delta\tau \langle \vec{s}(\tau_j) | S^z | \vec{s}(\tau_{j+1}) \rangle \quad e \quad \delta\tau^n \langle \vec{s}(\tau_j) | (S^\pm)^n | \vec{s}(\tau_{j+1}) \rangle$$

onde \vec{s} é um elemento da base de S^z . Só existem 2 possibilidades para $\vec{s}(\tau_j)$ e $\vec{s}(\tau_{j+1})$, ou todos os spins são paralelos ou existe pelo menos 1 spin antiparalelo¹⁰:

- se não há um spin *flip* entre as fatias de tempo j e $j + 1$:

$$\tau_j \langle \phi, \vec{s} | \phi, \vec{s} \rangle_{\tau_{j+1}} - \delta\tau f(\phi(\tau)) S^z(\tau),$$

- se há n spin-*flips*:

$$\left(-\delta\tau \frac{J_\pm}{4\pi\alpha} \right)^n e^{\pm \sum_j i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(x_j) \pm \hat{\theta}_s(x_j))},$$

onde n é o número de *flips*. Como o que importa são os *flips* na direção temporal vamos definir o nome *time-kink* para designá-los. Outra quantidade importante é:

$$y = \frac{J_\pm \delta\tau}{4\pi\alpha}$$

e será posteriormente identificada como a fugacidade do sistema efetivo que encontraremos.

Ou seja, se há n -*flips* entre t_j e t_{j+1}

$$e^{\int_0^{t_j} d\tau H(\phi, \theta, S^z)} \left(\frac{\delta\tau |J_\pm|}{4\pi\alpha} \right)^n e^{\int_{t_j}^{t_{j+1}} d\tau H(\phi, \theta, S^z)} = e^{\int_0^{t_{j+1}} d\tau H(\phi, \theta, S^z) + n \ln(y)}$$

10

$$\langle \vec{s}(\tau_j) | S^z | \vec{s}(\tau_{j+1}) \rangle = \begin{cases} \pm \frac{1}{2} & \text{se são paralelos} \\ 0 & \text{se são antiparalelos} \end{cases}$$

$$\langle \vec{s}(\tau_j) | \frac{S^\pm}{2} | \vec{s}(\tau_{j+1}) \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{se são antiparalelos} \\ 0 & \text{se são paralelos} \end{cases}$$

$$\prod_j \left(\tau_j \langle \vec{s}, \phi | \vec{s}, \phi \rangle_{\tau_{j+1}} - \delta\tau_{\tau_j} \langle \vec{s}, \phi | H | \vec{s}, \phi \rangle_{\tau_{j+1}} \right)$$

$$\prod_j \left(\tau_j \langle \vec{s}, \phi | \vec{s}, \phi \rangle_{\tau_{j+1}} - \delta\tau_{\tau_j} \langle \vec{s}, \phi | f(\phi) S^z + \frac{J_\pm}{2\pi\alpha} e^{\pm i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(x) \pm \hat{\theta}_s(x))} S^\pm | \vec{s}, \phi \rangle_{\tau_{j+1}} \right)$$

$$\prod_j \left(\tau_j \langle \vec{s}, \phi | \vec{s}, \phi \rangle_{\tau_{j+1}} - \delta\tau_{\tau_j} \langle \vec{s}, \phi | f(\phi, \theta) S^z | \vec{s}, \phi \rangle_{\tau_{j+1}} - \delta\tau_{\tau_j} \frac{J_\pm}{2\pi\alpha} \langle \vec{s}, \phi | e^{\pm i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(x) \pm \hat{\theta}_s(x))} S^\pm | \vec{s}, \phi \rangle_{\tau_{j+1}} \right)$$

Note que o sinal à frente de $\delta\tau$ é irrelevante, porque pelas condições periódicas no tempo existe sempre um número par de inversões de spin em toda história de um spin (*time-line*). De agora em diante, assumiremos que $\delta\tau$ é da ordem do inverso do *cut-off*, de forma que sua razão com α , y , está bem definida.

Para manter a contabilidade dos sinais vamos introduzir a variável de *time-kink*:

$$q(\tau) = S^z(\tau + \delta\tau) - S^z(\tau)$$

De maneira geral temos a função de partição:

$$\begin{aligned} Z = \sum_{\{\sigma\}} \int D\hat{\phi} D\hat{\theta} \exp \left\{ -S_0 - J_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_x \int d\tau \partial_x \hat{\phi}(x, \tau) S^z(x, \tau) + \right. & (2.36) \\ & + \sum_j i\sqrt{2\pi} \left(q(j) \hat{\theta}(j) + (1 - \nu(j)) q(j) \hat{\phi}(j) \right) \\ & \left. + N \ln(y) \right\} \end{aligned}$$

onde $\{\sigma\}$ são todas as configurações de spins de Ising no espaço-tempo, a soma sobre j é sobre todos as posições do espaço tempo onde ocorrem *time-kinks*, $\nu(j)$ é igual a zero se o *kink* foi ocasionado por um boson do ramo direito ou 2 se foi ocasionado por um boson do campo esquerdo, e N é o número total de spins *flips*.

Será útil, escrevermos a função de partição em sua forma quiral:

$$\begin{aligned} Z = \sum_{\{\sigma\}} \int D\phi D\varphi \exp \left\{ -S_0 - J \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_x \int d\tau (\partial_x \phi(x, \tau) + \partial_x \varphi(x, \tau)) S^z(x, \tau) + \right. \\ & - i\sqrt{8\pi} \sum_j q(j) \phi(j) + i\sqrt{8\pi} \sum_l q(l) \varphi(l) \\ & \left. + N \ln(y) \right\} \end{aligned}$$

onde j é a soma sobre os *flips* ocasionados por bosons do campo direito e l a soma sobre os *flips* ocasionados pelo campo esquerdo.

2.6 ação efetiva e o gás de Coulomb

Agora que temos a função de partição na base z dos spins podemos nos perguntar qual a natureza do estado fundamental do sistema. Para respondermos a isso vamos empregar a técnica de grupo de renormalização.

A grande dificuldade que se apresenta é que os spins não tem uma relação de dispersão própria,

o que impossibilita o uso tradicional da técnica. Diversos autores introduziram ad hoc termos tipo Heisenberg ou RKKY para através dessa dinâmica induzida aplicar o grupo de renormalização. Em lugar de seguir essa direção, vamos nos voltar para o exemplo histórico e lembrar da abordagem de Anderson-Yuval-Hamman para o problema Kondo.

Como vimos no parágrafo 2.2.1, eles traçaram os graus de liberdade bosônicos e construíram uma ação efetiva para os spins. O que faremos agora é exatamente isso, traçar os graus de liberdade bosônicos e tentar entender o significado da ação resultante.

Como mostraremos a seguir esse procedimento nos levará a representar o problema de forma assintótica como um gás de Coulomb generalizado. Cada configuração de spin poderá ser representada como um conjunto de partículas compostas de cargas elétricas e magnéticas. Uma parcela da função de partição será meramente a exponencial da energia eletro-magnética estática da configuração do gás pesada pelo potencial químico (fugacidade) do mesmo.

A literatura do gás de Coulomb é muito vasta e como veremos um formalismo muito poderoso. Já que ele surgiu a partir de uma ação efetiva, ele nos permite conectar problemas físicos inicialmente distintos. Outra característica importante do problema de gás de Coulomb são as condições de neutralidade a que ele está sujeito. Devemos tratar sempre com configurações do gás que são neutras. Como derivamos o gás a partir de um teoria contínua, um gás carregado representaria um estado do campo com energia infinita. Obviamente, os problemas de estado sólido não são teorias contínuas, mas as configurações não neutras representariam estados pouco importantes a física de baixas energias. Dois gases podem ter os mesmos compostos, mas representar problemas físicos distintos com características físicas diversas, apenas por ligeiras diferenças nas condições de neutralidade impostas.

2.6.1 ação efetiva

No parágrafo 2.5 obtivemos a função de partição 2.36. Em termos do campo esquerdo e direito, a ação livre renormalizada é:

$$S_0 = \sum_{k>0} \int_0^\beta d\tau a_{k,\tau}^* (\partial_\tau + k) a_{k,\tau} + b_{k,\tau}^* (\partial_\tau + k) b_{k,\tau}$$

ou Fourier transformando para as frequências de Matsubara:

$$a_{k,\tau} = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n \tau} a_{k,\omega_n} \quad b_{k,\tau} = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} b_{k,\omega_n} \quad \omega_n = \frac{2\pi}{\beta} n$$

onde n é um inteiro (no caso de condições periódicas de contorno)[55].

$$S_0 = \frac{1}{\beta} \sum_{k>0} \sum_{\omega_n} (k + i\omega_n) a_{k,\omega_n}^* a_{k,\omega_n} + (k - i\omega_n) b_{k,\omega_n}^* b_{k,\omega_n}$$

Decompondo os termos Kondo da ação em suas componentes esquerda e direita, obtemos:

$$S_R = S_{0R} - \sum_{\omega_n} \sum_{k>0} \left(\sqrt{k} f(k, \omega_n) - \frac{g(k, \omega_n)}{\sqrt{k}} \right) a_{k, \omega_n}^\dagger + \left(f^*(k, \omega_n) \sqrt{k} + \frac{g^*(k, \omega_n)}{\sqrt{k}} \right) a_{k, \omega_n}$$

$$S_L = S_{0L} - \sum_{\omega_n} \sum_{k>0} \left(\sqrt{k} f^*(k, \omega_n) + \frac{g^*(k, \omega_n)}{\sqrt{k}} \right) b_{k, \omega_n}^\dagger + \left(-f(k, \omega_n) \sqrt{k} + \frac{g(k, \omega_n)}{\sqrt{k}} \right) b_{k, \omega_n}$$

onde:

$$f(k, \omega_n) = \frac{iJ_z}{\beta\sqrt{\pi L}} \sum_x \int d\tau S^z(x, \tau) e^{-ikx - i\omega_n \tau}$$

$$g(k, \omega_n) = \frac{i}{\beta} \sqrt{\frac{4\pi}{L}} \sum_i q(i) e^{-ikx_i - i\omega_n \tau_i}$$

Fazendo a integral gaussiana obtemos a ação efetiva:

$$\begin{aligned} S_{ef} = & - \sum_{x_1 > x_2} \int_{\tau_1 > \tau_2} d\tau_1 d\tau_2 S^z(1) K_1(1, 2) S^z(2) + \\ & - \sum_{i > j} q(i) K_{2R} q(j) - \sum_{l > m} q(l) K_{2L} q(m) \\ & + \sum_j \sum_{x_1} \int d\tau_1 S^z(1) K_{3R}(1, j) q(j) \\ & + \sum_l \sum_{x_1} \int d\tau_1 S^z(1) K_{3L}(1, j) q(l) + N \ln(y) \end{aligned}$$

onde (i, j) são somas sobre as coordenadas dos *kinks* ocasionados pelo campo direito e (l, m) coordenadas de *kinks* ocasionados pelo campo esquerdo. Precisamos simplesmente calcular os propagadores spin-spin (K_1), *kink-kink* (K_2) e spin-*kink* (K_3). Esse cálculo se encontra no apêndice B.2. O termo que devemos analisar com cuidado é o propagador K_1 :

$$K_1(r, \varphi) = \frac{J_z^2 \cos(2\varphi)}{\pi^2 r^2} + \tilde{K}_1$$

onde:

$$\tilde{K}_1 = \frac{J_z^2}{\pi^2} (1 - \cos(2\varphi)) \frac{\Lambda}{r} J_1(r\Lambda) - \frac{J_z^2 \cos(2\varphi)}{\pi^2 r^2} J_0(\Lambda r). \quad (2.37)$$

Inicialmente perceba que o termo da função de Bessel de ordem zero em \tilde{K}_1 é dominado pelo termo não oscilante. Isso nos permite aproximar o propagador por:

$$K_1(r, \varphi) \cong \frac{J_z^2 \cos(2\varphi)}{\pi^2 r^2} + \frac{J_z^2}{\pi^2} (1 - \cos(2\varphi)) \frac{\Lambda}{r} J_1(r\Lambda) \quad (2.38)$$

Claramente percebemos que existem duas contribuições bem distintas. Como veremos adiante, o termo não oscilante corresponde ao favorecimento (ou não) de um *flip* de spin. Em termos técnicos, ele contribui para a dimensão do operador de inversão de spins. Por outro lado, a função de Bessel é de longo alcance, tendo um decaimento como $r^{-3/2}$. Em princípio poderíamos pensar que esse seria o termo dominante da física de longas distâncias desse propagador. O surgimento desse tipo de função está ligado ao fato de termos usado um *cut-off* abrupto. Se em lugar disso, introduzirmos um procedimento de *cut-off* suave essa função se torna de curto alcance. Isso nos permite despreza-la para distâncias maiores que Λ^{-1} . Esse tipo de procedimento não é incomum no cálculo de funções de correlações bosônicas. Por exemplo, no estudo do grupo de renormalização do problema de sine-Gordon quando se calcula a função de correlação dos campos rápidos, rigorosamente obtemos:

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle_{>} = J_0(\Lambda r)$$

que em princípio é de longo alcance. Apenas com a inclusão de um *cut-off* suave é que podemos passar a um sistema de coordenadas relativas x_1 e x_2 para calcularmos as equações de renormalização[30, pag. 77] da função de onda. Como estamos interessados em posteriormente calcular as equações do grupo de renormalização é então consistente com esse objetivo desprezarmos os termos oscilantes. Porém é fundamental entender que quando formos levados a considerar fenômenos que ocorrem da ordem do comprimento efetivo bosônico não podemos desprezar sua existência.

Mantendo apenas o termo não oscilante e considerando os demais propagadores, somos levados a ação efetiva da rede de Kondo¹¹:

$$\begin{aligned} S_{ef} = & 2 \sum_{i>j} q(i) q(j) [\ln |r_{ij}| + i\varphi_{ij}] + 2 \sum_{l>m} q(l) q(m) [\ln |r_{lm}| - i\varphi_{lm}] \\ & + \frac{J_z^2}{\pi^2} \sum_{x_1>x_2} \int_{\tau_1>\tau_2} d\tau_1 d\tau_2 \frac{\cos(2\varphi_{12})}{r^2} S^z(1) S^z(2) \\ & + \frac{J_z}{\pi} \sum_{x,j} \int d\tau \left(\frac{\cos(\varphi_{xj})}{|r_{xj}|} + i \frac{\sin(\varphi_{xj})}{|r_{xj}|} \right) S^z(x, \tau) q(j) \\ & + \frac{J_z}{\pi} \sum_{x,l} \int d\tau \left(\frac{\cos(\varphi_{xl})}{|r_{xl}|} - i \frac{\sin(\varphi_{xl})}{|r_{xl}|} \right) S^z(x, \tau) q(l) \\ & + N \ln y \end{aligned}$$

¹¹lembre que havíamos definido que $\{i, j\}$ correspondem ao conjunto de quinqües ligados ao campo direito e $\{l, m\}$ aos quinqües ligados ao campo esquerdo. O sinal de maior nas somatórias significa que elas foram ordenadas, de forma que não se soma duas vezes o mesmo termo.

2.6.2 representação de gás de Coulomb

Como as variáveis S^z e q são dependentes, q é a derivada parcial na direção temporal de S^z , podemos simplificar ainda mais a expressão que obtivemos para a ação efetiva.

Integrando por partes os termos que envolvem os spins, obtemos:

$$K_1: \int_{\tau_1 > \tau_2} d\tau_1 d\tau_2 \frac{\cos(2\varphi_{12})}{r^2} S^z(1) S(2) = \sum_{1>2} \ln|r_{12}| q(1) q(2)$$

onde:

$$\sum_{1>2} \ln|r_{12}| q(1) q(2) = \sum_{i>j} \ln|r_{ij}| q(i) q(j) + \sum_{l>m} \ln|r_{lm}| q(l) q(m) + 2 \sum_{i>l} \ln|r_{il}| q(i) q(l)$$

K_3 :

$$\Re(K_{3R}) \rightarrow \sum_{i,x} q(i) \int d\tau S^z(x, \tau) \frac{\cos(\varphi_{ix})}{|r_{ix}|} = -2 \sum_{i>j} \ln|r_{ij}| q(i) q(j) - \sum_{il} \ln|r_{il}| q(i) q(l)$$

$$\Re(K_{3L}) \rightarrow \sum_{l,x} q(l) \int d\tau S^z(x, \tau) \frac{\cos(\varphi_{lx})}{|r_{lx}|} = -2 \sum_{l>m} \ln|r_{lm}| q(l) q(m) - \sum_{li} \ln|r_{li}| q(l) q(i)$$

$$\Im(K_{3R}) \rightarrow \sum_{i,x} q(i) \int d\tau S^z(x, \tau) \frac{\sin(\varphi_{ix})}{|r_{ix}|} = -2 \sum_{i>j} \varphi_{ij} q(i) q(j) - \sum_{i,l} \varphi_{il} q(i) q(l)$$

$$\Im(K_{3L}) \rightarrow \sum_{l,x} q(l) \int d\tau S^z(x, \tau) \frac{\sin(\varphi_{lx})}{|r_{lx}|} = -2 \sum_{l>m} \varphi_{lm} q(l) q(m) - \sum_{l,i} \varphi_{li} q(l) q(i)$$

É importante perceber que o termo de borda da integração é nulo pelas condições periódicas do problema. No parágrafo seguinte demonstraremos que o resultado é independente da escolha do ramo do logaritmo.

Coletando todos os resultados, chegamos a ação efetiva:

$$\begin{aligned}
S_{ef} = & 2 \sum_{i>j} q(i) q(j) [\ln |r_{ij}| + i\varphi_{ij}] + 2 \sum_{l>m} q(l) q(m) [\ln |r_{lm}| - i\varphi_{lm}] \\
& + \frac{J^2}{\pi^2} \sum_{i>j} \ln |r_{ij}| q(i) q(j) + \sum_{l>m} \ln |r_{lm}| q(l) q(m) + \sum_{i>l} \ln |r_{il}| q(i) q(l) \\
& - \frac{J}{\pi} \left(2 \sum_{i>j} \ln |r_{ij}| q(i) q(j) + \sum_{i>l} \ln |r_{il}| q(i) q(j) + 2i \sum_{i>j} \varphi_{ij} q(i) q(j) \right) \\
& + \sum_{il} \varphi_{il} q(i) q(l) - \frac{J}{\pi} \left(2 \sum_{l>m} \ln |r_{lm}| q(l) q(m) + \sum_{i>l} \ln |r_{il}| q(i) q(j) \right) \\
& - 2i \sum_{l>m} \varphi_{lm} q(l) q(m) - \sum_{il} \varphi_{il} q(i) q(l) + N \ln y
\end{aligned}$$

Podemos tornar essa expressão mais compacta se usarmos as definições:

- para os *kinks* oriundos do campo direito: $m(i) = e(i) = q(i)$
- para os *kinks* oriundos do campo esquerdo: $m(l) = -e(l) = q(l)$
- $\kappa = \left(1 - \frac{J_z}{\pi}\right)$

$$\boxed{S_{ef} = \sum_{i>j} \ln |r_{ij}| (\kappa^2 m(i) m(j) + e(i) e(j)) - i\kappa \varphi_{ij} (e(i) m(j) + m(i) e(j)) + N \ln y}$$

Que como havíamos predito é a energia eletro-magnética estática de um gás de Coulomb generalizado, composto de partículas com carga elétrica, e , e carga magnética, m . Cada partícula corresponde a um *flip* no tempo imaginário do spin localizado da rede de Kondo. Do ponto de vista do campo gaussiano, cada partícula corresponde a um vórtice no campo proveniente da retirada da área do espaço-tempo onde ocorreu o *flip* na direção temporal (figura 2.4). A inclusão de um par *flip-antiflip* pode ser entendida como uma mudança na topologia do espaço-tempo, aumentando o *genus* da variedade de 2 [4].

A representação de gás de Coulomb não é fiel, já que o vácuo do gás não é único. Isso vem do fato de que as cargas correspondem a inversões de spins apenas na direção temporal, o que torna o vácuo “insensível” a configuração espacial (veja figura 2.5). Por conta disso, se uma cadeia tem N sítios, o vácuo do gás corresponde a 2^N configurações de spin.

2.6.3 relações de dualidade e condições de neutralidade

Em termo das componentes de Fourier dos campos, a ação livre, S_0 , se escreve como:

$$S_0 = \frac{1}{2} \int dx d\tau \partial_x \hat{\phi}^2 + \partial_x \hat{\theta}^2 - i\partial_x \hat{\phi} \partial_\tau \hat{\theta} - i\partial_\tau \hat{\phi} \partial_x \hat{\theta} \quad (2.39)$$

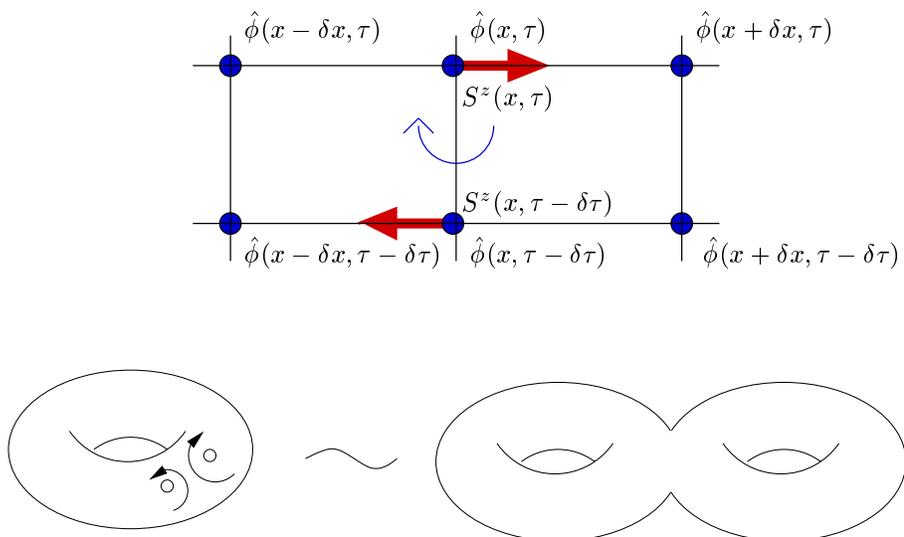


Figura 2.4: tendência a formação de vórtices no campo gaussiano por conta dos *flips* na direção temporal. Um par vórtice-antivórtice muda a topologia do espaço-tempo.

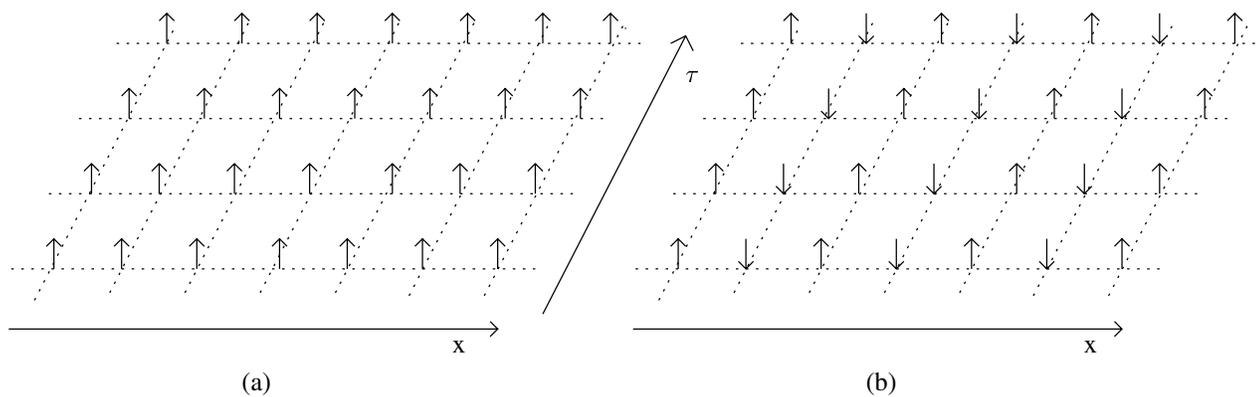


Figura 2.5: o vácuo do gás de Coulomb corresponde a 2^N configurações de spin.

onde $\hat{\theta}$ e $\hat{\phi}$ foram definidos como no modelo hamiltoniano. Em teoria de campo, costuma-se definir o campo conjugado em função das relações de dualidade:

$$\partial_x \hat{\phi} = i\partial_\tau \hat{\theta} \quad \text{e} \quad \partial_\tau \hat{\phi} = -i\partial_x \hat{\theta}.$$

Do ponto de vista da bosonização construtiva essa identidade é assintótica. Além disso muito cuidado deve ser tomado quando temos um campo de calibre no problema, por exemplo um campo elétrico, porque então a identidade deve ser modificada para que sejam invariantes por transformação de calibre. Como não sabíamos a dinâmica que os spins induziam ao campo bosônico, e em princípio poderíamos pensa-los como um calibre Z_2 , até agora não havíamos usado essas relações. Contudo, do parágrafo anterior, já derivamos a ação efetiva e por isso é interessante refazer rapidamente nosso cálculo.

Nosso ponto de partida é a ação 2.36. Usando as relações de dualidade no termo de interação com os spins, obtemos:

$$iJ_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_x \int d\tau \partial_\tau \hat{\theta}(x, \tau) S^z(x, \tau) + \sum_j i\sqrt{2\pi} \left(q(j) \hat{\theta}(j) + (1 - \nu(j)) q(j) \hat{\phi}(j) \right)$$

Integrando por partes o termo em S^z :

$$\sum_j i\sqrt{2\pi} \left[\kappa q(j) \hat{\theta}(j) + (1 - \nu(j)) q(j) \hat{\phi}(j) \right] \quad (2.40)$$

Se traçarmos os campos bosônicos obtemos o resultado anterior ([30, pp. 222] ou veja o apêndice B.1):

$$S_{ef} = \sum_{i,j} \kappa^2 \ln |r_{ij}| m(i) m(j) + \ln |r_{ij}| e(i) e(j) - 2i\kappa\varphi_{i,j} e(i) m(j) + N \ln y$$

A partir da expressão 2.40 é muito simples incluímos interações de espalhamento “*foward*” entre os férmions. Usando as expressões do parágrafo 2.3.1, encontramos:

$$\sum_j i\sqrt{2\pi} \left[\frac{\kappa}{\sqrt{g}} q(j) \hat{\theta}(j) + \sqrt{g} (1 - \nu(j)) q(j) \hat{\phi}(j) \right]$$

o que nos leva a ação efetiva:

$$S_{ef} = \sum_{i>j} \frac{\kappa^2}{g} \ln |r_{ij}| m(i) m(j) + g \ln |r_{ij}| e(i) e(j) - 2i\kappa\varphi_{i,j} e(i) m(j) + N \ln y \quad (2.41)$$

O spin conforme dessa ação bosônica é dado por:

$$S_c = \kappa = 1 - \frac{J^z}{\pi},$$

o que nos coloca em uma situação difícil. Porque para que esses operadores representem a função de correlação de algum campo físico, o spin conforme tem de ser um inteiro ou um semi-inteiro. Isso é a imposição física de que a função de correlação seja independente do ramo do logaritmo, ou seja, o pré-fator de φ_{ij} tem de ser um inteiro ou um semi-inteiro.

$$\varphi_{ij} = \varphi + 2n\pi$$

A representação do gás de Coulomb é muito simples e elegante, mas aparentemente esta nos levando a uma indeterminação devido ao ramo do logaritmo. Nosso ponto de partida foi a derivada do campo, isso é que tem significado físico. Por isso vamos voltar ao ponto onde surgiu a função φ_{ij} :

$$\int d\tau S^z(x_i, \tau) \frac{\sin(\varphi)}{r} = \sum_{\tau} \delta\tau S^z(x_i, \tau) \frac{\Delta x}{\Delta x^2 + \Delta\tau^2} = \sum_{\tau} \delta\tau S^z(x_i, \tau) \partial_{\tau} F(\tau, \bar{\tau}, \Delta x)$$

Que é uma integral (soma finita) totalmente bem definida. Da definição de derivada parcial, “integremos” por partes e impomos as condições periódicas de contorno:

$$\sum_{\tau} S^z(x_i, \tau) (F(\tau + \delta\tau, \bar{\tau}, \Delta x) - F(\tau, \bar{\tau}, \Delta x)) = - \sum_{\tau} (S^z(x_i, \tau) - S^z(x_i, \tau - \delta\tau)) F(\tau, \bar{\tau}, \Delta x)$$

Como era esperado:

$$F(\tau, \bar{\tau}, \Delta x) = \arctan\left(\frac{\Delta x}{\Delta\tau}\right) = \varphi + 2\pi n, \quad \varphi \in]-\pi, \pi[\text{ e } n \in \mathbb{Z}$$

que apresenta a dependência com o ramo do logaritmo (φ foi definido no ramo principal do logaritmo, mas poderíamos escolher qualquer outro que fosse conveniente). Fixe um ramo da superfície de Riemann (fixe n)

$$- \sum_{\tau} (S^z(x_i, \tau) - S^z(x_i, \tau - \delta\tau)) F(\tau, \bar{\tau}, \Delta x) = - \sum_{\tau_i} q(x_i, \tau_i) (\varphi_i + 2\pi n)$$

onde i é a posição do *flip*.

Da condição de periodicidade dos spins no tempo:

$$\sum_{\tau_i} q(x_i, \tau_i) = 0$$

o que implica que:

$$\int d\tau S^z(x_i, \tau) \frac{\sin(\varphi)}{r} = - \sum_{\tau_i} q(x_i, \tau_i) \varphi_i$$

é univaluada como deveria ser. Ou seja, a aparente indeterminação que surge do ramo do logaritmo é ilusória, a simples análise a partir das relações de dualidade nos levaria a pensar que o problema está mal definido. Fica claro a importância das “condições de neutralidade”. No problema que estamos tratando (e em geral em problemas de spins em líquidos de Luttinger) as condições para que uma configuração de cargas corresponde a uma configuração de spins, e assim pertença a soma da função de partição são:

1. para cada coordenada espacial a variável $q(x, \tau)$ deve ser alternada no tempo.
2. para cada coordenada espacial a carga total ao longo da direção temporal deve ser nula,

$$\sum_{\tau} q(x, \tau) = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{\tau} (1 - v(x, \tau)) = 0.$$

Nos chamaremos essas restrições como condições de neutralidade forte (veja apêndice B.4).

2.6.4 campo composto: correspondência entre a relação de dualidade e a rotação do campo bosônico

Vimos que aparentemente existem dois caminhos para estudar o problema da rede de Kondo: a rotação do campo bosônico e o gás de Coulomb. O que vamos ver agora é que ao escolhermos uma rotação apropriada mapeamos um método no outro. Em lugar de rodarmos o campo bosônico pelo “ângulo” $\sqrt{2\pi}$, como proposto em [91], considere a rotação:

$$U = e^{i\sqrt{\frac{2}{\pi}}J_z \sum_x \hat{\theta}_s(x) S^z(x)}$$

como vimos anteriormente, ela equivale ao método do operador deslocamento. Para tanto, basta definir os operadores deslocados:

$$\begin{cases} \bar{a}_{k,s}^\dagger &= a_{k,s}^\dagger(k) + i\sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{J_z}{\sqrt{k}} S_{-k}^z \\ \bar{b}_{k,s}^\dagger &= b_{k,s}^\dagger(k) - i\sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{J_z}{\sqrt{k}} S_k^z \end{cases}$$

Da definição do campo bosônico (equações 2.4) isso implica no campo composto:

$$\bar{\phi}(x) = \hat{\phi}(x) + J_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_y \frac{a}{\pi} \int_{0+}^{\Lambda} dk \frac{\sin(k\Delta x)}{k} S^z(y)$$

Se a distância entre os spins, Δx , é sempre uma distância macroscópica com relação ao inverso do *cut-off* bosônico¹²:

$$\bar{\phi}(x) = \hat{\phi}(x) + \frac{aJ_z}{\sqrt{2\pi}} \sum_y \Xi(x-y) S^z(y)$$

em outras palavras, a rede de spin é discreta com relação a rede bosônica. Podemos regularizar o problema se introduzirmos um procedimento de *cut-off* suave como o que usamos para derivar as identidades bosônicas:

$$\bar{\phi}(x) = \hat{\phi}(x) + J_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_y \frac{a}{\pi} \int_{0+}^{\infty} dk \frac{\sin(k\Delta x)}{k} e^{-2\pi\alpha k} S^z(y)$$

O que mostra que apenas modos com comprimento de onda da ordem do inverso de α é que contribuem para a definição do campo composto. A introdução de um *cut-off* suave torna local o novo campo.

De maneira oposta, o campo dual não é “deslocado” pela rotação:

$$\bar{\theta}(x) = \hat{\theta}(x)$$

Retornando ao apêndice B.6, demonstramos que¹³:

$$\bar{H}_0 - \frac{2}{\pi} J_z^2 \sum_{k>0} S_k^z S_{-k}^z = \hat{H}_0 + J_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int dx \partial_x \hat{\phi}(x) S^z(x)$$

mas não havíamos comentado sobre o que ocorre no termo transverso da hamiltoniana. Usando as expressões derivadas no parágrafo 2.3.3, finalmente podemos dar a correta interpretação da função

¹²definindo $t = k\Delta x$

$$\bar{\phi}(x) = \hat{\phi}(x) - J_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_y \frac{a}{\pi} \int_{0+}^{\Lambda\Delta x} dt \frac{\sin(t)}{t} S^z(y)$$

e usando que $Si(x) = \int_0^x dt \frac{\sin t}{t}$, $Si(0) = 0$, $Si(\pm\infty) = \pm\frac{\pi}{2}$.

¹³ao introduzirmos um *cut-off* suave regularizamos a interação spin-spin para:

$$\frac{2}{\pi} J_z^2 \sum_{k>0} e^{-4\pi k\alpha} S_k^z S_{-k}^z = \frac{J_z^2 a c}{\pi^2} \sum_{x>y} S^z(x) S^z(y) \left(\frac{8\pi\alpha}{16\pi^2\alpha^2 + (x-y)^2} \right)$$

onde c é o número de sítios bosônicos entre dois spins e a é o parâmetro de rede dos bosons.

Essa é uma interação local, o que é consistente com o trabalho de Honner e Gulácsi[37]. Veja o apêndice B.7 para os detalhes do cálculo.

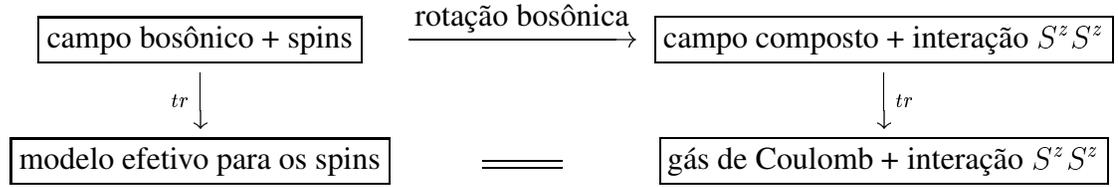


Figura 2.6: relação entre as diversas abordagens à rede de Kondo por bosonização.

$k(x)$: ela é a expressão no espaço real do deslocamento do campo bosônico pela rotação. Usando a definição de $\kappa = 1 - \frac{J_z}{\pi}$

$$H = \bar{H}_0 - \frac{2}{\pi} J_z^2 \sum_{k>0} S_k^z S_{-k}^z + \frac{J_{\perp}}{2\pi\alpha} \int dx \cos\left(\sqrt{2\pi}\bar{\phi}(x)\right) e^{i\sqrt{2\pi}\kappa\bar{\theta}(x)} S^+(x)$$

Esse é exatamente o modelo bosônico que gera o gás de Coulomb que derivamos no parágrafo 2.6.1. Se lembrarmos da expressão no espaço real do termo spin-spin (equação 2.33) fica evidente que ele corresponde ao propagador \tilde{K}_1 (equação 2.37).

No apêndice B.7, demonstramos que se introduzirmos um *cut-off* suave, apenas distâncias da ordem do inverso do *cut-off*, δ , contribuem para a interação $S^z S^z$. Se considerarmos apenas primeiros vizinhos, aproximarmos $a \cong 2\pi\alpha$ e $\frac{4}{5} \cong 1$, podemos escrever a hamiltoniana do problema para uma rede densa ($c = 1$):

$$H = \bar{H}_0 - \frac{J_z^2}{\pi^2} \sum_i S^z(x_{i+1}) S^z(x_i) + \frac{J_{\perp}}{2\pi\alpha} \sum_i \cos\left(\sqrt{2\pi}\bar{\phi}(x_i)\right) e^{i\sqrt{2\pi}\kappa\bar{\theta}(x_i)} S^+(x)$$

A pergunta mais importante que precisamos responder nesse instante é: qual o critério de relevância do operador transverso. Para isso iremos desenvolver o grupo de renormalização do gás de Coulomb generalizado que surge ao traçarmos o campo bosônico.

A figura 2.6 resume a relação entre as diversas estratégias e técnicas usados para o estudo da rede de Kondo por bosonização. Inicialmente temos o campo bosônico e os spins. Entendemos que após aplicarmos a rotação somos levados em um modelo com um campo composto de bosons e spins, mais interações de curto alcance $S^z S^z$. Se traçarmos esse campo composto, obtemos o gás de Coulomb e essas interações de curto alcance. O outro braço do diagrama corresponde ao que fizemos nos parágrafos 2.6.1 e 2.6.2, quando traçamos o campo bosônico, nos identificamos que o propagador $S^z S^z$ apresentava duas contribuições distintas, o propagador do gás de Coulomb e as interações de curto alcance.

Podemos entender como as relações de dualidade proporcionam um atalho para o gás de Coulomb através de uma análise semiclássica do termo $V_1 = \partial_x \hat{\phi} S^z$. A equação de Lagrange associada ao modelo Gaussiano é a equação de Laplace:

$$\Delta \hat{\phi} = 0$$

Pelo teorema do módulo máximo, $\hat{\phi}$ é constante ou apresenta singularidades (vórtices)¹⁴.

$$\hat{\phi}(z) = \hat{\phi}_0(z) + \sum_i \ln \left(\frac{z - z_i^+}{|z - z_i^+|} \right) - \ln \left(\frac{z - z_i^-}{|z - z_i^-|} \right)$$

Quando $\hat{\phi}$ é constante, $\partial_x \hat{\phi}$ será zero e o termo V_1 não contribui em nada para a energia do sistema. Por outro lado, quando temos um vórtice, o campo de velocidades de $\hat{\phi}$ diverge como uma potência ao nos aproximarmos da singularidade, e tende a zero quando nos afastamos. Dessa forma, V terá sua contribuição maximizada (aumentando ou diminuindo a energia do sistema) quando o campo de spins acompanha a direção do campo de velocidades de $\hat{\phi}$ (veja figura 2.4). Em outras palavras, quando há a inversão de spin ao longo da direção temporal em torno da singularidade do campo. Na figura 2.7 representamos pictoricamente, a relação do campo e seu dual próximos de um vértice/vórtice. As relações de dualidade são apenas uma mudança de base no espaço tangente da variedade espaço-tempo. Ao usarmos as relações de dualidade em nosso problema quântico encontramos o resultado para longas distâncias correto, contudo perdemos o detalhe da interação de curto alcance entre os spins na direção espacial.

O significado do operador $V_2 = e^{i\sqrt{2\pi}\hat{\theta}} \cos(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}) S^-$ é exatamente o mesmo. Ele corresponde a introdução de uma singularidade no campo, acompanhada da inversão de um spin na direção temporal. Foi por isso que conseguimos escrever os dois operadores, V_1 e V_2 , na mesma forma através do campo composto.

2.6.5 representação de gás de Coulomb para o problema Kondo

Para ilustrar a física que estamos evidenciando com a representação do gás de Coulomb, vamos calcular o caso particular do problema Kondo. Nesse processo, além de ganharmos experiência com o formalismo, veremos como podemos conectar problemas físicos aparentemente distintos mas que compartilham a mesma ação efetiva.

problema de 1 canal

Como vimos no parágrafo 2.2.1, no problema Kondo temos apenas uma quiralidade de campo. Escrevendo a ação do problema a partir da hamiltoniana 2.20, obtemos:

$$S = S_0 + \left(\frac{J_z}{\sqrt{2\pi}} - \sqrt{2\pi} \right) \int d\tau \left(\partial_x \hat{\phi}(0, \tau) - \partial_x \hat{\theta}(0, \tau) \right) S^z(\tau) + N \ln y$$

Usando as relações de dualidade e integrando por partes, chegamos a ação:

¹⁴[39] página 202.

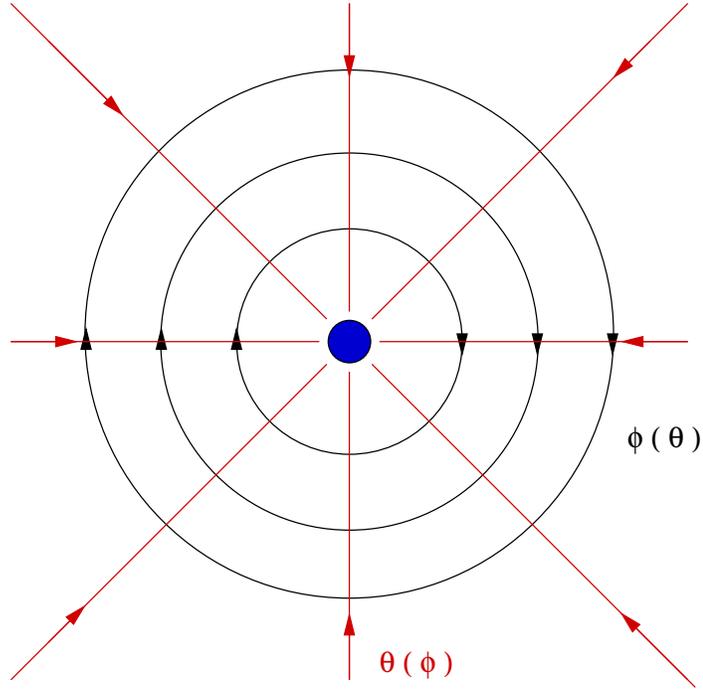


Figura 2.7: relação entre o campo e o seu dual.

$$S = S_0 + i \left(\frac{J_z}{\sqrt{2\pi}} - \sqrt{2\pi} \right) \sum_j \left(\hat{\theta}(0, \tau) - \hat{\phi}(0, \tau) \right) q(\tau) + N \ln y \quad (2.42)$$

Integrar os campos bosônicos é imediato. Como todos os *kinks* têm a mesma coordenada espacial, o termo de interação magneto-elétrico é zero:

$$S_{ef} = \bar{g}^2 \sum_{i>j} \ln |r_{ij}| q(\tau_i) q(\tau_j) + N \ln y \quad (2.43)$$

onde definimos:

$$\bar{g} = 1 - \frac{J_z}{2\pi}$$

Como o spin conforme da ação é zero, podemos rebosonizar o problema em termos de um único campo:

$$\widetilde{\widetilde{S}}_{ef} = S_0 + i\sqrt{4\pi\bar{g}} \sum_j \hat{\phi}(j) q(j)$$

A função de partição seria então:

$$Z = \int D\phi e^{-S_0} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{y^n}{n!} \prod_{i=0}^n * \int d\tau_i e^{i\sqrt{4\pi\bar{g}}\hat{\phi}(0,\tau_i)q(\tau_i)*} \right) = \int D\phi e^{-S_0+y \int d\tau * \cos(\sqrt{4\pi\bar{g}}\hat{\phi}(0,\tau))*}$$

onde * significa que apenas configurações com cargas alternadas são consideradas (veja apêndice B.5). Isso simplesmente vem do fato das cargas estarem acopladas ao *flips* do spin original, já que existia apenas uma quiralidade.

Essa forma de função de partição é bem conhecida na literatura, correspondendo a um problema de *tunneling* sobre uma impureza em um líquido de Luttinger[41, 12]. O que fizemos foi mostrar que o problema Kondo é equivalente a este, sujeito a uma condição de neutralidade mais restritiva (cargas alternadas):

$$H = H_0 + \bar{y} * \cos \left(\sqrt{4\pi\bar{g}}\hat{\phi}(0) \right) *$$

, onde $\bar{g} = 1 - \frac{J_z}{2\pi}$. No trabalho de Kane e Fisher[41], essa semelhança já havia sido apontada. A condição de cargas alternadas é o que impõe a renormalização de \bar{g} , enquanto no problema de *tunneling* apenas a fugacidade é renormalizada (veremos isso no apêndice C.1).

Do ponto de vista do grupo de renormalização, como o operador tem spin conforme zero podemos contar as dimensões do operador e usar o critério de relevância usual. Ou seja o operador é relevante para J_k positivo (acoplamento antiferro-) e irrelevante para J_k negativo (acoplamento ferro-).¹⁵

A equação de RG seria:

$$\frac{d\bar{y}}{dl} = (1 - \bar{g}^2) \bar{y} = \left(\frac{J_z}{\pi} - \frac{J_z^2}{4\pi^2} \right) \bar{y}$$

problema de 2 canais

Para o problema de 2 canais devemos incluir o segundo tipo de carga. A partir da equação 2.41, imediatamente encontramos:

$$S_{ef} = \frac{\kappa^2}{g} \sum_{i>j} \ln |r_{ij}| m(\tau_i) m(\tau_j) + g \ln |r_{ij}| e(\tau_i) e(\tau_j) + N \ln y$$

Essa ação já foi derivada por Lee e Toner[49] no contexto do efeito Kondo em um líquido de Luttinger, além disso ela é a mesma derivada por Kane e Fisher[41] para o problema de barreira dupla em um líquido de Luttinger (veja o apêndice B.5 e equação 4.4 da referência [41]).

¹⁵*Teorema:* Considere a ação $S = S_0 + g \int d^D r A_d(r)$, onde d é a dimensão do campo A , que tem spin conforme zero. Então A é relevante se $d < D$, marginal para $d = D$ e irrelevante se $d > D$ [30, pp. 62].

	$2 - \frac{2J}{\pi} + \frac{J^2}{\pi^2}$	$-\frac{2J}{\pi} + \frac{J^2}{\pi^2}$
$J = 0$	2	0
$J = \pi$	1	-1
$J = 2\pi$	2	0

Tabela 2.1: ponto dos espaço de parâmetros que permitem a re-bosonização do problema Kondo.

Na linguagem de Kane-Fisher[41], no caso do problema de 2 canais: $K = (1 - \frac{J}{\pi})^2$ e $g = 2$ (interação entre os férmions). As equações de renormalização¹⁶ são ([41, eq. 4.5] ou [49, eq. 9]):

$$\frac{dK}{dt} = -8y^2 K$$

$$\frac{dy}{dt} = y \left(1 - \frac{(1+K)}{4g} \right)$$

No ponto de Toulouse de Emery-Kivelson[30], $J = \pi$, vemos que K não renormaliza, sendo este o ponto fixo intermediário (já que se começarmos com $J = 0$ (*weak coupling*) ou $J = 2\pi$ (*strong coupling*) fluímos para esse ponto ($K = 0$)).

Nessa situação é reconstituído o problema do gás Coulomb de uma barreira, mais a simetria adicional de ressonância. Isso é equivalente a transferência de “meio” elétron pela junção formada pela barreira dupla[41, pp. 15244]. Na solução de Emery-Kivelson (parágrafo 2.2.2) encontramos algo muito parecido, já que derivamos que nesse caso o problema Kondo de 2 canais é equivalente ao modelo de níveis ressoantes de férmions de Majorana. Mostraremos a seguir que esses férmions correspondem aos meio elétrons de Kane-Fisher.

Para conectar o formalismo do gás de Coulomb com a solução de Emery e Kivelson vamos dividir a função de partição em duas componentes de acordo com cada tipo de interação, no caso não interagente ($g = 1$):

$$S_{ef} = \left(2 - \frac{2J}{\pi} + \frac{J^2}{\pi^2} \right) \sum_{\{a\}} \ln(r) q(\tau_i) q(\tau_j) + \left(\frac{J^2}{\pi^2} - \frac{2J}{\pi} \right) \sum_{\{b\}} \ln(r) q(\tau_i) q(\tau_j) \\ + N \ln y$$

onde a soma sobre $\{a\}$ esta indexando as interações entre partículas da mesma espécie, enquanto a soma sobre $\{b\}$ indexa a soma das interações entre partículas de espécies diferentes.

Existem alguns pontos do espaço de parâmetros que nos permitem re-bosonizar o problema de forma similar ao caso de um canal (problema Kondo):

O caso $J = 0$ e $J = 2\pi$ correspondem a situação em que as espécies não interagem entre si. Na

¹⁶derivaremos essas equações no parágrafo C.1.

linguagem de Kane-Fisher, $K = 1$, que sempre flui para o ponto de Toulouse. Nessa situação nos re-bosonizamos o problema para 2 campos bosônicos independentes, porque as espécies são distinguíveis:

$$S_{ef} = S_0^1 + S_0^2 + i\sqrt{4\pi} \sum_i \hat{\phi}_1(i) q_1(i) + i\sqrt{4\pi} \sum_i \hat{\phi}_2(i) q_2(i) + \ln y \sum_i [q_1(i)]^2 + \ln y \sum_i [q_2(i)]^2$$

$$H = H_0^1 + H_0^2 + \bar{y} \cos\left(\sqrt{4\pi}\hat{\phi}_1(0)\right) \cos\left(\sqrt{4\pi}\hat{\phi}_2(0)\right)$$

O caso mais interessante seria $J = \pi$. Nesse caso a re-bosonização nos leva a um único campo, porque os *kinks* são indistinguíveis. O espaço de configurações é dobrado já que a carga elétrica pode pertencer a qualquer uma das espécies:

$$S_{ef} = S_0 + i\sqrt{2\pi} \sum_i \hat{\phi}(i) q(i) + y \sum_i [q(i)]^2$$

$$H = H_0 + \bar{y} S^x \cos\left(\sqrt{2\pi}\hat{\phi}(0)\right) \quad (2.44)$$

Na linguagem de *kinks*, isso quer dizer que não há a necessidade da alternância de cargas como no caso do problema Kondo (apêndice B.5).

$$H = H_0 + \bar{y} S^x \cos\left(\sqrt{2\pi}(\phi(0) + \varphi(0))\right)$$

onde ϕ e φ têm quiralidade direita e esquerda respectivamente. Usando a reflexão $\varphi(x) \rightarrow \varphi(-x)$, re-definimos o problema como um problema quiral:

$$H = H_0(\phi_1) + H_0(\phi_2) + \bar{y} S^x \cos\left(\sqrt{2\pi}(\phi_1(0) - \phi_2(0))\right)$$

Definindo o campo soma e diferença:

$$H = H_0(\phi_+) + H_0(\phi_-) + \bar{y} S^x \cos\left(\sqrt{4\pi}\phi_-(0)\right)$$

Que é equivalente ao modelo de níveis ressonantes de férmions[30, pp. 365] como encontrado por Emery-Kivelson.

2.7 renormalização

In the theory of critical phenomena the concept of universality of second order phase transitions has emerged progressively. Near the critical temperature cooperative phenomena

generate a large scale, the correlation length, although the fundamental interaction are short range, and the large scale properties of the system become independent of most of the details of the microscopic structure. To explain this remarkable situation, Wilson, partially inspired by some prior attempts of Kadanoff, introduced the renormalization group idea: starting from a microscopic hamiltonian one integrates out the degrees of freedom corresponding to short distance fluctuations and generate a scale-dependent effective hamiltonian. Universality relies then upon the existence of fixed points in hamiltonian space.

J. Zinn-Justin no livro *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*[93, páginas i e ii].

A teoria de grupo de renormalização foi muito bem descrita em vários trabalhos importantes ao longo dos anos. Do ponto de vista de teorias de campo em estado sólido os livros de Itzykov-Drouffe e Zinn-Justin [39, 93] são ótimas referências. Para sistemas bosônicos, os textos de Voit e Gogolin[77, 30] são as principais influências em nosso trabalho.

De forma mais específica seguiremos o quanto possível, os trabalhos de revisão de Shankar[64] para a renormalização de sistemas bosônicos e de Niehnus[57] para a renormalização no espaço real do gás de Coulomb.

Ao longo desse parágrafo vamos desenvolver os mecanismos necessários para a renormalização da rede de Kondo. É importante remeter o leitor ao apêndice C.1, onde estudamos o problema de Kondo (de 1 e 2 canais). Nesse apêndice o leitor encontra um exemplo mais simples dos processos que surgem na renormalização do gás de Coulomb além de algumas idéias físicas interessantes. De forma complementar, no apêndice C.5 estudamos as equações de renormalização do problema de 2 líquidos de Luttinger, que serve como exemplo do processo de renormalização em teorias de campos.

Nos parágrafos que se seguem e nos apêndices C.1 e C.5 adotaremos a seguinte convenção: z corresponde a um parcela da soma que define a função de partição Z .

2.7.1 re-escala global

O ponto de partida de uma processo de renormalização no espaço real é o de entendermos como o sistema se modifica ao aplicarmos uma mudança de escala.

$$Z_{ef} = \int \prod_i d^{(d)} x_i(y)^N e^{S_{ef}}$$

$$S_{ef} + N \ln y = \sum_{i>j} \left(\frac{\kappa^2}{g} m(i) m(j) + g e(i) e(j) \right) \ln |r_{i,j}| + i \varphi_{ij} (e(i) m(j) + e(j) m(i)) + N \ln y$$

A mudança de escala que vamos considerar será um processo infinitesimal:

$$r = \frac{\bar{r}}{1 - dl}$$

onde r corresponde a distância original e dl controla a mudança de escala. No espaço de momentos, a receita geral de renormalização corresponde a integrarmos modos de alta frequência do problema. Pictoricamente isso pode ser entendido como se estivéssemos "olhando" para o sistema de maneira cada vez mais afastada. A filosofia desse processo é a de tentar evidenciar os modos de momentos longos que dominam a física de baixas energias.

$$\bar{S}_{ef} = S_{ef} - \sum_{i>j} \left(\frac{\kappa^2}{g} m(i) m(j) + g e(i) e(j) \right) \ln |1 - dl| + N \ln y$$

Da condição de neutralidade do gás de Coulomb:

$$\sum_{i>j} m(i) m(j) = -\frac{1}{2} \sum_i m^2(i) = -\frac{1}{2} N$$

$$\sum_{i>j} e(i) e(j) = -\frac{1}{2} \sum_i e^2(i) = -\frac{1}{2} N$$

podemos re-expressar a mudança de escala como uma mudança na fugacidade do gás.

$$\bar{S}_{ef} = S_{ef} + \frac{N}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right) \ln |1 - dl| + N \ln y$$

$$\bar{S}_{ef} = S_{ef} + N \ln \frac{y}{|1 - dl|^{-\frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right)}}$$

Com isso terminamos com a renormalização da ação. Falta ainda re-escalarmos as coordenadas das diversas possíveis configurações da função de partição. Esse é o ponto onde a dimensão do espaço de configuração se torna relevante.

$$d^{(d)} x = \frac{d^{(d)} \bar{x}}{(1 - dl)^d}$$

A renormalização da função de partição é então:

$$Z_{ef} = \int \prod_i d^{(d)} \bar{x}_i \left(\frac{y}{|1 - dl|^{d - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right)}} \right)^N e^{\bar{S}_{ef}}$$

Definir a equação de renormalização da fugacidade do gás é apenas um trabalho algébrico:

$$\bar{y} = \frac{y}{|1 - dl|^{d - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right)}}$$

$$\ln \frac{\bar{y}}{y} = - \left(d - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right) \right) \ln |1 - dl|$$

Expandindo o logarítmo e re-exponenciando:

$$\frac{\bar{y}}{y} = e^{(d - \frac{1}{2}(\frac{\kappa^2}{g} + g))dl} = 1 + \left(d - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right) \right) dl$$

$$\frac{dy}{dl} = \left(d - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right) \right) y$$

O desenvolvimento é análogo para um gás mais geral, que envolva diversas fugacidades e diferentes tipos de cargas:

$$\frac{dy(m, e)}{dl} = \left(d - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} m^2 + g e^2 \right) \right) y(m, e) \quad (2.45)$$

onde e e m são as cargas existentes no gás e $y(m, e)$ a correspondente fugacidade.

Em termos da somatória sobre uma rede discreta podemos entender melhor o que estamos fazendo. A re-escala espacial do problema significa que estamos identificando configurações de *kinks* que sejam diferentes por deslocamentos menores que a nova escala, nos retiramos do problema as frequências suficientemente altas que tornariam distinguíveis as configurações. Pictoricamente representamos essa situação como:

$$\circ \circ \circ \circ (\circ \bullet) \circ \circ \circ \circ \equiv \circ \circ \circ \circ (\bullet \circ) \circ \circ \circ \circ$$

ou seja, apesar de no *cut-off* original as duas configurações serem distintas, na nova escala (representada pelos parênteses) essas duas configurações levam a mesma parcela da nova função de partição. Nesse sentido, essa variação de escala esta ligada a “entropia” configuracional do problema do gás de Coulomb¹⁷. Como o processo de renormalização é por hipótese infinitesimal, isso nos permite escrever essa variação infinitesimal da entropia configuracional como uma variação infinitesimal da fugacidade do gás (ou seja, do potencial químico). Esse tipo de argumento é muito direto e claro na renormalização no espaço de momentos e por isso remetemos o leitor ao exemplo trabalhado no apêndice C.1, onde a renormalização do problema Kondo de 1 e 2 canais foi desenvolvida.

Podemos dar uma interpretação física a equação de renormalização da fugacidade 2.45. Ao interpretarmos a mudança de escala espacial como uma variação de entropia, podemos entender a dimensão

¹⁷Um exemplo muito bom dessa linguagem de competição entre entropia e energia livre se encontra no artigo clássico de Thouless sobre ordem de longo alcance no modelo de Ising unidimensional[73].

conforme como a temperatura efetiva do gás de Coulomb. Ou seja a renormalização da fugacidade seria como a relação termodinâmica fundamental:

$$TdS = dE + pdV$$

onde impusemos $dE = 0$ quando reconstruímos o *cut-off* na representação de momentos(apêndice C.1 ou [64]), dV é a mudança de escala e p a pressão (ou densidade de energia).

Do ponto de vista de uma teoria puramente bosônica, uma re-escala global do problema é equivalente a renormalização da dimensão do operador de campo que cria a “pertubação”, como demonstramos no apêndice C.5. A renormalização da dimensão nada mais é que a re-escala da divergência logarítmica que existe no infravermelho do propagador gaussiano em dimensão 2.

2.7.2 aniquilação e fusão de partículas

No parágrafo anterior, entendemos que a renormalização corresponde a uma soma parcial da função de partição. Essa soma é feita através de um processo infinitesimal de re-escala do problema. Isso nos permite re-escrever a função de partição em termos de novas constantes que preservam a estrutura formal da mesma.

No processo descrito, configurações que diferiam por uma distância menor que a nova menor escala são identificadas e somadas. Ocasionalmente a renormalização das fugacidades do gás de Coulomb associado. Nesse processo não contemplamos a possibilidade de na configuração original termos “partículas” que se encontravam a uma distância menor que a nova menor escala. Nessa situação, duas partículas originalmente distintas devem ser expressas como uma única nova partícula na nova escala.

$$(\circ\circ)(\bullet\bullet)(\circ\circ) \equiv (\circ)(\bullet)(\circ)$$

Em ordem mais baixa, consideramos que em cada passo da renormalização apenas um par de partículas passa por esse processo¹⁸. Chamaremos de aniquilação de par, quando as partículas que se tornam indistinguíveis na nova escala tem cargas oposto. Nessa situação, o passo de renormalização corresponde a entendermos os efeitos de dipolo que permanecem ao retirarmos o par. Ou seja, esse processo corresponde a uma mudança na constante dielétrica (ou magnética) do vácuo ocasionada pela retirada do par. Do ponto de vista de uma teoria de campos, isso pode ser entendido como a correção do propagador do problema ao processo de criação e aniquilação de partículas virtuais (polarização do vácuo). O fenômeno oposto ocorre quando a nova partículas não tem carga nula, a esse processo chamaremos de fusão.

¹⁸Na linguagem desenvolvida por Anderson-Yuval para o problema Kondo, esse par é conhecido como par-próximo (“*close pair*”).

No processo de aniquilação as condições de neutralidade têm um papel muito importante, já que elas restringem o espaço de configurações. Por exemplo: no problema Kondo a imposição de alternância de cargas no problema de 1 canal é o que impõe a normalização da constante dielétrica do meio e assim renormaliza J^z . No problema de 2 canais, apenas a carga magnética tem essa imposição. Isso faz com que a constante de acoplamento elétrico não seja renormalizada. Esse fenômeno é o responsável pelo surgimento do ponto fixo intermediário (com comportamento não líquido de Fermi) conhecido como ponto de Toulouse(veja o apêndice C.1).

Já o processo de fusão cria partículas de cargas mais altas. Como vimos a equação de renormalização de re-escala depende do quadrado dessas cargas. Isso faz com que muitas vezes esse processo seja irrelevantes. Por exemplo, na renormalização da teoria de sine-Gordon a carga inicial que existe no gás de Coulomb é do tipo $(0, \pm 2)$,

$$S = S_0 + y \int dx \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi(x) \right)$$

o que implica na equação de renormalização:

$$\frac{dy(0, 2)}{dl} = 2[1 - g]y(0, 2)$$

ou seja, g determina a relevância ou não do operador \cos (veja o apêndice C.5). No contexto do processo de fusão são geradas cargas do tipo $(0, \pm 4)$, que correspondem a um operador do tipo $\cos(\sqrt{16\pi}\phi(x))$. A equação de renormalização dessas cargas é:

$$\frac{dy(0, 4)}{dl} = 2[1 - 4g]y(0, 4)$$

o que para $g \sim 1$ é sempre irrelevante.

Como veremos a seguir, na rede de Kondo a relevância ou não do processo de fusão de cargas irá depender da dimensão efetiva do sistema.

2.7.3 renormalização da rede de Kondo

Seguindo a receita que desenvolvemos no parágrafo anterior, vamos aplicar o grupo de renormalização ao problema da rede. Como discutimos, as condições de neutralidade são fundamentais para a renormalização das constantes de acoplamento, assim não devemos esquecer que no problema da rede de Kondo apenas as cargas magnéticas tem essa restrição¹⁹.

¹⁹Recapitulando a nomenclatura de Anderson-Yuval, um “par próximo” (“close pair”) é um par de partículas que se encontra tão próximo que num passo de RG elas são transformadas em uma única partícula efetiva.

fugacidade	cargas correspondentes (m, e)
y	$(\pm 1, \pm 1)$ e $(\pm 1, \mp 1)$
G	$(0, \pm 2)$
\tilde{G}	$(\pm 2, 0)$

Tabela 2.2: notação para as cargas do gás de Coulomb generalizado relevantes para o problema da rede de Kondo.

renormalização da fugacidade

O gás de Coulomb que devemos considerar é

$$S_{ef} = \sum_{i \neq j} \frac{a_{i,j}}{2} \ln |r_{i,j}| + i b_{i,j} \varphi_{i,j} \quad (2.46)$$

onde:

$$a_{i,j} = \frac{\kappa^2}{g^2} m(i) m(j) + g^2 e(i) e(j)$$

$$b_{i,j} = \kappa (e(i) m(j) + m(i) e(j))$$

Do desenvolvimento que fizemos anteriormente a equação de renormalização das fugacidades é:

$$\boxed{\frac{dy(m,e)}{dt} = \left(d - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} m^2 + g e^2 \right) \right) y(m, e)}$$

Substituindo os valores iniciais de $\kappa^2 = \left(1 - \frac{J}{\pi}\right)^2$ e $g = 1$, vemos que se $d = 1$ recaímos no problema de Kondo de 2 canais, e apenas cargas ± 1 devem ser consideradas. Por outro lado, se $d = 2$, temos de considerar as cargas do tipo $(1, 1)$, $(2, 0)$ e $(0, 2)$ (cargas mais altas são irrelevantes para $g \sim 1$ e $J_z \sim 0$):

$$\frac{dy(1,1)}{dt} = \left(2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right) \right) y(1, 1)$$

$$\frac{dy(2,0)}{dt} = 2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{g} \right) y(2, 0)$$

$$\frac{dy(0,2)}{dt} = 2(1 - g) y(0, 2)$$

Em particular, notamos que para o caso antiferromagnético ($J > 0$) as partículas $y(2, 0)$ são relevantes e no caso ferro- irrelevantes. Já as partículas $y(0, 2)$ são marginais.

Para não sobrecarregarmos a notação, vamos definir a convenção da tabela 2.2 para as cargas que serão importantes na renormalização do problema.

Qual é a escolher apropriada para a dimensão d ? Devemos nos lembrar da derivação da equação de re-escala. Como vimos d esta ligado a identificação de parcelas da função de partição originalmente distintas quando re-escalamos o problema. Temporalmente duas partículas podem estar tão próximas quando permitir o *cut-off* bosônico. Isso quer dizer que na direção temporal, toda vez que re-escalarmos o problema teremos a identificação de parcelas distintas.

limite diluído Na direção espacial existe uma segunda escala de devemos considerar. Como as partículas estão “presas” na rede de spin, elas têm uma distância mínima dada por esse parâmetro de rede. Se essa distância for tal que na nova escala não haja a identificação de parcelas, d será igual a 1 por conta da re-escala temporal (configurações na direção espacial conseguem ser sempre resolvidas pelos modos bosônicos ainda restantes).

$$\circ \quad (\bullet) \quad \circ \equiv \circ \quad (\bullet) \quad \circ$$

Em outras palavras, a re-escala do *cut-off* produz uma mudança de escala que é sempre menor que a menor distância entre os spins. Nessa situação a única possibilidade de aniquilação ou fusão seria quando as partículas do “close pair” estivessem na mesma posição espacial. Esse será nosso limite diluído (ou fase incoerente).

limite denso O limite oposto é quando temos spins a distâncias da ordem do *cut-off* bosônico, a isso chamamos de limite denso (ou fase coerente). Nesse limite podemos esquecer o caráter discreto da rede de spins. Na nova menor escala, duas configurações espacialmente distintas poderão ser identificadas no passo renormalização, o que implica que d será 2.

A fusão e aniquilação de cargas pode ocorrer entre cargas que não se encontram na mesma posição espacial (veja. fig. 2.8). Note que como duas “*world-lines*” (de dois spins) estão a uma distância menor que a nova escala, elas renormalizam para a mesma nova “*world-line*”, possibilitando a fusão e aniquilação de cargas em posições espaciais diferentes.

No limite denso, os spins estão tão próximos que podemos tratar a coordenada relativa entre um “close pair” como uma variável contínua.

A partir das equações de renormalização das fugacidades, vemos que precisamos considerar o fenômenos descritos na tabela 2.3.

casos intermediários Em casos intermediários existe um “*cross-over*” dimensional não trivial do problema. Inicialmente a física é dominada pelas equações de renormalização do problema diluído. Enquanto estivermos integrando modos do campo com comprimento de onda menores que a distância entre os spins, estaremos sujeitos as equações de renormalização do problema Kondo de 2 canais.

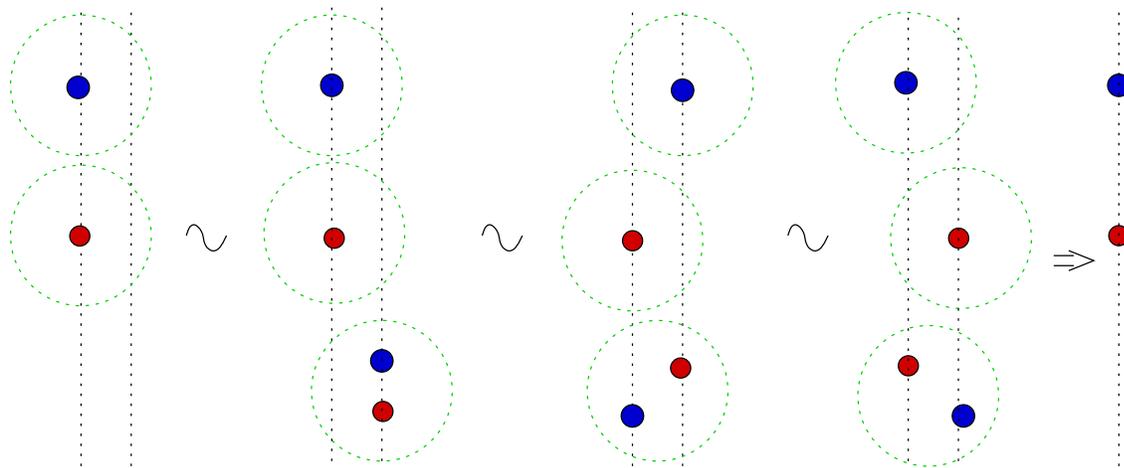


Figura 2.8: passos de renormalização que levam na mesma configuração final. Os círculos representam a variação da escala.

(e, m)	$(1, 1)$	$(-1, -1)$	$(1, -1)$	$(-1, 1)$	$(2, 0)$	$(-2, 0)$	$(0, 2)$	$(0, -2)$
$(1, 1)$	*	A	$(2, 0)$	$(0, 2)$	*	$(-1, 1)$	*	$(1, -1)$
$(-1, -1)$	A	*	$(0, -2)$	$(-2, 0)$	$(1, -1)$	*	$(-1, 1)$	*
$(1, -1)$	$(2, 0)$	$(0, -2)$	*	A	*	$(-1, -1)$	$(1, 1)$	*
$(-1, 1)$	$(0, 2)$	$(-2, 0)$	A	*	$(1, 1)$	*	*	$(-1, -1)$
$(2, 0)$	*	$(1, -1)$	*	$(1, 1)$	*	A	*	*
$(-2, 0)$	$(-1, 1)$	*	$(-1, -1)$	*	A	*	*	*
$(0, 2)$	*	$(-1, 1)$	$(1, -1)$	*	*	*	*	A
$(0, -2)$	$(1, -1)$	*	*	$(-1, 1)$	*	*	A	*

Tabela 2.3: processos relevantes na renormalização da rede de Kondo. A significa aniquilação de par e * significa que a carga gerada tem fugacidade irrelevante.

Se ainda dentro do regime de validade da renormalização, começamos a integrar modos com comprimentos de onda suficientemente grandes para que a rede perca o seu caráter discreto²⁰, temos um “*cross-over*” dimensional para o limite denso (que teve suas condições iniciais renormalizadas).

“*flips*” correlacionados

O processo de renormalização cria uma nova entidade no problema da rede de Kondo, as partículas $(2, 0)$ e $(0, 2)$. Como veremos a seguir, as equação de renormalização dessas cargas implicam que no início do processo:

$$G \sim \tilde{G} \sim y^2 = \frac{J_{\perp}^2}{4}$$

Esse é um processo de 2 spins, que surgiu devido a fusão de “pares próximos”. Concretamente, considere o caso de ter as partículas:

$$(1, 1) \oplus (-1, 1) = (0, 2)$$

Se lembrarmos das definições das cargas, vamos perceber que a carga magnética esta ligada ao processo de spin *flip*, ou seja, uma carga magnética +1 corresponde a um *flip down* para *up* e uma carga magnética -1 a um *flip up-down*.

Quando temos uma partícula $(0, 2)$ ela implicitamente carrega a informação que ocorreu um par de *flips* “próximos” (tanto no espaço como no tempo):

$$\downarrow\uparrow \Rightarrow \uparrow\downarrow$$

De maneira análoga uma partícula $(2, 0)$ significa que houve um par de *flips*:

$$\downarrow\downarrow \Rightarrow \uparrow\uparrow$$

Em termos de operadores fermiônicos esse processos são descritos pelos operadores

²⁰No processo de renormalização, integramos os modos de alta frequência. Se esses modos têm comprimento de onda menor que a distância da rede de spins a renormalização se dá de forma “independente” para cada spins (fase incoerente), a partir do instante que começamos a integrar modos com comprimento de onda da ordem da separação entre os spins a renormalização passa a ser coerente.

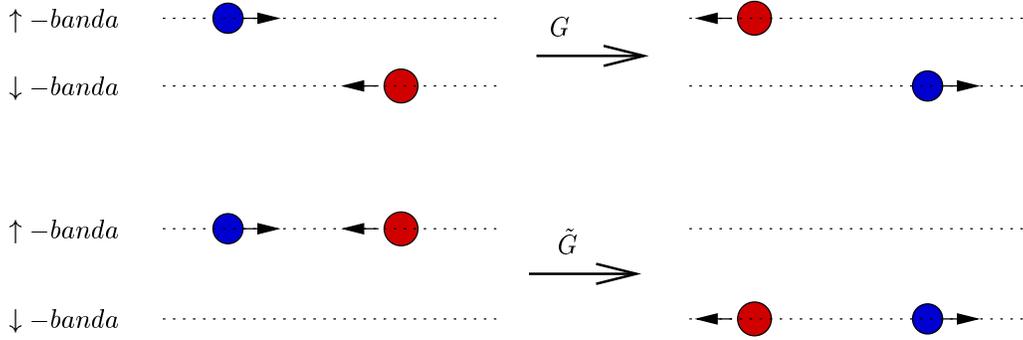


Figura 2.9: as cargas mais altas geradas pelo grupo de renormalização podem ser entendidas como “*hopping* correlacionado” entre as bandas do modelo original.

$$O_{ph} \sim \tilde{G} \left[\psi_{R\uparrow}^\dagger(x+\delta) \psi_{R\downarrow}(x+\delta) \psi_{L\uparrow}^\dagger(x) \psi_{L\downarrow} \times \right. \\ \left. \times S^+(x+\delta) S^+ + h.c. \right] \quad (2.47)$$

$$O_{pp} \sim G \left[\psi_{R\uparrow}^\dagger(x+\delta) \psi_{R\downarrow}(x+\delta) \psi_{L\downarrow}^\dagger(x) \psi_{L\uparrow}(x) \times \right. \\ \left. \times S^+(x+\delta) S^-(x) + h.c. \right]$$

onde δ é uma distância da ordem do parâmetro de re-escala (dl). Como esses operadores são gerados por modos de baixa frequência do campo bosônico, podemos aproxima-los por:

$$\boxed{O_{ph} \sim \tilde{G} \left[\psi_{R\uparrow}^\dagger(x) \psi_{R\downarrow}(x) \psi_{L\uparrow}^\dagger(x) \psi_{L\downarrow} \times \right. \\ \left. \times S^+(x+\delta) S^+ + h.c. \right]} \\ O_{pp} \sim G \left[\psi_{R\uparrow}^\dagger(x) \psi_{R\downarrow}(x) \psi_{L\downarrow}^\dagger(x) \psi_{L\uparrow}(x) \times \right. \\ \left. \times S^+(x+\delta) S^-(x) + h.c. \right]$$

No problema de 2 líquidos de Luttinger, esse é o mecanismo de “*hopping* correlacionado”, que é introduzido pelo processo de renormalização (veja apêndice C.5). Um par partícula-buraco ou partícula-partícula “salta” de forma correlacionada de um líquido de Luttinger para o outro. Em nosso caso esses líquidos são as duas bandas *up/down* e o “salto” é acompanhado por uma inversão correlacionada dos spins localizados. Essa inversão correlacionada é um mecanismo que gera correlações de curto alcance entre os spins localizados.

Um ponto importante é que as espécies (diferentes cargas) são distinguíveis, assim na hora de calcular a função de partição devemos dividir por fatores estatísticos independentes.

$$Z = \sum_{P=0}^{\infty} \sum_{M=0}^{\infty} \sum_{N=0}^{\infty} \frac{y^N G^M \tilde{G}^P}{N! M! P!} \prod_{i=1}^{N,M,P} \left(\sum_{\hat{x}_i} \int d\hat{\tau}_i \right) e^{-S}$$

Como havíamos predito, o modelo puramente bosônico seria da forma:

$$Z = *e^{-S_0 + \int dxy \cos\left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}}\kappa\theta(x)\right) \cos\left(\sqrt{2\pi g}\phi(x)\right) + G \cos\left(\sqrt{8\pi g}\phi(x)\right) + \tilde{G} \cos\left(\sqrt{\frac{8\pi}{g}}\kappa\theta(x)\right)} *$$

que é a ação estudada em [47, 56, 85] e em [30, pp. 219] no contexto de 2 líquidos de Luttinger interagindo fracamente por um termo de “hopping”²¹.

Como as partículas (0, 2) e (2, 0) não tem carga magnética-elétrica, elas não estão sujeitas a condição de neutralidade forte. Contudo deve-se sempre respeitar a condição de neutralidade total do gás.

Essas cargas mais altas são equivalentes as interações de curto alcance entre as componentes z dos spins que demonstramos no parágrafo 2.6.4. Elas só apareceram em formas distintas porque estamos usando bosonização abeliana.

aniquilação e fusão de partículas

Para calcularmos a influência dos processos de fusão e aniquilação na renormalização, vamos passar para a notação em variável complexa em lugar de usarmos as variáveis reais da equação 2.46²²:

$$\ln z_{ij} = \ln |z_{ij}| + i\varphi_{ij} - i\frac{\pi}{2}$$

$$\ln \bar{z}_{ij} = \ln |\bar{z}_{ij}| - i\varphi_{ij} + i\frac{3\pi}{2}$$

$$\alpha_{ij} \ln z_{ij} + \beta_{ij} \ln \bar{z}_{ij} = (\alpha_{ij} + \beta_{ij}) \ln |z_{ij}| + i(\alpha_{ij} - \beta_{ij})(\varphi_{ij} + const.)$$

é natural definirmos as novas variáveis (quirais):

$$a_{ij} = \alpha_{ij} + \beta_{ij}$$

$$2b_{ij} = \alpha_{ij} - \beta_{ij}$$

ou em termo das cargas do gás:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(i) + \sqrt{g} e(i) \right) \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(j) + \sqrt{g} e(j) \right)$$

$$\beta_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(i) - \sqrt{g} e(i) \right) \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(j) - \sqrt{g} e(j) \right)$$

²¹*- corresponde ao fato de apenas os diagramas que obedecem a condição de neutralidade forte é que devem ser computados.

²²como veremos isso será muito mais conveniente para o cálculo que a notação vetorial que usamos no apêndice C.1.

Quando usamos a neutralidade forte, os termos constantes se anulam²³ e a ação se torna simplesmente:

$$S_{ef} = \sum_{i>j} \alpha_{ij} \ln z_{ij} + \beta_{ij} \ln \bar{z}_{ij} \quad (2.48)$$

Vamos considerar um “par próximo”, ou seja, as cargas $y > x$ estão a uma distância maior que l , mas menor que $l + dl$. Separamos a ação em função desse par em três componentes: $S_{ef} = \bar{S}_0 + \bar{S}_1 + \bar{S}_2 + \bar{S}_3$:

i) a interação de todas as cargas menos o par:

$$\bar{S}_0 = \sum_{i>j>y} + \sum_{x>i>j} (\alpha_{ij} \ln z_{ij} + \beta_{ij} \ln \bar{z}_{ij}),$$

ii) a interação de todas as demais cargas com o par:

$$\bar{S}_1 = \sum_{i>y} (\alpha_{iy} \ln z_{iy} + \alpha_{ix} \ln z_{ix} + \beta_{iy} \ln \bar{z}_{iy} + \beta_{ix} \ln \bar{z}_{ix}),$$

$$\bar{S}_2 = \sum_{x>i} (\alpha_{yi} \ln z_{yi} + \alpha_{xi} \ln z_{xi} + \beta_{yi} \ln \bar{z}_{yi} + \beta_{xi} \ln \bar{z}_{xi}),$$

iii) a interação entre as duas cargas do par²⁴:

$$\bar{S}_3 = \alpha_{yx} \ln z_{yx} + \beta_{yx} \ln \bar{z}_{yx},$$

Definimos a coordenada relativa das partículas do par como: $z_y = z_x + s$. Da hipótese de que esse é um “par próximo” $\frac{|s|}{l_0} \in \left[1, \frac{l_0+dl}{l_0}\right]$. Como assumimos $dl \ll 1$ podemos expandir o logarítmo em função de s ²⁵:

$$\ln z_{yi} \cong \ln z_{xi} + \frac{s}{z_{xi}}$$

$$\ln z_{iy} \cong \ln z_{ix} - \frac{s}{z_{ix}}$$

Usando essa aproximação vamos expandir a parcela da função de partição que apresenta o “par

²³no apêndice C.3 apresentamos essa derivação de forma mais geral.

²⁴isso é equivalente a “energia interna” do par.

²⁵isso é equivalente ao que fizemos para o problema Kondo no apêndice C.1:

$$\frac{s}{z_{xi}} = \frac{s \bar{z}_{x,i}}{|z_{xi}|^2} = \frac{s (\cos \theta - i \sin \theta)}{|R_{xi}|} = \frac{\vec{s} \cdot \vec{R}_{xi} + \vec{s} \times \vec{R}_{xi}}{|\vec{R}_{xi}|^2}$$

próximo” e re-soma-la apropriadamente.

aniquilação de par: Se o par (x, y) se aniquila: $\alpha_{i,x} = -\alpha_{i,y}$ e $\beta_{i,x} = -\beta_{i,y}$.

$$\bar{S}_1 = s \sum_{i>y} \left(\frac{\alpha_{ix}}{z_{ix}} - \frac{\beta_{ix}}{\bar{z}_{ix}} \right)$$

$$\bar{S}_2 = -s \sum_{x>i} \left(\frac{\alpha_{xi}}{z_{xi}} - \frac{\beta_{xi}}{\bar{z}_{xi}} \right)$$

Definindo a função de aniquilação:

$$A(x, y) = \sum_{i>y} \left(\frac{\alpha_{ix}}{z_{ix}} - \frac{\beta_{ix}}{\bar{z}_{ix}} \right) - \sum_{x>i} \left(\frac{\alpha_{xi}}{z_{xi}} - \frac{\beta_{xi}}{\bar{z}_{xi}} \right) = \sum_{i \neq (x,y)} \left(\frac{\alpha_{ix}}{z_{ix}} - \frac{\beta_{ix}}{\bar{z}_{ix}} \right)$$

re-escrevemos a ação como:

$$\bar{S}_{ef} = \bar{S}_0 + sA(x, y) + \bar{S}_3$$

Expandindo a função de partição para $|s|/l_0 \ll 1$:

$$z = e^{-i\bar{S}_{eff}} = e^{-i\bar{S}_0} e^{-\alpha_{yx} \ln s - \beta_{yx} \ln \bar{s}} \left(1 - sA(x, y) - \frac{s^2}{2} A(x, y)^2 + \dots \right)$$

A soma sobre todas as posições do par (x, y) é dividida em duas: primeiro a soma sobre todas as posições do “centro de massa”, denotada por $\int dx$; em seguida a soma sobre todas as posições relativas, denotadas por $\int ds$.

$$z = \int ds dx e^{-i\bar{S}_{eff}} = e^{-i\bar{S}_0} \int ds e^{\alpha_{yx} \ln s + \beta_{yx} \ln \bar{s}} \int dx \left(1 - sA(x, y) - \frac{s^2}{2} A(x, y)^2 + \dots \right) \quad (2.49)$$

Os detalhes da integração sobre dx se encontram no apêndice C.4. Em termo das funções:

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(i) + \sqrt{g} e(i) \right) \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(j) - \sqrt{g} e(j) \right)$$

$$\gamma_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} - g \right)$$

$$\gamma_2 = -2g$$

$$\gamma_3 = 2\frac{\kappa^2}{g}$$

o resultado da integração é:

$$z = e^{-\dot{S}_{eff}} \int ds e^{-\alpha_{yx} \ln s - \beta_{yx} \ln \bar{s}} \left\{ y^2 + \tilde{G}^2 + G^2 + \right. \\ \left. + \pi s^2 \sum_{i,j \neq (x,y)} \frac{1}{2} \left(y^2 \gamma_1 + G^2 \gamma_2 + \tilde{G}^2 \gamma_3 \right) \gamma_{ij} [\ln |z_{ij}| - \ln L] \right\}$$

Integrar a parte real das coordenadas relativas é imediata, lembrando que:

$$\alpha_{yx} \ln s + \beta_{yx} \ln \bar{s} = a_{y,x} \ln |\rho| + 2ib_{y,x} \varphi$$

re-escrevemos a integral:

$$\frac{1}{l_0} \int ds s^p e^{-\alpha_{yx} \ln s - \beta_{yx} \ln \bar{s}} = \frac{1}{l_0} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\varphi e^{-2ib_{y,x} \varphi} \int_{l_0}^{l_0+dl} d\rho \left| \frac{\rho}{l_0} \right|^{p-a_{y,x}} \cong dl \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\varphi e^{-2ib_{y,x} \varphi}$$

sendo que a integral angular é definida de $-\frac{\pi}{2}$ à $\frac{\pi}{2}$ porque as cargas haviam sido ordenadas. Existem dois casos distintos²⁶:

se $b_{y,x} = 0$:

$$dl \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\varphi e^{-2ib_{y,x} \varphi} = \pi dl$$

se $b_{y,x} \neq 0$:

$$dl \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\varphi e^{-2ib_{y,x} \varphi} = dl \frac{\sin(\pi b_{y,x})}{b_{y,x}}$$

Devemos ainda somar a configuração de cargas idêntica as que restaram, mas que não continha o par próximo:

$$z = e^{-\dot{S}_{eff}} \left\{ 1 + dl \left\{ y^2 + \tilde{G}^2 + G^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + \pi \sum_{i,j \neq (x,y)} \frac{1}{2} \left(\frac{\sin(2\pi\kappa)}{4\pi\kappa} y^2 \gamma_1 + G^2 \gamma_2 + \tilde{G}^2 \gamma_3 \right) \gamma_{ij} [\ln |z_{ij}| - \ln L] \right\} \right\}$$

Para concluirmos a renormalização precisamos apenas re-exponenciar essa última expressão²⁷ e perceber que o acoplamento entre as cargas foi mudado para:

²⁶se o spin conforme fosse inteiro ($|\kappa| = 1$) isso nos levaria simplesmente a condição $\delta(b_{y,x})$.

²⁷o termo constante pode ser desprezado por ser de ordem mais alta. Ele corresponde a um termo com fugacidade na potência N, mas com apenas N-2 partículas. O que em termos práticos quer dizer que a entropia configuracional que ele carrega é facilmente compensada quando as fugacidades são pequenas.

$$\tilde{a}_{ij} = a_{i,j} + \frac{\pi l dl}{2} \left(\frac{\sin(2\pi\kappa)}{2\pi\kappa} y^2 \gamma_1 + \tilde{G}^2 \gamma_2 + G^2 \gamma_3 \right) \gamma_{ij}$$

o que imediatamente implica na equação de renormalização do acoplamento:

$$\boxed{\frac{d \ln g}{dl} = -\pi l \left(\frac{\sin(2\pi\kappa)}{4\pi\kappa} \frac{\kappa^2 - g^2}{g} y^2 + \frac{\kappa^2}{g} \tilde{G}^2 - g G^2 \right)}$$

fusão de par: Agora que já sabemos como renormaliza o acoplamento das cargas ao retirarmos uma par partícula-antipartícula, devemos considerar o mecanismo oposto. Na rede de Kondo “pares próximos” podem se fundir nos seguintes processos:

$$(1, 1) \oplus (-1, 1) = (0, 2)$$

$$(1, 1) \oplus (1, -1) = (0, 2)$$

$$(\pm 1, -1) \oplus (0, 2) = (\pm 1, 1)$$

$$(-1, \pm 1) \oplus (2, 0) = (1, \pm 1)$$

Quando isso ocorre:

$$\alpha_{iy} + \alpha_{ix} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(i) + \sqrt{g} e(i) \right) \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} (m(y) + m(x)) + \sqrt{g} (e(y) + e(x)) \right)$$

$$\alpha_{iy} + \alpha_{ix} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(i) + \sqrt{g} e(i) \right) (\sqrt{g} \tilde{e}(x)) = \tilde{\alpha}_{ix}$$

Definindo a partícula decorrente da fusão por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{S}_1 = \sum_{i>y} \left(\tilde{\alpha}_{ix} \ln z_{xi} - \frac{is}{z_{xi}} \alpha_{iy} + \tilde{\beta}_{ix} \ln \bar{z}_{xi} + \frac{is}{\bar{z}_{xi}} \beta_{iy} \right) \\ \bar{S}_2 = \sum_{x>i} \left(\tilde{\alpha}_{xi} \ln z_{ix} + \frac{is}{z_{ix}} \alpha_{yi} + \tilde{\beta}_{xi} \ln \bar{z}_{ix} - \frac{is}{\bar{z}_{ix}} \beta_{yi} \right) \end{array} \right.$$

Em ordem mais baixa, podemos desconsiderar os termos em s (que são da ordem de dl) e expressar a ação apenas em termos da carga efetiva:

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{S}_1 \cong \sum_{i>y} \left(\tilde{\alpha}_{ix} \ln z_{xi} + \tilde{\beta}_{ix} \ln \bar{z}_{xi} \right) \\ \bar{S}_2 \cong \sum_{x>i} \left(\tilde{\alpha}_{xi} \ln z_{ix} + \tilde{\beta}_{xi} \ln \bar{z}_{ix} \right) \end{array} \right.$$

Se ao iniciarmos o passo de renormalização tínhamos N partículas de carga $(1, 1)$ e M partículas de carga $(0, 2)$ ou $(2, 0)$, após o passo teremos $N \mp 2$ do tipo $(1, 1)$ e $M \pm 1$ do tipo $(0, 2)$ ou $(2, 0)$.

A integração sobre a coordenada relativa s é idêntica a que fizemos para o caso de aniquilação. Ao resultado dessa integração devemos somar a configuração idêntica de partículas que obtivemos, mas que já continha a partícula fundida antes do passo de renormalização. Isso nos leva a três contribuições de acordo com o tipo de fusão que ocorreu:

- $(\pm 1, \pm 1) \oplus (\mp 1, \pm 1) = (0, \pm 2)$

$$\frac{dG}{dl} = \pi y^2$$

- $(\pm 1, \pm 1) \oplus (\pm 1, \mp 1) = (\pm 2, 0)$

$$\frac{d\tilde{G}}{dl} = \pi y^2$$

- $(\pm 1, \pm 1) \oplus (\mp 2, 0) = (\mp 1, \pm 1)$

$$\frac{dy}{dl} = \frac{\sin(2\pi\kappa)}{2\kappa} (yG + y\tilde{G})$$

equações do grupo de renormalização para o limite denso

Somando as diversas contribuições, as equações de renormalização para o caso denso são:

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dl} &= \left(2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g\right)\right) y + \frac{\sin(2\pi\kappa)}{2\kappa} (yG + y\tilde{G}) \\ \frac{d\tilde{G}}{dl} &= 2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{g}\right) \tilde{G} + \pi y^2 \\ \frac{dG}{dl} &= 2(1 - g)G + \pi y^2 \\ \frac{d \ln g}{dl} &= -\pi \left(\sin(2\pi\kappa) \frac{\kappa^2 - g}{4\pi\kappa} y^2 + \frac{\kappa^2}{g} \tilde{G}^2 - gG^2 \right) \end{aligned}$$

com as condições iniciais:

$$\begin{aligned} \kappa &= 1 - \frac{J_z}{\pi} & g &= 1 & y &= \frac{J_\perp}{2} \\ G &= 0 & \tilde{G} &= 0 \end{aligned}$$

Equações estas que são uma generalização direta (de forma a acomodar o spin conforme não inteiro) das equações derivadas por Nienhus em [57]²⁸.

²⁸As equações de renormalização do problema de 2 líquidos de Luttinger são diferentes das que encontramos aqui. No apêndice C.5 derivamos essas equações usando a expansão de cumulantes e encontramos os mesmo resultados do trabalho

2.8 diagrama de fase da rede de Ising-Kondo

Antes de prosseguirmos para o diagrama de fase da rede de Kondo é instrutivo estudarmos um caso mais simples:

$$H = \sum_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}^{\dagger} \psi_{\vec{k}} + J \sum_i S_i^z \psi_i^{\dagger} \frac{\sigma^z}{2} \psi_i + y \sum_i S_i^x.$$

Proposto por Sikkema et al. [67], esse seria um modelo para URu_2Si_2 . A quebra da simetria da interação Kondo se deve a efeitos de campo cristalino.

Vamos considerar o problema unidimensional e linearizar a relação de dispersão. Bosonizando, mantendo apenas os termos de *forward-scattering* e normalizando a hamiltoniana pela velocidade de Fermi:

$$H = H_0 + \sum_i \sqrt{\frac{2}{\pi}} J \partial_x \hat{\phi}(i) S^z(i) - y S^x(i) \quad (2.50)$$

Essa é exatamente a hamiltoniana do efeito Jahn-Teller cooperativo [29]. O sinal de J é irrelevante, já que podemos redefinir o campo: $\hat{\phi} \rightarrow -\hat{\phi}$, e a variável de spin $S^z \rightarrow -S^z$, ou seja, os problemas ferromagnético e antiferromagnético são equivalentes.

De maneira intuitiva, a hamiltoniana 2.50 tem 2 pontos fixos: $J^z \ll y$ e $y \ll J^z$. Podemos mostrar por teoria de perturbação que o campo bosônico não tem *gap* em nenhum dos dois regimes. Contudo, ele apresenta um *gap* de spin nas duas situações.

Se aplicamos a rotação:

$$U = e^{i\sqrt{\frac{2}{\pi}} J \sum_x \hat{\theta}(x) S^z(x)}$$

encontramos que a hamiltoniana²⁹ em termos com campo composto é³⁰:

$$H = \bar{H}_0 - \frac{J^2}{\pi^2} \sum_i S^z(x_{i+1}) S^z(x_i) - \frac{y}{2} e^{-i\sqrt{8\pi}g(\frac{J}{2\pi})\hat{\theta}(x_i)} S^+(x_i) + h.c.$$

onde $g = 1$ e a interação tipo Ising é não-universal³¹. Usando os resultados que obtivemos para o grupo [30] e nas referencias ali contidas.

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{G}}{dl} &= 2 \left(1 - \frac{1}{g}\right) \tilde{G} + C \left(g - \frac{1}{g}\right) y^2 \\ \frac{dG}{dl} &= 2(1 - g) G + C \left(\frac{1}{g} - g\right) y^2 \end{aligned}$$

²⁹com as mesmas aproximações que fizemos no parágrafo 2.6.4.

³⁰o mesmo resultado pode ser obtido ao calcularmos a ação efetiva e integrarmos por partes o termo de longo alcance.

³¹depende do procedimento de *cut-off*.

de renormalização do gás de Coulomb, se $J < 2\pi$, o operador de *flip* é relevante e o sistema apresenta um *gap*. Por outro lado, se $J > 2\pi$ esse operador é irrelevante.

$$\frac{dy}{dl} = 2 \left(1 - \frac{J^2}{4\pi^2} g \right) y$$

$$\frac{d \ln g}{dl} = -\frac{J^2}{4\pi} g y^2$$

Na região de irrelevância $y \rightarrow 0$ e $g \rightarrow 1$, ou seja, o modelo efetivo para os spins nessa região seria:

$$H_{ef} = -\frac{J^2}{\pi^2} \sum_i S^z(i+1) S^z(i)$$

que ordena ferromagneticamente. Na linguagem do efeito Jahn-Teller temos uma ferridistorção e o campo bosônico não tem *gap*. Essa é a física correspondente ao ponto fixo $y \ll J$, sendo a magnetização por sítio máxima.

Falta responder qual a estrutura magnética quando estamos na região de relevância dos *flips*. Nesse caso g renormaliza para zero enquanto y aumenta. A transição é uma Kosterlitz-Thouless tradicional em torno de $J = 2\pi$. Do ponto de vista do gás de Coulomb, o sistema renormaliza para um plasma de cargas que começam a sofrer blindagem, abrindo um *gap* no campo composto (bosons + spins). Desprezando o termo não-universal, já que a física de baixa energia é dominada pelos termos de longo alcance, o modelo efetivo que encontramos é simplesmente:

$$H_{ef} = -y \sum_i S^x(i),$$

que corresponde a física do ponto fixo $J \ll y$. Ou seja, os spin alinhados na direção z .

A natureza da transição é similar a transição Kosterlitz-Thouless, já que corresponde a quando os operadores de inversão de spin passam de irrelevantes para relevantes.

2.9 diagrama de fase da rede de Kondo

Encontrar os diagrama de fase magnética dos spins com os resultados do grupo de renormalização não é uma tarefa trivial. Como usamos bosonização abeliana, tratamos de forma diferente a componente z das componentes transversas do spin. Enquanto correlações de curto alcance transversas nos spins renormalizados são geradas por fusão de partículas, correlações na direção z aparecem através da aniquilação destas. Dessa forma não existe uma fugacidade associada a esse mecanismo.

Se re-examinamos o processo de aniquilação, percebemos que podemos escrever essas correlações na direção z como função das demais fugacidades. Basta simplesmente fazermos o *point-splitting* da

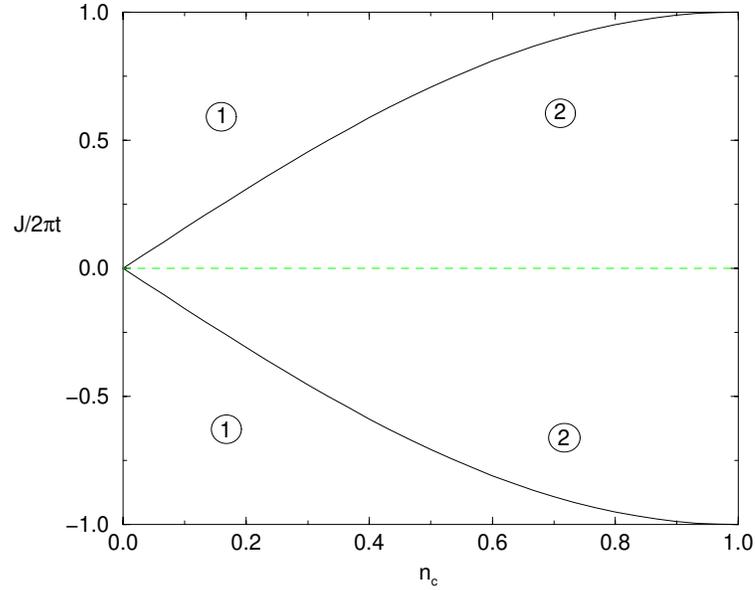


Figura 2.10: diagrama de fase do modelo Jahn-Teller cooperativo (ou cadeia de Ising-Kondo). A região 1 corresponde a um ordenamento na direção z e a região 2 ao ordenamento na direção x . Nesse diagrama J não está normalizado pela velocidade de Fermi.

parte fermiônica dos operadores que estamos aniquilando. Ao procedermos dessa forma encontramos mais um operador de spins renormalizados:

$$O_z \sim 2 \left(\tilde{G}^2 - G^2 \right) S^z(x + \delta) S^z(x) + \frac{y^2}{2} S^-(x + \delta) S^+(x) + h.c.,$$

que é a contra-parte dos operadores que aparecem na fusão.

A hamiltoniana efetiva que surge com esse quadro de operadores é:

$$H = \bar{H}_0 + \sum_j 2 \left[\tilde{G}^2 - G^2 \right] S^z(x_{j+1}) S^z(x_j) + y \cos(\sqrt{2\pi}g\bar{\phi}(x_j)) e^{i\sqrt{\frac{2\pi}{g}}\kappa\bar{\theta}(x_j)} S^+(x_j) \\ \left[G e^{i\sqrt{8\pi}g\bar{\phi}(x_j)} + \frac{y^2}{2} \right] S^+(x_{j+1}) S^-(x_j) + \tilde{G} e^{i\sqrt{\frac{8\pi}{g}}\kappa\bar{\theta}(x_j)} S^+(x_{j+1}) S^+(x_j) + h.c.$$

com as condições iniciais $G = \tilde{G} = 0$ e $g = 1$.

Como havíamos comentado, no início do processo de renormalização a física de baixas energias da rede é governada pelas equações de renormalização do problema Kondo de 2 canais³²:

$$\frac{dy}{dl} = \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g \right) \right) y$$

³²derivadas do apêndice C.1.

$$\frac{d\left(\frac{\kappa^2}{g}\right)}{dl} = -8y^2 \frac{\kappa^2}{g}$$

substituindo $g = 1$ e $\kappa = \left(1 - \frac{J_z}{\pi}\right)$:

$$\frac{dy}{dl} = \left(\frac{J_z}{\pi} - \frac{1}{2} \left(\frac{J_z}{\pi}\right)^2\right) y$$

$$\frac{dJ_z}{dl} = 4\pi \left(1 - \frac{J_z}{\pi}\right) y^2$$

Essas equações apresentam um transição tipo Kosterlitz -Thouless³³ em torno de $J_z = 0$. Para uma rede ferromagnética, a fugacidade sempre decresce, ou seja operador de inversão de spin é irrelevante. Já para o caso antiferromagnético, encontramos o ponto fixo intermediário (ponto de Toulouse) em $J_z = \pi$. No intervalo $J_z \in]0, 2\pi[$ a fugacidade cresce e esse processo pode nos levar para fora da região de validade do grupo de renormalização. Assumindo que isso não ocorre antes de entramos no regime denso, a física de baixas energias passa a ser controlada pelas equações de renormalização da rede densa:

$$\frac{dy}{dl} = \left(2 - \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} + g\right)\right) y + \frac{\sin(2\pi\kappa)}{2\kappa} y (G + \tilde{G}) \quad (2.51)$$

$$\frac{d\tilde{G}}{dl} = 2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{g}\right) \tilde{G} + \pi y^2 \quad (2.52)$$

$$\frac{dG}{dl} = 2(1 - g)G + \pi y^2 \quad (2.53)$$

$$\frac{d \ln g}{dl} = \pi \left(\frac{\sin(2\pi\kappa)}{4\pi\kappa} \frac{\kappa^2 - g^2}{g} y^2 + \frac{\kappa^2}{g} \tilde{G}^2 - gG^2\right) \quad (2.54)$$

Essas equações são não lineares, sendo difícil a obtenção de uma solução analítica. Contudo podemos perceber que a condição:

$$\frac{\kappa^2}{g} + g > 4 \quad (2.55)$$

faz com que as quantidades g , y e \tilde{G} renormalizem para zero, entanto G cresce. Em função de J_z o critério de irrelevância 2.55 corresponde a:

³³veja fig. 2.1.

$$\frac{J_z}{\pi} > 1 + \sqrt{4g - g^2} \quad \text{ou} \quad \frac{J_z}{\pi} < 1 - \sqrt{4g - g^2},$$

em particular, para o caso de férmions não interagentes, $g = 1$:

$$\frac{J_z}{\pi} > 1 + \sqrt{3} \cong 2.7 \quad \text{ou} \quad \frac{J_z}{\pi} < 1 - \sqrt{3} \cong -0.7$$

Dentro dessa região, a hamiltoniana efetiva que surge é hamiltoniana de Heisenberg XXZ ferromagnética:

$$\tilde{H} = H_0 + \sum_j -2G^2 S^z(x_{j+1}) S^z(x_j) + G [S^+(x_{j+1}) S^-(x_j) + S^+(x_j) S^-(x_{j+1})]$$

Nesse caso o estado fundamental do sistema seria ferromagnético. Correspondendo as duas regiões denominadas como ferromagnéticas nos diagramas numéricos (figuras 1.3).

Esse mecanismo de ordenamento é muito parecido com o mecanismo de “*double exchange*”: como fazer um *flip* corresponde a um processo de alta energia, já que o operador é irrelevante no sentido da renormalização, os férmions originais aumentam sua energia cinética quando não há *kinks*, o que implica no ordenamento ferromagnético.

Um cálculo semelhante para a obtenção desse ordenamento, mas baseado na deformação das relações de comutação bosônicas, foi feito por Honner e Gulácsi[36]. Em [37] esses autores também interpretaram esse ordenamento como semelhante ao mecanismo de “*double exchange*”.

Um ordenamento ferromagnético dos spins faz com que as velocidades de Fermi das banda *up* e *down* sejam diferentes, o que nos obriga a mudar nosso formalismo. É importante lembrarmos que estamos extrapolando o fluxo de renormalização para obtermos esse resultado. Ou seja, em cada passo do grupo de renormalização esse ordenamento não existiu, sendo que o que estamos observando é a sua tendência. Exatamente por isso não temos acesso à toda a física dessa região[74].

Vemos que a transição³⁴ é similar a transição Kosterlitz-Thouless, já que é uma generalização imediata da transição Kondo do problema de uma única impureza.

A pergunta que devemos nos fazer agora é qual a natureza das regiões do diagrama em que o processo de inversão de spins é relevante. As equações de renormalização para essa fase são tais que as 3 fugacidades atingem a ordem 1 simultaneamente. Ou seja, a inversão de spins simples e correlacionada desestabilizam o líquido de Luttinger para o campo composto. Esse tipo de argumento pode ser usado para justificar a inclusão de uma interação direta entre os momentos localizados, o que nos levaria a um modelo efetivo tipo Heisenberg-Kondo[28, 92].

Resolvendo numericamente as equações de renormalização, vemos que o fluxo de renormalização

³⁴apresentada como as linhas que separam as regiões 1 e 2 na figura 2.11.

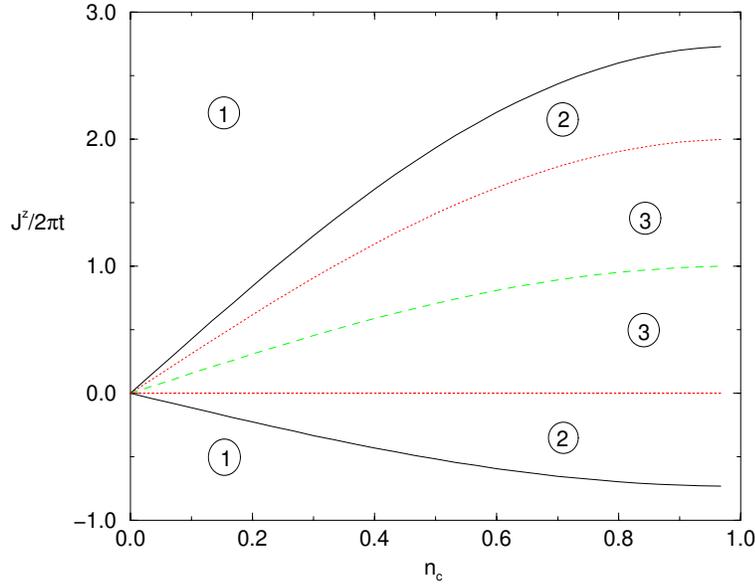


Figura 2.11: diagrama de fase da transição ordem/desordem da rede de Kondo anisotrópica com férmions não interagentes. Nesse diagrama, J^z não está normalizado pela velocidade de Fermi.

$ \kappa $	y	\tilde{G}	G	$\tilde{G} - G$
$]0, 1/2[$	$\rightarrow +\infty$	$\rightarrow +\infty$	$\rightarrow +\infty$	< 0
$]1/2, 1[$	$\rightarrow +\infty$	$\rightarrow +\infty$	$\rightarrow +\infty$	< 0
$]1, 3/2[$	$\rightarrow +\infty$	$\rightarrow +\infty$	$\rightarrow +\infty$	> 0
$]3/2, \sqrt{3}[$	$\rightarrow +\infty$	$\rightarrow +\infty$	$\rightarrow +\infty$	> 0
$] \sqrt{3}, +\infty[$	$\rightarrow 0$	$\rightarrow 0$	$\rightarrow +\infty$	> 0

Tabela 2.4: comportamento qualitativo do fluxo de renormalização.

apresenta o comportamento descrito na tabela 2.4. Mostrando que sempre um dos dois campo composto ordena.

Existem alguns pontos do espaço de parâmetros que simplificam um pouco as equações equações de renormalização e nos permitem ganhar algum entendimento da física dessa fase. O primeiro caso importante é quando nosso problema se torna completamente análogo ao problema de 2 líquidos de Luttinger, ou seja, quando $J_z = 0$ ou $J_z = 2\pi$ ($|\kappa| = 1$). Essas duas linhas se relacionam pela relação de simetria:

$$\hat{\phi}(x) \rightarrow -\hat{\phi}(x) \quad \text{e} \quad \hat{\theta}(x) \rightarrow \hat{\theta}(x),$$

ou em termos das componentes quirais:

$$\begin{aligned} \phi_R(x) &\rightarrow -\phi_L(x) \\ \phi_L(x) &\rightarrow -\phi_R(x) \end{aligned}.$$

No diagrama 2.11 elas correspondem as duas linhas vermelhas. Se considerarmos o caso $g(0) = 1$, podemos integrar as equações de renormalização e encontramos³⁵:

$$\frac{dg(0)}{dl} = 0$$

$$y = \frac{|J_{\perp}|}{2} e^l$$

$$G = \tilde{G} = \frac{\pi}{4} J_{\perp}^2 (e^{2l} - 1)$$

quando y , G e \tilde{G} alcançam a ordem de 1 somos obrigados a parar o processo de renormalização em torno de:

$$l \sim \ln \left(\frac{2}{|J_{\perp}|} \right),$$

isso define um comprimento característico para o problema que é dado por:

$$a \sim 2 \ln \left(\frac{2}{|J_{\perp}|} \right) a_0,$$

onde a_0 é o parâmetro de rede bosônico. Esse comprimento seria o equivalente do comprimento Kondo, o qual muitas vezes é interpretado como o comprimento da nuvem de Kondo. O balanço preciso entre as cargas elétricas e magnéticas impede a renormalização de g . Fisicamente isso pode ser entendido como a frustração entre a tentativa de ordenar as cargas elétricas e as cargas magnéticas simultaneamente. O quadro que surge é bastante peculiar. Apesar de termos um plasma de partículas, não existe blindagem das cargas. Isso implica que todos os comprimentos de correlação do campo composto são leis de potência, ou seja, um campo não massivo³⁶. O ponto de transição ordem-desordem do modelo de Ising com campo transversal é muito similar a essa física[44]. O único ponto no espaço de parâmetros em que o campo composto não tem *gap* é exatamente nessa transição. A similaridade com o modelo de Ising no campo transversal é ainda reforçada pelo fato de y renormalizar mais lentamente na região 2 do que na região 3. Ou seja, a região 2 corresponderia a uma fase com parâmetro de ordem não nulo na direção z , enquanto a região 3 teria esse parâmetro de ordem nulo.

³⁵ Para os casos com interação, essas linhas de "transição" se generalizam para $|k| = g(0)$.

³⁶ O surgimento de um *gap* no espectro pode ser caracterizado através de funções de correlação exponencialmente decrescentes. Na forma de gás de Coulomb do problema de sine-Gordon, essa física é caracterizada na região de relevância da fugacidade porque as cargas começam a sofrer efeitos de blindagem o que faz com que a interação logarítmica passe a ser de curto alcance. Em nosso problema percebemos que isso não ocorre, como o sistema apresenta compostos de carga elétrica e magnética nunca as cargas conseguem ser arrumadas de forma a blindar as duas interações simultaneamente. Ou seja, sempre haveriam funções de correlação de campo de longo alcance o que indica que não há o surgimento de uma *gap* de spin.

A outra linha do diagrama de fase que simplifica as equações de renormalização é o ponto de Toulouse de Zachar, Emery e Kivelson [91]. Como $\kappa = 0$, a hamiltoniana efetiva nesse ponto é rigorosamente:

$$H = \sum_j 2 \left[\tilde{G}^2 - G^2 \right] S^z(x_{j+1}) S^z(x_j) + y S^x(x_j) + \\ G S^+(x_{j+1}) S^-(x_j) + \tilde{G} S^+(x_{j+1}) S^+(x_j) + h.c.$$

O termo em G tem uma física bastante clara, ele corresponde ao termo XY do modelo de Heisenberg ferromagnético. A física do termo em \tilde{G} é análoga, só que para o modelo de Heisenberg antiferromagnético. Quando um par de spins vizinhos esta alinhado ferromagneticamente, eles contribuem com \tilde{G} para a energia do sistema. Ou seja, enquanto o operador em G induz flutuações ferromagnéticas, o operador em \tilde{G} induz flutuações antiferromagnéticas. Escrevendo a hamiltoniana efetiva em termos dos operadores S^x e S^y , reconhecemos que estamos trabalhando com o modelo XYZ com um campo magnético aplicado na direção x .

$$H = \sum_j 2 \left[\tilde{G}^2 - G^2 \right] S^z(x_{j+1}) S^z(x_j) + y S^x(x_j) + \\ \left(\frac{G + \tilde{G} + y^2}{2} \right) S^x(x_{j+1}) S^x(x_j) - \left(\frac{\tilde{G} - G + y^2}{2} \right) S^y(x_{j+1}) S^y(x_j) \\ H = \frac{-1}{4} \sum_j 2 \left[G^2 - \tilde{G}^2 \right] \sigma^z(x_{j+1}) \sigma^z(x_j) - 2y \sigma^x(x_j) + \\ - \left(\frac{G + \tilde{G} + y^2}{2} \right) \sigma^x(x_{j+1}) \sigma^x(x_j) + \left(\frac{\tilde{G} - G - y^2}{2} \right) \sigma^y(x_{j+1}) \sigma^y(x_j)$$

O modelo sem campo magnético aplicado é exatamente solúvel pelo *ansatz* de Bethe [8], correspondendo ao modelo de 8-vértices. Sem o campo, as quantidades que definem a fase do modelo são: $\Delta = \frac{J_z}{J_x} = \frac{-4(\tilde{G}^2 - G^2)}{G + \tilde{G} + y^2}$ e $\Gamma = \frac{J_y}{J_x} = \frac{G - \tilde{G} + y^2}{G + \tilde{G} + y^2}$. Se resolvemos numericamente as equações de renormalização, e pararmos a renormalização quando $y \cong 1$, obtemos que $G + \tilde{G} \sim 1$. Isso nos coloca próximos na fronteira entre a fase ordenada ferromagneticamente e a a fase desordenada. Se por outro lado considerarmos apenas o termo de Ising com campo transversal nos encontramos na fase desordenada modelo. Apesar de não termos uma solução exata, é intuitivo que a combinação desses dois mecanismos torne o sistema desordenado, ou seja, estamos dentro da fase paramagnética da cadeia de Kondo³⁷.

Obtivemos que a região 1 do diagrama 2.11 é ordenada ferromagneticamente, com parâmetro de ordem $\langle \sigma^z \rangle = 1$. Na linha de Zachar-Emery-Kivelson, obtivemos que esse parâmetro de ordem é nulo, $\langle \sigma^z \rangle = 0$. Além disso, encontramos duas linhas que são transições de fase quânticas para o

³⁷mesmo que o sistema ordene no plano (devido ao termo de campo transversal), ao retornarmos a base original de spins o sistema será desordenado porque θ é desordenado.

campo composto. Essas transições são muito similares a transição ordem-desordem do modelo de Ising no campo transversal. Isso nos faz acreditar que a região 3 do diagrama corresponde a fase paramagnética do modelo, enquanto a região 2 a uma região com magnetização z não nula, mais ainda não saturada. Como todas as transições são contínuas, o parâmetro de ordem cresce monotonicamente como função de J_z na região 2. Intuitivamente isso é consistente com a interpretação que havíamos dado aos operadores em G e \tilde{G} . Em 2, $G > \tilde{G}$, o que implica que as flutuações ferromagnéticas dominam o sistema. Por outro lado, em 3, $G < \tilde{G}$ o que implica na existência de fortes flutuações antiferromagnéticas. O pior cenário é a linha de Toulouse, que como vimos ainda é desordenada.

Esse quadro é consistente com os diagramas de fase numéricos para a rede de Kondo isotrópica (veja figura 1.3). Nos dois casos (ferro- e antiferro-) a região denominada de ferromagnética tem parâmetro de ordem $\langle \sigma^z \rangle = 1$. No caso da rede de Kondo ferromagnética, a região denominada IC apresenta $\langle \sigma^z \rangle \neq 0$, crescendo como função de J . Para a cadeia antiferro- a região $\langle \sigma^z \rangle \neq 0$ corresponde a pequena linha entre os símbolos vazados e os símbolos cheios, enquanto a região paramagnética, obviamente, tem parâmetro de ordem nulo.

O que estamos argumentando é que existem duas transições contínuas no diagrama de fase do problema da rede de Kondo, exatamente como no modelo Jahn-Teller. A primeira é a generalização direta da transição Kosterlitz-Thouless, correspondendo ao momento em que os operadores de inversão de spin se tornam relevantes, nos tirando da física de “*double exchange*”, e mudando a classe de universalidade da hamiltoniana efetiva. A segunda transição seria a generalização da transição contínua do modelo Ising com campo transversal: o modelo efetivo, gerado na fase em que os operadores de *flip* são relevantes, sobre uma transição de fase quântica. Se tudo isso é correto e pode ser generalizado para a rede de Kondo isotrópica, talvez a grande dificuldade de se caracterizar numericamente a natureza da transição desse modelo pode estar associada ao fato dessas duas transições no caso antiferromagnético existirem muito próximas.

Finalmente, parece razoável propor que o modelo efetivo para os spins deva ser do tipo XYZ com um campo.

Como último lembrete, devemos ter sempre em mente que estamos trabalhando apenas com os termos de “*forward-scattering*”. A inclusão dos termos de “*back-scattering*” pode mudar os pontos fixos que obtivemos, como ocorre no modelo de 2 líquidos de Luttinger.

2.10 quebra de simetria

O modelo de Kondo original é isotrópico: $J_z = J_x = J_y$, com simetria $SU(2)$. Ao fazermos bosonização abeliana escolhemos uma direção preferencial e por conta disso era natural trabalharmos em um modelo anisotrópico: $J_z \neq J_x = J_y$, com simetria $U(1)$. Para podermos tratar o problema através do grupo de renormalização fomos forçados a impor que $|J_x| = |J_y| \ll 1$.

Como vimos, o termo de acoplamento Kondo no plano XY é um operado com spin conforme ± 1 . Vimos que se pode decompor o acoplamento Kondo na direção Z em duas partes: a primeira introduz uma interação de curto alcance entre os spins na direção Z, enquanto a segunda modifica a dimensão e o spin conforme do operador na direção transversa. Ao fazermos isso, a simetria XY é quebrada em nosso modelo efetivo. Isso se mostra nas equações de renormalização como o fluxo distinto das quantidades G e \tilde{G} . Mesmo no campo composto, a simetria XY é restaurada ao longo do fluxo de renormalização quando $\kappa = \pm 1$ ³⁸ e quando o operador de dimensão anômala se torna irrelevante.

Em particular, o modelo efetivo que encontramos para a linha de Zachar-Emery-Kivelson leva em conta todas essas “quebras de simetria” para o campo composto. Na base original, tínhamos um operador com spin conforme 1 e um sistema de spins com simetria $U(1)$. Ao fazermos nosso mapeamento no campo composto, mostramos que poderíamos descrever a física desse modelo como um conjunto de três operadores de spin conforme zero, mas pagando o preço de quebrar a simetria $U(1)$ dos spins. Por conta disso, a renormalização nos levou ao modelo XYZ, em lugar do mais intuitivo XXZ. Essa quebra de simetria esta relacionada a existência de correlações antiferromagnéticas de curto alcance nessa região do diagrama de fase, que são simuladas no modelo efetivo através da quebra de simetria.

³⁸fazendo com que o spin conforme seja ± 1 .

Capítulo 3

Ansatz de Bethe e a Cadeia de Heisenberg

Os trabalhos que originaram o estudo dos sistemas integráveis foram os de Bethe[10] e Onsager[59] a mais de meio século. Nele, Bethe propôs uma forma para a estrutura das funções de onda do modelo de Heisenberg de spin $\frac{1}{2}$. A partir desses trabalhos pioneiros se abriu um mundo completamente novo para a física-matemática e a física teórica em trabalhos como os de Orbach, Yang, Baxter e Faddeev [60, 88, 8, 24]. Em muitos sentidos este tem sido um campo muito amplo e inovador, ligando áreas que aparentemente não tinham correlação. Por exemplo, quando se poderia imaginar uma ligação entre sistemas integráveis, a teoria de nós e teorias de Gauge tipo Chern-Simon[83]. Todo um novo ramo da álgebra foi aberto, sendo conhecido pelo nome “exótico” de grupos quânticos (os trabalhos de revisão de Takhtajan[72] e Chang[16] são ótimas referências).

Trabalhos iniciais a respeito das consequências da integrabilidade sobre a dinâmica remontam ao início da década de 80. Contudo entre 1996 e 1998, uma série de trabalhos revelou um possível comportamento anômalo nas propriedades de transporte de carga e spin desses sistemas ([11],[94]-[54],[52] e [9]). Um outro trabalho muito interessante, [61], propôs uma especulação mais geral que a anterior: sistemas que se desviam do comportamento ergódico levam a propriedades anômalas de transporte.

Não é nenhum exagero falarmos que existem dois *ansatz* de Bethe. O *ansatz* de Bethe funcional, que é baseado na idéia original de Bethe. Este consiste em propor uma função de onda e achar as condições para que ela seja um autoestado do sistema. Por outro lado, existe o *ansatz* de Bethe algébrico que é baseado nas equações de Yang-Baxter e tem sua formalização conhecida como método do espalhamento inverso quântico. Apesar de ser mais versátil do ponto de vista matemático, o *ansatz* de Bethe algébrico é extremamente inconveniente para a construção das funções de onda. Historicamente, o *ansatz* de Bethe algébrico, teve sua origem no estudo da equação de Schödinger não linear.

O modelo não trivial mais simples que é integrável segundo a formulação de Bethe é o modelo de Heisenberg-Ising de spin $\frac{1}{2}$ ou modelo XXZ:

$$H_{Heisenberg} = \sum_{i=1}^N \{ J (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + J_z S_i^z S_{i+1}^z \}, \quad (3.1)$$

$$H_O = J_z \sum_{i=1}^N \{ \alpha (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + S_i^z S_{i+1}^z \} \quad (3.2)$$

Para o modelo de Heisenberg, o caso antiferromagnético na fase não crítica corresponde a $0 \leq \alpha \leq 1$ e $J > 0$. Com $\alpha = 0$ temos o modelo de Ising e para $\alpha = 1$ o antiferromagneto isotrópico. O Hamiltoniano H_O foi estudado por Orbach em [60].

Uma série de artigos de Yang-Yang, de 1966, unificaram a notação do modelo XXZ. Em [86] eles estudaram as propriedades de $H_{Heisenberg}$ e mostraram que a transformação unitária U (eq. 3.3) aplicada a $H_{Heisenberg}$ torna irrelevante o sinal de J para a determinação do espectro. Com isso, pode-se estudar simultaneamente o caso ferro- e anti-ferromagnético.

$$U = \prod S_i^z, \quad (3.3)$$

$$H_{Heisenberg}(J, J_z) = U H_{Heisenberg}(-J, J_z) U^\dagger,$$

onde o produtório é tomado sobre os sítios ímpares da cadeia e usamos $\Delta = -\frac{1}{\alpha}$.

Por conta disso é conveniente definir uma segunda parametrização da hamiltoniana:

$$H_y = \frac{1}{J} H_o(J, J_z) = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{1}{2} [S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z] + h S_i^z \right\}, \quad (3.4)$$

Nesta hamiltoniana o caso antiferromagnético na fase não crítica corresponde a $\Delta \leq -1$. Para H_y , Yang-Yang[88] demonstraram que para H_y existe solução do tipo *ansatz* de Bethe para o estado fundamental de uma cadeia finita e derivaram as propriedades da energia do estado fundamental por sítio numa cadeia infinita[87].

Existem dois casos limites interessantes: o modelo de Ising, que ocorre quando $J=0$; e o modelo XY, quando $J_z = 0$. Para cada um desses limites, existe uma forma mais conveniente de expressarmos a hamiltoniana. Em termos práticos, isto nos leva a duas formas distintas das equações do *ansatz* de Bethe e por isso vamos definir o que chamamos de duas representações da hamiltoniana de Heisenberg: a primeira, chamada de representação de Orbach, corresponde a hamiltoniana (3.2), enquanto a segunda chamaremos de representação de Yang, (3.4).

Se aplicarmos a transformação de Jordan-Wigner na hamiltoniana XXZ e temporariamente esquecermos as condições de contorno, chegaremos à:

$$H_y = 2 \sum_i \left\{ \left(C_{i+1}^\dagger C_i + C_i^\dagger C_{i+1} \right) + 2\Delta (n_{i+1} n_i) + 2\Delta n_i \right\} + \frac{N\Delta}{2}, \quad (3.5)$$

ou na representação de momentos e ao tomarmos o limite termodinâmico:

$$H_f = \sum_k 2t \cos(k) n_k + \sum_{k_1 \neq k_2, k_3 \neq k_4} 2v (\delta(k_1 + k_2 - k_3 - k_4) + \delta(k_1 + k_4 - k_2 - k_3)).$$

O que nos faz perceber que as interação entre os férmions são da forma de colisões elásticas entres eles. Essa é a idéia central do anstaz de Bethe como apresentaremos a seguir.

3.1 formulação do *ansatz*

O *ansatz* de Bethe, apesar de ser uma técnica muito comentada, é pouco conhecida pela maioria dos físicos de matéria condensada. Isto ocorre pela diversidade de abordagens. Como havíamos colocado na introdução, na realidade existem dois *ansatz* de Bethe: o *ansatz* funcional (ou analítico) e o *ansatz* algébrico. Do ponto de vista matemático, o *ansatz* de Bethe algébrico é muito mais elegante, se baseando nas matrizes de espalhamento de pseudo-partículas e nas suas relações de comutação (através da equação de Yang-Baxter). Por outro lado, o *ansatz* funcional apresenta vantagens práticas para a construção dos autoestados da hamiltoniana. No próximo parágrafo apresentamos uma derivação mais conceitual que a usual¹ para o *ansatz* the Bethe funcional, com particular interesse no modelo de Heisenberg. Em seguida apresentamos o *ansatz* algébrico e o espectro de baixa energia da cadeia no limite termodinâmico.

3.1.1 *ansatz* de Bethe Funcional

Considere uma hamiltoniana \mathcal{H} de férmions interagentes. Chamaremos de \mathcal{V} o espaço de Hilbert dessa hamiltoniana. Sobre este mesmo \mathcal{V} , atua uma hamitoniana \mathcal{H}_0 de férmions não interagentes de forma que, no limite em que as constantes de acoplamento entre as partículas vai a zero, $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$. De maneira genérica, chamaremos essas constantes de acoplamento por Δ .

Se, ao ligarmos adiabaticamente a interação entre as partículas e se para todo autoestado de \mathcal{H}_0 , $|\psi_0\rangle$, houver uma curva, $\gamma(\Delta)$, contínua em \mathcal{V} , tal que $|\psi(\Delta)\rangle$ é um autoestado de $\mathcal{H}(\Delta)$, temos o que é conhecido como um líquido quântico[77]. É um fato bem conhecido que para dimensões ≥ 3 a teoria do líquido Fermi é uma boa aproximação para valores de Δ suficientemente pequenos. Em sistemas de baixas dimensionalidade (d=1 ou 2) as flutuações quânticas seriam tão fortes que a hitótese

¹que se encontra no apêndice D seguindo a referência [40].

de continuidade de $\gamma(\Delta)$ poderia ser violada. Em dimensão 1 as características físicas são tão diferentes que o modelo efetivo de baixas energias é conhecido como líquido de Luttinger. Descrevemos bastante sobre o conceito de líquido de Luttinger na primeira parte desse texto. Em particular, entendemos que as excitações elementares em dimensão 1 são pseudopartículas bosônicas de compostos fortemente correlacionados dos “férmions” iniciais.

De forma explícita no conceito de líquido está a continuidade das funções de onda como função dos parâmetros de interação. Conceitualmente o *ansatz* de Bethe não é muito diferente disso. Em vez de supormos que para um autoestado de \mathcal{H}_0 com m férmions existe uma aplicação contínua que leva $|\psi_0\rangle$ em $|\psi(\Delta)\rangle$; vamos supor que existe uma aplicação projeção π , tal que m estados de 1 férmion podem ser levados em 1 autoestado de m férmions.

De maneira axiomática, nossas hipóteses são:

- Um sistema de m férmions será caracterizado por m pseudo-momentos: $\{k_1, \dots, k_m\}$,
- existe uma aplicação, π , tal que:

$$\pi \left(\sum_{i=1}^m \otimes |k_i\rangle \right) = |k_1, \dots, k_m\rangle$$

Finalmente podemos definir o *ansatz* como o diagrama comutativo:

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{V} \otimes \mathcal{V} & \xrightarrow{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}} & \mathcal{V} \otimes \mathcal{V} \\ \pi \downarrow & & \downarrow \pi \\ \mathcal{V} & \xrightarrow{\mathcal{H}} & \mathcal{V} \end{array}$$

Figura 3.1: definição do *ansatz* de Bethe em termos de um diagrama comutativo.

Ou seja, quando existir uma aplicação π , tal que a ação de \mathcal{H} sobre o espaço de recobrimento $\mathcal{V} \otimes \mathcal{V}$ for igual a ação de \mathcal{H} sobre $\pi(\mathcal{V} \otimes \mathcal{V}) = \mathcal{V}$, o hamiltoniano admite solução tipo *ansatz* de Bethe.

Apesar de não parecer evidente, existem algumas diferenças importantes entre a filosofia de líquidos e a do *ansatz*. Se um auto-estado do sistema não interagente é não degenerado, obviamente ao introduzirmos uma interação perturbativa, obteremos o mesmo resultado pelas duas técnicas². Essa é a razão para que o *ansatz* de Bethe e os métodos de teoria de campo concordem no que se refere ao estado fundamental e funções de correlação a temperatura nula. Porém se observarmos o comportamento de sub-espacos degenerados do hamiltoniano livre, veremos que em geral a transição para o sistema interagente é descontínua. Imagine uma curva, no espaço de Hilbert da hamiltoniana, parametrizada pela interação entre as partículas. Especificamente para o modelo de Heisenberg podemos mostrar que

²supondo que não haja cruzamento de níveis.

os autoestados de maior peso na álgebra $SU(2)$ no ponto isotrópico percorrem um caminho contínuo no espaço de Hilbert até o sistema não-interagente. Na literatura do *ansatz* de Bethe esses estados são conhecidos como estados regulares e obrigatoriamente correspondem a soluções reais das equações de Bethe. Ou seja, esse são os estados que se comportam segundo a nossa definição de líquido quântico de partículas. De forma oposta estados que pertençam a um sub-espaço degenerado no hamiltoniano não interagentes têm suas curvas descontínuas em torno no ponto não interagente. Esses estados correspondem a estados não extremais na álgebra do $SU(2)$ no ponto isotrópico e se dividem em dois grupos: os tipo tripleto, que tem todos os momentos de Bethe reais, e os tipo singleto, que são as soluções com momentos complexos. As soluções que tem momentos de Bethe reais são conhecidas como soluções tipo onda de spin (SWC-spin wave class), enquanto as com momentos complexos são conhecidas como *strings*.

Para ilustrarmos o uso do diagrama comutativo, vamos escolher como exemplo o modelo de férmions sem spin:

$$H(\Delta) = \sum_{x=1}^N \left\{ \left(C_{x+1}^\dagger C_x + C_x^\dagger C_{x+1} \right) + \Delta (n_{x+1} n_x) \right\}, \quad (3.6)$$

com condições periódicas, ou anti-periódicas.

$$C_{N+1} = C_1 \text{ ou } C_{N+1} = -C_1$$

Na notação que havíamos definido anteriormente:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{x=1}^N C_{x+1}^\dagger C_x + C_x^\dagger C_{x+1}, \\ H(\Delta) &= H_0 + \Delta \sum_{x=1}^N (n_{x+1} n_x). \end{aligned}$$

Pertencem ao espaço \mathcal{V}^3 os estados criados a partir do vácuo fermiônico, $|0\rangle$, pelos operadores C_n^\dagger .

É um resultado trivial que H_0 pode ser diagonalizado por uma transformação de Fourier. Definindo:

$$C_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=1}^N e^{ikx} C_x^\dagger,$$

encontramos que H_0 pode ser escrito como:

³A dimensão de \mathcal{V} é 2^N .

$$H_0 = \sum_k 2 \cos [k] n_k,$$

$$|k_1, \dots, k_m\rangle = \prod_{i=1}^m C_{k_i}^\dagger |0\rangle,$$

onde definimos o operador de número do espaço de momentos da forma usual: $n_k = C_k^\dagger C_k$. As condições periódicas, ou anti-periódicas, determinam que:

$$k_i = \frac{2\pi}{N} I_i$$

onde I_i é um inteiro para as condições periódicas, ou um semi-inteiro para as condições anti-periódicas.

As soluções de 1 corpo de H e H_0 tem a forma:

$$|k_i\rangle = C_{k_i}^\dagger |0\rangle.$$

Iremos tratar inicialmente do problema de dois corpos:

$$|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle \longrightarrow |k_1, k_2\rangle.$$

A forma mais trivial que π pode assumir é o produto, mas como a interação é definida no espaço real é importante pensarmos em π sobre este espaço:

$$|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle = C_{k_1}^\dagger |0\rangle \otimes C_{k_2}^\dagger |0\rangle = \sum_{x,y} e^{i(k_1 x + k_2 y)} C_x^\dagger |0\rangle \otimes C_y^\dagger |0\rangle$$

$$\pi (C_x^\dagger |0\rangle \otimes C_y^\dagger |0\rangle) = C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle$$

Contudo, se usarmos as relações de anticomutação dos férmions, encontramos uma contradição:

$$C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle = -C_y^\dagger C_x^\dagger |0\rangle = -\pi^{-1} (C_y^\dagger |0\rangle \otimes C_x^\dagger |0\rangle) = -\pi (C_x^\dagger |0\rangle \otimes C_y^\dagger |0\rangle) = -C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle.$$

A maneira de resolvermos isso é introduzirmos uma “ordem normal”. Assim, se $x < y$:

$$\pi (C_x^\dagger |0\rangle \otimes C_y^\dagger |0\rangle) = C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle,$$

por outro lado se $y < x$:

$$\pi (C_x^\dagger |0\rangle \otimes C_y^\dagger |0\rangle) = -C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle.$$

Ao aplicarmos essa definição de π sobre $|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle$, encontramos:

$$\pi (|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle) = \sum_{x < y} (e^{i(k_1 x + k_2 y)} - e^{i(k_1 y + k_2 x)}) C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle,$$

que é a solução de dois corpos de H_0 no espaço real:

$$|k_1, k_2\rangle = C_{k_1}^\dagger C_{k_2}^\dagger |0\rangle.$$

Isto nos mostra como generalizar π para H . Considere então π definido por:

- se $x < y$:

$$\pi (C_x^\dagger |0\rangle \otimes C_y^\dagger |0\rangle) = A_{12}^{(k_1, k_2)} C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle,$$

- se $y < x$:

$$\pi (C_x^\dagger |0\rangle \otimes C_y^\dagger |0\rangle) = A_{21}^{(k_1, k_2)} C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle,$$

- se $x = y$:

$$\pi (C_x^\dagger |0\rangle \otimes C_x^\dagger |0\rangle) = 0.$$

O que nos leva a uma função de onda no espaço real, da forma:

$$\pi (|k_1\rangle \otimes |k_2\rangle) = \sum_{x < y} (A_{12}^{(k_1, k_2)} e^{i(k_1 x + k_2 y)} - A_{21}^{(k_1, k_2)} e^{i(k_1 y + k_2 x)}) C_x^\dagger C_y^\dagger |0\rangle.$$

Se impusermos a comutatividade do diagrama, encontramos as condições sobre $A_{12}^{(k_1, k_2)}$ e $A_{21}^{(k_1, k_2)}$:

$$\frac{A_{21}^{(k_1, k_2)}}{A_{12}^{(k_1, k_2)}} = e^{-i\varphi},$$

$$\varphi(k_1, k_2) = 2 \arctan \left[\frac{\Delta \sin \left(\frac{k_2 - k_1}{2} \right)}{\cos \left(\frac{k_2 + k_1}{2} \right) - \Delta \cos \left(\frac{k_2 - k_1}{2} \right)} \right].$$

Finalmente, impondo as condições de contorno, quantizamos os momentos k :

$$Nk_1 = 2\pi I_1 - \varphi(k_1, k_2),$$

$$Nk_2 = 2\pi I_2 - \varphi(k_2, k_1),$$

onde $\{I_1, I_2\}$ são inteiros para as condições periódicas das cadeias e semi-inteiros para as condições anti-periódicas. Generalizar esse procedimento para um número maior de férmions é imediato. Por exemplo para 3 férmions:

$$\begin{aligned}
\pi (C_x^\dagger|0\rangle \otimes C_y^\dagger|0\rangle \otimes C_z^\dagger|0\rangle) &= A_{123}^{(k_1, k_2, k_3)} C_x^\dagger C_y^\dagger C_z^\dagger|0\rangle, \text{ se } x < y < z; \\
&= A_{312}^{(k_1, k_2, k_3)} C_z^\dagger C_x^\dagger C_y^\dagger|0\rangle, \text{ se } z < x < y; \\
&= A_{231}^{(k_1, k_2, k_3)} C_y^\dagger C_z^\dagger C_x^\dagger|0\rangle, \text{ se } y < z < x; \\
&= A_{213}^{(k_1, k_2, k_3)} C_y^\dagger C_x^\dagger C_z^\dagger|0\rangle, \text{ se } y < x < z; \\
&= A_{321}^{(k_1, k_2, k_3)} C_z^\dagger C_y^\dagger C_x^\dagger|0\rangle, \text{ se } z < y < x; \\
&= A_{132}^{(k_1, k_2, k_3)} C_x^\dagger C_z^\dagger C_y^\dagger|0\rangle, \text{ se } x < z < y, \\
&= 0, \text{ se } x = y \text{ ou } x = z \text{ ou } y = z,
\end{aligned}$$

e a função de onda da forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{x_1 < x_2 < x_3} \left\{ \left[\begin{array}{l} A_{123}^{(k_1, k_2, k_3)} e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3)} + \\ A_{312}^{(k_1, k_2, k_3)} e^{i(k_1 x_3 + k_2 x_1 + k_3 x_2)} + \\ A_{321}^{(k_1, k_2, k_3)} e^{i(k_1 x_3 + k_2 x_2 + k_3 x_1)} + \\ A_{213}^{(k_1, k_2, k_3)} e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1 + k_3 x_3)} + \\ A_{321}^{(k_1, k_2, k_3)} e^{i(k_1 x_3 + k_2 x_2 + k_3 x_1)} + \\ A_{132}^{(k_1, k_2, k_3)} e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_3 + k_3 x_2)} \end{array} \right] \prod_{x_1 < x_2 < x_3} C_{x_i}^\dagger|0\rangle \right\},$$

Ao impormos as condições de contorno e a comutatividade do diagrama, encontramos:

$$\begin{aligned}
Nk_1 &= 2\pi I_1 - \varphi(k_1, k_2) - \varphi(k_1, k_3), \\
Nk_2 &= 2\pi I_2 - \varphi(k_2, k_1) - \varphi(k_2, k_3), \\
Nk_3 &= 2\pi I_3 - \varphi(k_3, k_1) - \varphi(k_3, k_2),
\end{aligned}$$

De maneira geral, para um número arbitrário, m, de férmions:

$$Nk_i = 2\pi I_i - \sum_{i \neq j} \varphi(k_i, k_j),$$

$$|\psi\rangle = \sum_{x_1 < x_2 < \dots < x_m} \sum_P (-1)^P \exp \left[-i \sum \varphi(k_\alpha, k_\beta, \Delta) \right] \exp \left[i \left(\sum_{j=1}^m k_{P_j} x_j \right) \right] \prod_{x_1 < x_2 < \dots < x_m} C_{x_i}^\dagger|0\rangle,$$

onde P significa o grupo de permutações de m elementos e a soma nas φ é sobre as transposições necessárias para levar a permutação P na identidade do grupo ($(-1)^P$ corresponde a paridade de P), e I_i são inteiros para as cadeias de condições periódicas e semi-inteiros para as cadeias de condições anti-periódicas.

O fato dos férmions não terem nenhuma simetria interna simplifica consideravelmente o problema. Na linguagem do espalhamento inverso, as matrizes de espalhamento das pseudo-partículas são apenas fases ($e^{i\varphi}$). Dessa forma não há problema em expressarmos o espalhamento de vários corpos em termos do espalhamento de 2 corpos. No problema geral para que possamos fazer isso, é necessário introduzir a hipótese adicional: que a álgebra das matrizes de espalhamento obedeça as equações de Yang-Baxter (EYB). Em certa medida se pode reverter o argumento e a partir de uma álgebra de matrizes que obedeçam as EYB, podemos construir um modelo integrável à moda de Bethe.

Quando estamos tratando da cadeia de Heisenberg temos duas abordagens para o problema. Na representação de Orbach, trabalhamos de forma direta sobre a cadeias de spins e chegamos as equações:

$$Nk_i = 2\pi J_i + \sum_{j \neq i} \theta(k_i, k_j),$$

$$\theta(k_i, k_j) = 2 \arctan^{-1} \left[\frac{\sin\left(\frac{k_i - k_j}{2}\right)}{\alpha \cos\left(\frac{k_i + k_j}{2}\right) - \cos\left(\frac{k_i - k_j}{2}\right)} \right],$$

onde J_i é um inteiro para a cadeia de condições periódicas e um semi-inteiro para a cadeia com condições anti-periódicas. A função de onda toma a forma:

$$|\psi\rangle = \sum_{x_1 < x_2 < \dots < x_m} \sum_P \exp \left[\frac{i}{2} \sum_{k_\alpha < k_\beta} \theta(k_\alpha, k_\beta, \alpha) \right] \exp \left[i \left(\sum_{j=1}^m k_{P_j} x_j \right) \right] \prod_{x_1 < x_2 < \dots < x_m} S_{x_i}^\dagger |f\rangle.$$

Por outro lado na representação de Yang da hamiltoniana de Heisenberg, uma transformação de Wigner-Jordan nos leva a uma hamiltoniana fermiônica da forma:

$$H_y = 2 \sum_{i=1}^{N-1} \left\{ \left(C_{i+1}^\dagger C_i + C_i^\dagger C_{i+1} \right) + 2\Delta (n_{i+1} n_i) + 2\Delta n_i + \frac{N\Delta}{2} \right\} +$$

$$2 \left(C_1^\dagger C_N e^{i\pi \sum_{j=2}^{N-1} n_j} + C_N^\dagger C_1 e^{-i\pi \sum_{j=2}^{N-1} n_j} + 2\Delta (n_1 n_N) + 2\Delta n_N \right),$$

Assim se estivermos estudando um subespaço com um número par de férmions, seremos levados à uma hamiltoniana fermiônica de condições anti-periódicas. Por outro lado, se for um número ímpar de

férmions, então teremos uma hamiltoniana fermiônica de condições periódicas. Usando os resultados anteriores somos levados as equações do *ansatz*:

$$Nk_i = 2\pi I_i - \sum_{i \neq j} \varphi(k_i, k_j),$$

onde I_i é um inteiro para um número ímpar de férmions, e semi-inteiro para um número par. Para retornarmos aos operadores de spin, devemos simplesmente lembrar que na forma das funções de Bethe está embutida uma “ordem normal” dos operadores fermiônicos e aplicar a transformação de Wigner-Jordan:

$$|\psi\rangle = \sum_{x_1 < x_2 < \dots < x_m} \sum_P (-1)^P \exp \left[-i \sum \varphi(k_\alpha, k_\beta, \Delta) \right] \exp \left[i \left(\sum_{j=1}^m k_{P_j} x_j \right) \right] \prod_{x_1 < x_2 < \dots < x_m} S_{x_i}^\dagger |f\rangle,$$

onde $|f\rangle$ é o estado ferromagnético $|\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\rangle$.

3.1.2 *ansatz* de Bethe Algébrico

O *ansatz* de Bethe algébrico é baseado no método de espalhamento inverso quântico (MEIQ). Ele surgiu como uma tentativa de unificar os sistemas integráveis sobre uma grande estrutura teórica, cujo principal ponto de sustentação são as equações de Yang-Baxter (EYB). Muitos artigos de revisão e livros podem ser encontrados nesse assunto, tais como [23] e [40]. Nesse parágrafo faremos uma apresentação rápida do método para a cadeia de Heisenberg (e o modelo fermiônico associado).

equações de Yang-Baxter

Como vimos a idéia do *ansatz* de Bethe para uma cadeia de férmions sem spin constitui-se de um conjunto de m pseudo-partículas que “*não interagem*”. O espalhamento entre as pseudo-partículas é dado apenas por uma fase ($\varphi(k_i, k_j)$). Este quadro se modifica inteiramente quando adicionamos possíveis simetrias internas as partículas (por exemplo o spin ou de maneira geral uma *cor*). Durante o espalhamento de duas pseudo-partículas a troca de cor passa a ser possível. Na linguagem da teoria de espalhamento, existe uma matriz de espalhamento $S_{\alpha_j \alpha'_j}^{\alpha_i \alpha'_i}(k_i, k_j)$ que troca as cores das pseudo-partículas com momentos k_i e k_j . Na figura 3.2, escrevemos isto de forma diagramática.

Nesse instante devemos nos perguntar se os processos de espalhamento de muitos corpos podem ser fatorados em processos de espalhamento de dois corpos. Se admitirmos isso para nosso sistema, vemos que um processo de espalhamento de 3 corpos pode ser decomposto em duas formas diferentes, veja as figuras 3.3 e 3.4.

$$S_{\alpha_j \alpha'_j}^{\alpha_i \alpha'_i}(k_i, k_j) = \begin{array}{ccc} & \alpha_i & \alpha'_j \\ & \diagdown & \diagup \\ \alpha_j & & \alpha'_i \end{array}$$

Figura 3.2: forma diagramática da matriz de espalhamento.

Por uma questão de consistência da fatoração, devemos impor que os dois processos de espalhamento têm de ser equivalentes. Em forma diagramática isto nos leva as “relações triangulares” (veja [8]).

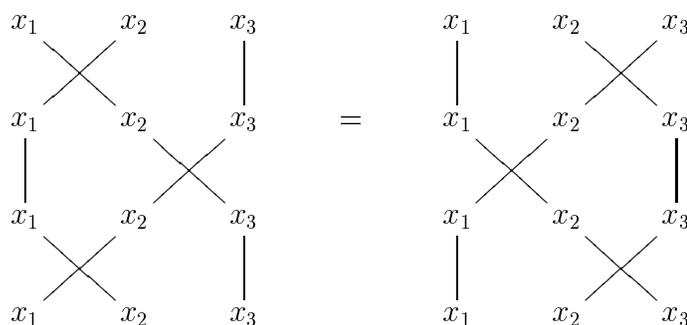


Figura 3.3: equações de Yang-Baxter

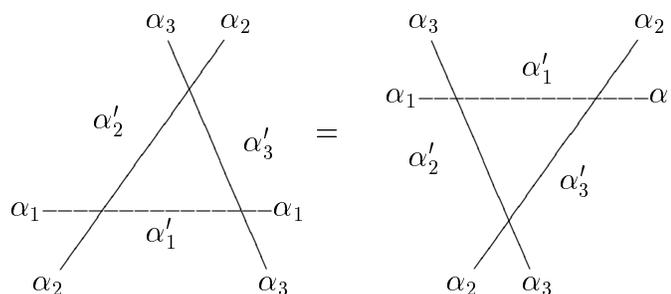


Figura 3.4: relações triangulares

Ou em forma tensorial:

$$\sum_{\alpha'_1 \alpha'_2 \alpha'_3} S_{\alpha_2 \alpha'_2}^{\alpha_1 \alpha'_1}(k_1, k_2) S_{\alpha_3 \alpha'_3}^{\alpha'_1 \alpha''_1}(k_1, k_3) S_{\alpha'_3 \alpha''_3}^{\alpha'_2 \alpha''_2}(k_2, k_3) = \sum_{\alpha'_1 \alpha'_2 \alpha'_3} S_{\alpha_3 \alpha'_3}^{\alpha_2 \alpha'_2}(k_2, k_3) S_{\alpha'_3 \alpha'_3}^{\alpha_1 \alpha'_1}(k_1, k_3) S_{\alpha'_2 \alpha'_2}^{\alpha'_1 \alpha''_1}(k_1, k_2)$$

Esta equação é conhecida como equação de Yang-Baxter. Ela foi inicialmente derivada em dois

contextos diferente: por Yang no estudo do gás de bósons com repulsão δ , e por Baxter nos modelos de vértices. Fica claro aqui o ponto de conexão entre a teoria de modelos integráveis e a teoria de nós. Na teoria de nós não orientados no \mathfrak{R}^3 , existem três tipos de movimentos permitidos, conhecidos como movimentos de Reidemeister. A projeção no \mathfrak{R}^2 do terceiro movimento de Reidemeister é formalmente análoga a equação de Yang-Baxter. Isto permite o uso de invariantes topológicos de nós (como por exemplo o polinômio de Jones) e várias técnicas de cálculo tensorial generalizado[83] no estudo de sistemas fortemente correlacionados.

método do espalhamento inverso quântico

O problema inicial que vemos ao tentar construir o *ansatz* de Bethe algébrico para o modelo de Heisenberg, é que em princípio não existem as matrizes de espalhamento que discutimos no parágrafo anterior. Contudo podemos escrever uma matriz de espalhamento abstrata:

$$\begin{aligned} S_{\alpha\alpha'}^{\gamma\gamma'}(\lambda) &= \sum_j w_j(\lambda) \sigma_{\gamma\gamma'}^j \sigma_{\alpha\alpha'}^j, \\ &= \sum_j w_j(\lambda) \sigma^j \otimes \sigma^j, \end{aligned}$$

onde σ^j são as matrizes de Pauli, σ^0 é a identidade e λ é conhecida como parâmetro espectral. Com essa matriz de espalhamento podemos definir a matriz de transferência local:

$$L_n(\lambda) = \sum_j w_j(\lambda) \sigma^j \otimes \sigma_n^j.$$

Para cada escolha dos parâmetros w_j estaremos trabalhando com um modelo diferente (veja por exemplo [40]). O caso mais simples é a hamiltoniana XXX. Para ela a matriz de transferência local tem a forma:

$$L_n(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda + \frac{i}{2}\sigma_n^z & i\sigma_n^- \\ i\sigma_n^+ & \lambda - \frac{i}{2}\sigma_n^z \end{bmatrix},$$

onde σ_n^+ e σ_n^- são definidas por:

$$\begin{aligned} \sigma_n^+ &= \frac{\sigma_n^x + i\sigma_n^y}{2}, \\ \sigma_n^- &= \frac{\sigma_n^x - i\sigma_n^y}{2}. \end{aligned}$$

Em sua forma local, a equação de Yang-Baxter se escreve como:

$$R(\lambda - \mu)(L_n(\lambda) \otimes L_n(\mu)) = (L_n(\mu) \otimes L_n(\lambda))R(\lambda - \mu),$$

onde a matriz R tem a forma:

$$R(\lambda) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\lambda) & c(\lambda) & 0 \\ 0 & c(\lambda) & b(\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

com $b(\lambda) = \frac{i}{\lambda+i}$ e $c(\lambda) = \frac{\lambda}{\lambda+i}$. Definimos então a matriz de monodromia:

$$\mathcal{T}_N(\lambda) = L_N(\lambda) \dots L_1(\lambda) = \begin{bmatrix} A_N(\lambda) & B_N(\lambda) \\ C_N(\lambda) & D_N(\lambda) \end{bmatrix}.$$

A partir da forma local da equação de Yang-Baxter podemos mostrar que:

$$R(\lambda - \mu)(\mathcal{T}_N(\lambda) \otimes \mathcal{T}_N(\mu)) = (\mathcal{T}_N(\mu) \otimes \mathcal{T}_N(\lambda))R(\lambda - \mu).$$

O que nos leva as relações de comutação:

$$\begin{aligned} A_N(\lambda) B_N(\mu) &= \frac{1}{c(\mu - \lambda)} B_N(\mu) A_N(\lambda) - \frac{b(\mu - \lambda)}{c(\mu - \lambda)} B_N(\lambda) A_N(\mu), \\ D_N(\lambda) B_N(\mu) &= \frac{1}{c(\lambda - \mu)} B_N(\mu) D_N(\lambda) - \frac{b(\lambda - \mu)}{c(\lambda - \mu)} B_N(\lambda) D_N(\mu). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Além disso, identificamos que a matriz de transferência, $T_N(\lambda) = A_N(\lambda) + D_N(\lambda)$, esta relacionada com o hamiltoniana isotrópica de Heisenberg para uma cadeia de N sítios pela equação:

$$H_N = \frac{iJ}{2} \frac{d}{d\lambda} \ln [T_N(\lambda)] \Big|_{\lambda=\frac{i}{2}} - \frac{NJ}{2} I_N, \quad (3.8)$$

A matriz T recebe o nome de matriz de transferência por razões históricas: sua primeira aparição foi no modelo de vértices, onde ela representa a transferência entre colunas da rede quadrada[8]. Por 3.8, o problema de diagonalizar H é equivalente a diagonalizar T , o que pode ser feito através das equações 3.7.

Note que se considerarmos o estado ferromagnético, $|f\rangle = |\uparrow \dots \uparrow\rangle$:

$$\begin{aligned} A_N(\lambda) |f\rangle &= \left(\lambda + \frac{i}{2}\right)^N |f\rangle, \\ D_N(\lambda) |f\rangle &= \left(\lambda - \frac{i}{2}\right)^N |f\rangle, \\ C_N(\lambda) |f\rangle &= 0. \end{aligned}$$

Podemos verificar que um autoestado da forma:

$$|\psi\rangle = |\lambda_1, \dots, \lambda_m\rangle = B_N(\lambda_1) \dots B_N(\lambda_m) |f\rangle, \quad (3.9)$$

será uma autoestado de T , sujeito ao sistema de equações:

$$\left(\frac{\lambda_i - \frac{i}{2}}{\lambda_i + \frac{i}{2}}\right)^N = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^m \frac{\lambda_i - \lambda_j - i}{\lambda_i - \lambda_j + i}. \quad (3.10)$$

Usando a definição de H em termos de T , temos que os autovalores de H são escritos como:

$$h(\lambda_1, \dots, \lambda_m) = -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^m \frac{1}{\lambda_j^2 + \frac{1}{4}}.$$

Da equação 3.9 não é um absurdo definirmos os operadores $B_N(\lambda_i)$ como os operadores de criação de uma onda de spin ou magnon (excitação ferromagnética). O operador de criação de um spinon (excitação anti-ferromagnética) também pode ser escrito em função de $B_N(\lambda_i)$ como veremos mais adiante.

As equações 3.10 podem ser levadas nas equações que obtivemos anteriormente no contexto do *ansatz* de Bethe funcional, basta identificarmos:

$$e^{ik} = \frac{\lambda + \frac{i}{2}}{\lambda - \frac{i}{2}}$$

Para o modelo XXZ, esses resultados se modificam bastante. Inicialmente devemos definir $\Delta = \cos[2\eta]$. Apesar da forma geral da matriz R ser a mesma, suas entradas se modificam para $b(\lambda, \eta) = \frac{\sin[2\eta]}{\sin[\lambda+\eta]}$ e $c(\lambda, \eta) = \frac{\sin[\lambda-\eta]}{\sin[\lambda+\eta]}$. Isto implica que as equações agora são da forma:

$$\left[\frac{\sin(\lambda_i + \eta)}{\sin(\lambda_i - \eta)}\right]^N = \prod_{j=1, j \neq i}^m \frac{\sin(\lambda_i - \lambda_j + 2\eta)}{\sin(\lambda_i - \lambda_j - 2\eta)}.$$

E a expressão da energia é:

$$E = -\frac{N\Delta}{2} + \sum_{j=1}^m \left[2\Delta - \frac{\sin(\lambda_j - \eta)}{\sin(\lambda_j + \eta)} - \frac{\sin(\lambda_j + \eta)}{\sin(\lambda_j - \eta)} \right],$$

$$e^{ik} = \frac{\sin(\lambda + \eta)}{\sin(\lambda - \eta)}.$$

3.1.3 soluções das equações do *ansatz*

Resolver as equações do *ansatz* geralmente não é uma tarefa fácil. Para cadeias finitas, somos inevitavelmente levados a soluções numéricas. Para o limite termodinâmico podemos estudar algumas propriedades das soluções de forma analítica. O *ansatz* de Bethe termodinâmico é por si só uma grande área de estudos e um bom artigos de revisão nessa área é de [71]. Para podermos definir as excitações elementares da cadeia anti-ferromagnética (spinon) vamos apresentar alguns resultados que podem ser obtidos no limite termodinâmico. Finalmente, apresentaremos soluções numéricas para cadeias finitas e discutiremos os problemas que encontramos.

ansatz de Bethe no limite termodinâmico

cadeia ferromagnética Nesse caso o estado fundamental é trivial:

$$|f\rangle = |\uparrow \dots \uparrow\rangle, \text{ ou na representação fermionica } |0\rangle$$

$$S_{total}^z |f\rangle = \frac{N}{2} |f\rangle$$

As primeiras excitações ocorrem quando $S_{total}^z |\psi\rangle = \left(\frac{N}{2} - 1\right) |\psi\rangle$. Estas são conhecidas como magnons, ou ondas de spin. A equação do *ansatz* para este caso tem a forma:

$$k = \frac{2\pi}{N} I,$$

assim no limite termodinâmico, $k \in]-\pi, \pi]$ ou $]0, 2\pi]$, dependendo das condições de contorno. No caso da representação de Orbach, a energia se escreve:

$$E = E_0 + 2(1 - \alpha \cos[k]).$$

Do ponto de vista do *ansatz* algébrico, o operador $B_N(\lambda)$ é o operador de criação dessas excitações da cadeia ferromagnética, já que ele cria esse estado a partir do vácuo (ou seja, o estado ferromagnético).

$$|\psi\rangle = B_N(\lambda) |f\rangle,$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} |\psi\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} B_N(\lambda) |f\rangle.$$

O passo seguinte é estudarmos as excitações de *dois corpos*, isto é: $S_{total}^z |\psi\rangle = (\frac{N}{2} - 2) |\psi\rangle$ (seguiremos as referências [60] e [40]). Escrevendo as equações do anstaz, temos na representação de Orbach:

$$\begin{cases} k_1 = \frac{\theta(k_1, k_2, \alpha)}{N} + \frac{2\pi}{N} I_1 \\ k_2 = -\frac{\theta(k_1, k_2, \alpha)}{N} + \frac{2\pi}{N} I_2 \end{cases}$$

Se em um primeiro momento só admitirmos soluções reais para $\{k_1, k_2\}$, $\theta(k_1, k_2, \alpha)$ é limitada a valores entre $-\pi$ e π . Logo:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \begin{cases} k_1 = \frac{2\pi}{N} I_1 \\ k_2 = \frac{2\pi}{N} I_2 \end{cases}$$

E a equação da energia será:

$$E = E_0 + 2(1 - \alpha \cos [k_1]) + 2(1 - \alpha \cos [k_2]),$$

correspondendo dessa forma a soluções de magnons livres (pela aditividade da energia). Isto nos leva a seguinte definição:

Um estado pertence a classe de estados do tipo onda de spin (SWC), se e só se todos os seus pseudomomentos forem reais.

As soluções de Bethe complexas tem características muito diferentes:

$$\begin{cases} N(k_1 + k_2) = 2\pi(I_1 + I_2) \\ N(k_1 - k_2) = 2\theta(k_1, k_2, \alpha) + 2\pi(I_1 - I_2) \end{cases}$$

Devemos impor contudo que $k_2 = k_1^*$ de forma que o momento total seja real. Assim se considerarmos que $I_1 = I_2 = I$:

$$k_1 = x + iy$$

$$\theta(k_1, k_2, \alpha) = \rho(k_1, k_2, \alpha) + i\psi(k_1, k_2, \alpha), \rho \text{ e } \psi \text{ funcoes reais}$$

$$\begin{cases} x = \frac{2\pi}{N}I \\ iNy = \rho(k_1, k_2, \alpha) + i\psi(k_1, k_2, \alpha) \end{cases}$$

Logo $\rho = 0$, e substituindo a definição de ψ , encontramos a equação:

$$\frac{i \sinh y}{\beta - \cosh y} = -i \frac{1 + e^{-Ny}}{1 - e^{-Ny}},$$

onde $\beta = \alpha \cos x$. Se tomarmos agora o limite de $N \rightarrow \infty$, podemos dizer que, com precisão exponencial, temos:

$$e^{-y} = \alpha \cos x.$$

O que nos permite escrever a energia desse autoestado como:

$$E = E_0 + 2(1 - \alpha^2 \cos^2 x).$$

Esse solução é conhecido como estado ligado de 2 magnons, e tem energia menor que a energia do estado livre. Por abuso de linguagem, esses estados são chamados de localizados, porque ao escrevermos as amplitudes de Bethe:

$$a(n_1, n_2) = e^{ix(n_1+n_2)} e^{-y(n_2-n_1)},$$

mostramos que os spins ou férmions tendem a se aproximar. Fisicamente estes estados correspondem a formação de regiões ferromagnéticas no caso da cadeia de Heisenberg e a formação de pares eletrônicos ligados que *andam* juntos sobre a cadeia fermiônica⁴.

O caso geral de estados $S_{total}^z |\psi\rangle = (\frac{N}{2} - m) |\psi\rangle$, foi estudado por vários autores. Em [33], Griffiths mostrou para o caso isotrópico na representação de Orbach, se o conjunto de inteiros que entram nas equações de Bethe for tal que:

$$I_{j+1} \geq I_j + 2,$$

então todos os pseudomomentos são reais e o estado é do tipo SWC. Para a cadeia anisotrópica não existe um resultado analítico, mas todos os casos de sistemas finitos indicam que isto também é verdade nessa situação.

Para o caso geral de estados ligados é conveniente passarmos para as equações em termos do parâmetro espectral. No artigo [23] e no livro [40], é demonstrado que para a cadeia isotrópica, com precisão exponencial, as soluções tendem a ter a forma de *strings*:

⁴que tem a energia mais baixa que a dos estados livres porque estamos trabalhando com um potencial atrativo.

$$\lambda_{x,\mu} = x + i\mu, \mu = -M, -M + 1, \dots, M - 1, M \text{ M inteiro ou semi - inteiro}$$

Esta é conhecida como hipótese de *strings*, já que apenas um argumento de contagem⁵ diz que, no limite termodinâmico, elas, juntamente com os estados livres, formam uma base do espaço de dimensão 2^N . Contudo, uma análise mais refinada das equações mostra que essa hipótese tem validade limitada ([76]), podendo-se demonstrar que para N finito a solução $\mu = \frac{1}{2}$, só é válida se:

$$|x| \ll \sqrt{N}. \quad (3.11)$$

Isto tem importância fundamental para o espectro do caso antiferromagnético, já que uma das excitações elementares do problema se enquadra nessa condição.

cadeia antiferromagnética As excitações da cadeia antiferromagnética são consideravelmente mais complicadas que as da cadeia ferromagnética. Por isso faremos uma exposição breve, onde citaremos os resultados físicos mais relevantes. Para uma análise maior desses resultados, sugerimos [23].

O primeiro passo para estudarmos o espectro antiferromagnético (ou interação repulsiva entre os férmions) é determinarmos o estado fundamental do sistema. Desde os primeiros trabalhos de Bethe e Húltén, sabe-se que o estado fundamental antiferro- corresponde a um conjunto de $\frac{N}{2}$ momentos de Bethe reais (logo do tipo SWC) distribuídos simetricamente em torno de 0 (ou π dependendo das condições de contorno) com $S_{total}^z = 0$. Em seus trabalhos, Yang-Yang demonstraram que este estado é um singlete. Na representação de Orbach da cadeia de Heisenberg, devemos escolher os inteiros:

$$\{I_j\} = \{1, 3, 5, \dots, N - 1\},$$

já na representação de Yang:

$$\{I_j\} = \{-I_{max}, -I_{max} + 1, \dots, I_{max} - 1, I_{max}\}, I_{max} = \frac{N - 1}{2}.$$

Pode-se considerar dois conjuntos de excitações elementares. O primeiro chamaremos de tipo triplete (em analogia ao caso isotrópico), correspondendo a um estado com $S_{total}^z = 1$. O segundo chamaremos de tipo singlete, corresponde a um estado com $S_{total}^z = 0$. Os estados tipo singlete correspondem a soluções tipo *string* das equações do *ansatz* com $\mu = \frac{1}{2}$ ⁶, enquanto que os do tipo triplete correspondem a soluções do tipo SWC⁷. Em [23] e em [24] discute-se amplamente que ambos os tipos

⁵Veja por exemplo: [42], [43] e [23]. De maneira explícita, nos artigos de Kirillov, o autor enfatiza que o cálculo do número de vetores de Bethe se baseia na conjectura não provada que para cada coleção de inteiros (ou semi-inteiros), existe um único vetor de Bethe.

⁶pelo menos 2 pseudo-momentos complexos conjugados - no caso isotrópico $\lambda = \pm \frac{i}{2}$.

⁷todos os pseudo-momentos reais.

de excitações correspondem às soluções a dois parâmetros. Isto levou Faddeev e Takhtadzhyan a dizer que as excitações elementares da cadeia antiferromagnética isotrópica, correspondem a dois estados elementares que não existem individualmente. Com isso uma onda de spin antiferromagnética de spin 1 (no caso do tripleto) seria, na realidade, a composição de duas ondas de spin de spin $\frac{1}{2}$, que não podem existir separadamente. Cada uma dessas ondas de spin $\frac{1}{2}$ é chamada spinon. Isto pode ser visto claramente no limite termodinâmico:

$$\begin{aligned} |g\rangle &= \prod_j B_N(\lambda_j) |f\rangle, \text{ e o estado fundamental da cadeia antiferro-}, \\ |\psi\rangle &= \prod_j B_N(\mu_j) |f\rangle, \text{ e um estado do tripleto} \end{aligned}$$

então:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \prod_j B_N(\mu_j) \prod_j B_N^{-1}(\lambda_j) |g\rangle \\ &= \exp \left[N \int_{-\infty}^{\infty} \ln [B_N(\lambda) \rho_t(\lambda) d\lambda] \right] \exp \left[-N \int_{-\infty}^{\infty} \ln [B_N(\lambda) \rho(\lambda) d\lambda] \right] |g\rangle \end{aligned}$$

onde ρ_t e ρ são as densidades de soluções μ_j e λ_j , no limite termodinâmico. Usando que os operadores B_N comutam:

$$|\psi\rangle = \exp \left[N \int_{-\infty}^{\infty} \ln [B_N(\lambda) (\rho_t(\lambda) - \rho(\lambda)) d\lambda] \right] |g\rangle.$$

Finalmente pode-se mostrar que:

$$\rho_t(\lambda) - \rho(\lambda) = \frac{1}{N} (\sigma(\lambda - \lambda_1) + \sigma(\lambda - \lambda_2)),$$

tal que λ_1 e λ_2 parametrizam o estado tripleto e $\sigma(\lambda)$ satisfaz a equação integral de Cloizeaux-Pearson:

$$\pi \sigma(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{\sigma}(\xi) e^{-i\lambda\xi} d\xi, \quad \hat{\sigma}(\xi) = -\frac{1}{1 + e^{-|\xi|}}.$$

Dessa forma podemos definir os operadores de criação de spinons como:

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \exp \left[\int_{-\infty}^{\infty} \ln [B_N(\lambda) (\sigma(\lambda - \lambda_1) + \sigma(\lambda - \lambda_2))] d\lambda \right] |g\rangle \\
&= \exp \left[\int_{-\infty}^{\infty} \ln [B_N(\lambda) \sigma(\lambda - \lambda_1)] d\lambda \right] \exp \left[\int_{-\infty}^{\infty} \ln [B_N(\lambda) \sigma(\lambda - \lambda_2)] d\lambda \right] |g\rangle \\
&= B_{\text{kin}}(\lambda_1) B_{\text{kin}}(\lambda_2) |g\rangle.
\end{aligned}$$

As integrais que definem $B_{\text{kin}}(\lambda)$ são divergentes, sendo apenas o seu produto bem definido (dessa forma levando a interpretação de que elas não podem existir individualmente, mas apenas aos pares). Argumentos similares podem nos levar a um resultado análogo para as excitações tipo singleto. Contudo não se consegue fatorar o operador em duas excitações elementares (o que é razoável, já que se trata de um estado ligado). Existem evidências experimentais que esse quadro de excitações elementares de spinon pode ser encontrado em diversas temperaturas⁸.

Devemos levantar alguns problemas a derivação de B_{kin} . Em primeiro lugar, ela foi feita exclusivamente para a cadeia isotrópica, mostrando que, de uma maneira geral se conhece pouco das excitações elementares da cadeia anisotrópica. Em segundo lugar, os operadores $B_N(\lambda)$ são operadores nilpotentes. Dessa forma, seu logaritmo não está bem definido. Finalmente, devido à condição (3.11), o estado singleto só pode ser definido de maneira geral no limite termodinâmico, o que traz problemas na definição do $\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_j B(\lambda_j)$.

Um resultado operacional muito importante do limite termodinâmico que ainda não foi mencionado é a divergência entre as energias do estado fundamental ferromagnético e do estado fundamental anti-ferromagnético. Se chamamos de \mathcal{H}_∞ o espaço de estados da cadeia, pode-se definir um sub-espaço, \mathcal{H}_{af} , que corresponde a todos os estados com uma diferença de energia finita em relação ao estado fundamental antiferromagnético. Por essa definição, este sub-espaço corresponde aos estados físicos da cadeia antiferromagnética.

$$\begin{aligned}
\lim_{N \rightarrow \infty} (E_\lambda^N - E_g^N) &= \alpha, \text{ com } \alpha \text{ finito} & (3.12) \\
&\Downarrow \\
\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_\lambda^N}{N} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_g^N}{N}
\end{aligned}$$

Em [24] e [23], os autores associam esses subespaço com uma classe de estados do *ansatz*, \mathcal{M}_{af} . Pertencem a esse sub-espaço, um *mar* de soluções do *ansatz* tipo *strings* de comprimento 0 e 1 e um número finito de soluções de *string* maiores. Em outras palavras, estão incluídos um contínuo de soluções

⁸Pode-se ver em [18] que no material quase unidimensional Cu-F-Cu esse quadro é adequado para temperaturas entre 40K e 250K.

do tipo tripleto e singleto, discutidos acima, e um número finito de outros tipos. A imagem fisicamente desse quadro é muito simples: soluções tipo *string* correspondem a formação de regiões ferromagnéticas na cadeia. A formação de um domínio com comprimento macroscópico corresponderia a uma excitação com energia infinita. Por isso devemos considerar apenas domínios com comprimentos microscópicos na cadeia termodinâmica.

O número de estados com essas características é da ordem de N^2 , enquanto o número total de estados é 2^N .

soluções numéricas

Estados do tipo SWC podem ser facilmente encontrados com uma variação do método de Newton para resolver sistemas não-lineares acoplados.

O verdadeiro problema resume-se a encontrar as soluções com momentos complexos. Em princípio, uma nova variante do método de Newton capaz de tratar com variáveis complexas seria a ação lógica. Contudo soluções tipo *string* não podem ser alcançadas dessa forma, (em geral, algumas das equações ficam singulares). É necessário impor a forma de *string* a um determinado número de pseudomomentos, simplificar as equações e então procurar pelos pseudomomentos restantes. Isto nos leva a um trabalho quase que artesanal. Outro fator delicado é que, sobre o plano complexo, a sensibilidade a solução *tentativa* inicial dos pseudomomentos é altíssima. Isto torna as soluções complexas que não são da forma de *strings* muito difíceis de serem encontradas.

Finalizando a lista de problemas, a condição (3.11) nos diz que soluções do tipo *string* podem não ser válidas para cadeias finitas. Porém, para toda cadeia finita os pseudomomentos:

$$k = \pm i\infty,$$

são soluções da equação de Bethe. Contudo ao tentarmos construir os autoestados, o produto dos operadores $B_N\left(\frac{i}{2}\right) B_N\left(-\frac{i}{2}\right)$ é o operador nulo:

$$B_N\left(\frac{i}{2}\right) B_N\left(-\frac{i}{2}\right) = 0.$$

Isto faz com que um importante conjunto de autoestados do hamiltoniano antiferromagnético não possa ser construído. Resultados bem explícitos da incompleta das soluções de Bethe podem ser encontrados em [66].

Na cadeia termodinâmica, esse quadro se modifica. O operador B tem suas entradas proporcionais a 2^N . Logo, quando $N \rightarrow \infty$, ficamos com uma indeterminação do tipo $0 \times \infty$, sendo de crença geral que essa indeterminação é bem definida. Dessa forma, o *ansatz* seria completo nessa situação.

Pictóricamente, podemos entender isso da seguinte forma: para toda cadeia finita a ação dos opera-

dores $B(\pm \frac{i}{2})$ gera um par de spins que *andam* juntos na cadeia:

$$|\sim\uparrow\uparrow\sim\rangle$$

No resto da cadeia, *andam* soluções de um corpo tipo onda de spin:

$$|\sim\uparrow\sim\rangle$$

Quando uma onda de spin encontra um par ligado, ela obrigatoriamente tem de ser refletida, já que o hopping é de primeiros vizinhos. Nesse sentido teríamos para as ondas de spin uma hamiltoniana efetiva com condições de contorno aberta. No limite termodinâmico, isto passa a ser irrelevante, já que os efeitos do par estariam no contorno.

3.1.4 *ansatz* de Bethe termodinâmico

A hipótese de *strings* é fundamental para o cálculo de propriedades termodinâmicas via *ansatz* de Bethe. Por exemplo, nos trabalhos de Takahashi e Suzuki [69, 70] encontramos o cálculo do calor específico a baixas temperaturas supondo essa forma de solução e fazendo algumas considerações sobre a paridade e ordem dos estados.

Existe um método independente hipótese de *strings* para o cálculo do calor específico. O Thermal Bethe Ansatz (TBA - [45]) ou Quantum Transfer Matrix (QTA - [53]), utiliza as simetrias da matriz de transferência do modelo de 6-vértices para calcular a função de partição da cadeia de Heisenberg.

modelo de 6-Vértices

A história dos modelos de vértices é bem antiga. Eles surgiram dentro da física estatística clássica para modelar o cálculo da entropia configuracional de cristais em 2 dimensões. Apenas nas décadas de 50~60 que se constatou suas ligações com modelos quânticos de 1 dimensão[8].

Os modelos consistem em numa rede quadrada, onde representamos a interação entre átomos vizinhos através de pequenos dipolos elétricos:

$$\begin{array}{ccc} & \downarrow & \\ \leftarrow & & \rightarrow \\ & \uparrow & \end{array} .$$

A cada configuração de um vértice se atribui um peso de Boltzmann e assim se define a função de partição do problema. Como estamos em um problema estatístico clássico, podemos escrever a função de partição do sistema a partir da matriz de transferência de linha (ou de colunas):

$$Z = [T_N(\lambda, \eta)]^M,$$

em uma rede quadrada de de M-linhas e N-colunas.

No modelo de 6-vértices se obedece a chamada regra de gelo (*ice rule*). Em cada vértice existem sempre duas setas entrando e duas setas saindo (possibilitando assim 6 configurações).

pesos de Boltzmann	configurações de vértices	
$\frac{\sin(\eta-\lambda)}{\sin\eta}$	$V_{11} = \begin{array}{ccc} & \uparrow & \\ \rightarrow & & \rightarrow \\ & \uparrow & \end{array}$	$V_{21} = \begin{array}{ccc} & \downarrow & \\ \leftarrow & & \leftarrow \\ & \downarrow & \end{array}$
$\frac{\sin\lambda}{\sin\eta}$	$V_{12} = \begin{array}{ccc} & \uparrow & \\ \leftarrow & & \leftarrow \\ & \uparrow & \end{array}$	$V_{22} = \begin{array}{ccc} & \downarrow & \\ \rightarrow & & \rightarrow \\ & \downarrow & \end{array}$
1	$V_{13} = \begin{array}{ccc} & \downarrow & \\ \leftarrow & & \rightarrow \\ & \uparrow & \end{array}$	$V_{23} = \begin{array}{ccc} & \uparrow & \\ \rightarrow & & \leftarrow \\ & \downarrow & \end{array}$

Tabela 3.2: configurações permitidas no modelo de 6-vértices

Existe uma simetria evidente neste diagramas. Uma rotação de 90° graus leva os vértices V_{11} em V_{22} , V_{21} em V_{12} , e V_{13} em V_{31} . Essa simetria é conhecida como simetria de cruzamento (*crossing symmetry*) e nos permite relacionar a matriz de transferência de colunas com a matriz de transferência de linhas através de uma renormalização dos pesos de Boltzmann.

Como dissemos no parágrafo 3.1.2⁹, esse modelo se relaciona com o modelo de Heisenberg através da derivada logarítmica da matriz de transferência:

$$H_N(\eta) = \left. \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln T_N(\lambda, \eta) \right|_{\lambda=0}, \quad (3.13)$$

onde η é uma função da anisotropia do modelo de Heisenberg.

thermal Bethe ansatz

Considere a expansão em primeira ordem da matriz de transferência:

$$T_N(\lambda, \eta) = T_N(0, \eta) + \left. \frac{\partial}{\partial \lambda} T_N(\lambda, \eta) \right|_{\lambda=0} \lambda \quad (3.14)$$

Usando agora 3.13 em conjunto com 3.14, vemos que em primeira ordem:

$$1 - \lambda H_N(\eta) = T_N^{-1}(0, \eta) T_N(\lambda, \eta).$$

⁹página 104.

A função de partição da hamiltoniana de Heisenberg é simplesmente:

$$Z_N(\eta) = \text{tr} e^{-\beta c H_N(\eta)},$$

onde definimos por conveniência $c = 2(1 - \Delta^2)$. Aplicamos agora a definição da exponencial:

$$Z_N(\eta) = \text{tr} \lim_{M \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\beta c H_N(\eta)}{M} \right)^M.$$

Até esse ponto λ é arbitrário. Em particular, podemos considerar $\lambda = \frac{\beta c}{M}$, o que nos permite escrever a função de partição:

$$Z_N(\eta) = \text{tr} \lim_{M \rightarrow \infty} \left[T_N^{-1}(0) T_N \left(\frac{\beta c}{M} \right) \right]^M.$$

Se assumirmos que o traço comuta com o limite (existem argumentos a esse favor - veja [45]), encontramos que:

$$Z_N(\eta) = \lim_{M \rightarrow \infty} \text{tr} \left[T_N^{-1}(0) T_N \left(\frac{\beta c}{M} \right) \right]^M.$$

No limite em que $\frac{\beta c}{M} \rightarrow 0$, os autovalores de $T_N^{-1}(0) T_N \left(\frac{\beta c}{M} \right)$ são altamente degenerados. Contudo, no limite termodinâmico, podemos usar a simetria cruzada da matriz de transferência para escrever a função de partição em função da matriz de transferência de colunas e assim tentar levantar essa degenerescência.

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{M \rightarrow \infty} \text{tr} \left[T_N^{-1}(0) T_N \left(\frac{\beta c}{M} \right) \right]^M$$

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{M \rightarrow \infty} \text{tr} \left[T_M^{-1}(0) T_M \left(\frac{\beta c}{M} \right) \right]^N$$

Supondo agora que os dois limites comutam:

$$Z = \lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr} \left[T_M^{-1}(0) T_M \left(\frac{\beta c}{M} \right) \right]^N.$$

A nova matriz $T_M^{-1}(0) T_M \left(\frac{\beta c}{M} \right)$ apresenta um *gap* entre seu maior autovalor e o contínuo dos outros estados. Com isso, em primeira ordem, a função de partição (e consequentemente a energia livre) dependem apenas desse maior autovalor de $T_M^{-1}(0) T_M \left(\frac{\beta c}{M} \right)$, Λ_M^N . O problema passa a ser então o de calcular Λ_M^N . Isso pode ser feito usando-se o *ansatz* de Bethe na matriz de transferência de colunas. Finalmente, devemos fazer um estudo de escala de Λ para determinarmos a função de partição e a energia livre no limite termodinâmico.

Os resultados obtidos com o TBA coincidem com os resultados anteriormente obtidos com a hipótese de *strings*[45, 53]. Servindo de “prova” indireta da validade da hipótese.

3.2 grupo de renormalização da matriz de densidade

Renormalização no espaço real[82], foi uma técnica desenvolvida durante os anos 60 e 70 para calcular hamiltonianas efetivas que considerassem apenas os graus de liberdade relevantes no modelo. Formalmente, consideramos o espaço de Hilbert das Hamiltonianas H . Definimos sobre ela a aplicação:

$$\Phi(H_N) = H_{N+1},$$

onde N é o numero de sítios da cadeia (ou de maneira mais geral graus de liberdade). Assim o ponto de acumulação (ou limite) da seqüência seria a cadeia termodinâmica. A idéia por trás da renormalização no espaço real é encontrar uma maneira de “truncar” o tamanho do espaço de Hilbert de forma a preservar a física do problema em cada passo. Com isso teríamos uma hamiltoniana efetiva de mesma dimensão das anterior, o que possibilitaria encontrar resultados qualitativos para sistemas muito grandes a partir da diagonalização de uma matriz de baixa dimensão.

Renormalização no espaço real foi usada com sucesso na solução do problema de Kondo[81]. Contudo, poucos resultados relevantes foram encontrados em outros sistemas. Quando aplicada a modelos quânticos na rede, em geral o método falha por não conseguir administrar corretamente as condições de contorno.

Sua construção é muito simples. Considere dois sistema de dimensões N e N . Gostaríamos de representar o sistema de dimensão N^2 como um produto tensorial dos dois primeiros.

$$H_B \longleftrightarrow H_{AA} = H_A \otimes H_A \quad (3.15)$$

Supomos então que exista um aplicação O , tal que:

$$H_B = O.H_{AA}.O^\dagger.$$

A escolha de O determina o tipo de truncamento que iremos efetuar no espaço de Hilbert. Assim se vamos estudar apenas os estado de baixa energia de H_B , seria natural construir O a partir dos estados de mais baixa energia de H_{AA} , digamos m estados. Como H_{AA} é um produto tensorial, precisamos obter apenas os m estados de baixa energia de H_A (de dimensão N). Assim O seria a matriz $m \times N^2$, composta pelo produto tensorial dos m estados de mais baixa energia de H_A .

Apesar de muito elegante e simples, o método de renormalização no espaço real falha porque a escolha dos auto-estado de H_A para construir O não leva em conta efeitos de borda ou de tamanho.

Para corrigir esse problema White[79] propôs na década de 90 o método de renormalização da matriz de densidade.

3.2.1 método da matriz de densidade

DMRG é a generalização moderna da renormalização no espaço real. A técnica foi aplicada com sucesso em vários casos na literatura:

1. autovalores de energia para redes finitas ou no limite termodinâmico[79],
2. funções de correlação a temperatura nula[34],
3. sistemas não integráveis, como a cadeia dimerizada[17].

Na cadeia de Heisenberg, por exemplo, é possível chegar a uma cadeia efetiva de 70 spins e obter excelentes resultados para o valor da energia do estado fundamental.

Exatamente como na renormalização em espaço real, apesar de aumentarmos o tamanho do sistema, nós limitamos a dimensão do espaço de Hilbert associado.

Retornando a expressão 3.15, supomos que temos conhecimento do auto-estado $|\psi\rangle$ de H_B . Dados os auto-estados de H_A , $|i\rangle$, gostaríamos de descobrir qual a combinação linear desses estados para a construção de $|\psi\rangle$. Note que este problema é exatamente análogo da decomposição de Schimit de dois átomos em “emaranhamento quântico” (*entangle*) em óptica quântica. Infelizmente a decomposição de Schimit não pode ser estendida para um problema de muitos corpos.

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle$$

A matriz de densidade reduzida[26] é definida como :

$$\rho = \sum_{i,i'} \sum_j \psi_{ij} \psi_{ji}^* |i\rangle \langle i'|$$

Consideramos agora que exista um conjunto de $m \ll N$ *kets*, $\{|u\rangle\}$ no espaço de Hilbert H_A , tais que sua combinação linear minimizam o erro na representação de $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle \approx \sum_{u,j} a_{uj} |u\rangle \otimes |j\rangle$$

Definindo o funcional erro:

$$L = \left| |\psi\rangle - \sum_{u,j} a_{uj} |u\rangle \otimes |j\rangle \right|,$$

aplicando o princípio variacional, $\delta L = 0$, e impondo que $\langle u|u' \rangle = \delta_{u,u'}$ encontramos que $\{|u\rangle\}$ são os m autovetores de ρ com maior autovalor. O DMRG consiste então em usar esse conjunto para definir as transformações O , ao invés dos auto-estados de menor energia.

Em [50], os autores compararam resultados exatos do modelo de Ising com campo transversal com os obtidos através de DMRG. Em resumo, eles encontraram que “o DMRG fornece valores extremamente precisos para a energia do estado fundamental [50, 79]. Contudo resultados para funções de correlação parecem ser sempre piores que para a energia. Aparentemente o método funciona muito bem com condições de contorno abertas, em sistemas com condições periódicas os erros são definitivamente mais fortes. Os resultados parecem ser mais acurados quando longe da criticalidade. E finalmente, a conservação de momento não pode ser diretamente construída no método”.

3.2.2 entendendo DMRG pela solução de Bethe

Como vimos no parágrafo anterior, os estados escolhidos pelo método de DMRG minimizam o erro na decomposição tensorial de dois espaços de Hilbert. Gostaríamos de entender esse resultado a partir das soluções do *ansatz* de Bethe, ou seja, será que existem classes de auto-estado mais relevantes para a renormalização do sistema. Para tanto retornamos a cadeia isotrópica de Heisenberg com N sítios. Dividimos o espaço de Hilbert H_C , de dimensão 2^N , no produto tensorial do espaço do $N-2$ primeiros sítios com o espaço dos dois últimos:

$$H_C = H_1 \otimes H_2, \dim H_1 = 2^{N-2} \text{ e } \dim H_2 = 4$$

Da definição da matriz de monodromia (primeiro relatório página 17), vemos que podemos escrever o operador de “criação de magnons”, $B(\lambda)$, como um produto de operadores nos espaços H_1 e H_2 :

$$B_N(\lambda) = A_2(\lambda)B_{N-2}(\lambda) + B_2(\lambda)D_{N-2}(\lambda).$$

O *ansatz* de Bethe algébrico nos diz que para uma cadeia com $N-2$ sítios e condições de contorno periódicas (assim habitando o espaço H_1), temos os auto-estados:

$$|\gamma_i\rangle = \prod_k B_{N-2}(\gamma_i^k) |f_{N-2}\rangle,$$

onde $|f_{N-2}\rangle$ é o estado ferromagnético (todos os spins up) da cadeia com $N-2$ sítios. Por outro lado, os auto-estados de uma cadeia com 2 sítios e condições de contorno periódicas (existindo em H_2) são:

$$\begin{aligned} |f_2\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle & |s\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \\ | -f_2\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle & |g\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \end{aligned} \tag{3.16}$$

Assim, se considerarmos o auto-estado da Hamiltoniana de N sítios:

$$|\psi\rangle = \prod_l B_N(\lambda_l) |f_N\rangle,$$

onde $|f_N\rangle$ é o estado ferromagnético da cadeia de N sítios, a projeção $\langle\psi|(|\gamma_i\rangle \otimes |f_2\rangle)$ é:

$$\langle\psi|(|\gamma_i\rangle \otimes |f_2\rangle) = \prod_l \left(\lambda - \frac{i}{2}\right)^2 \langle f_{N-2} | C_{N-2}^\lambda |\gamma_i\rangle. \quad (3.17)$$

Se ψ pertencer a $S_{total}^z = 0$, então $|\gamma_i\rangle$ deve pertencer a $S_{total}^z = -1$. Pelo mesmo argumento, para o caso $|-f_2\rangle$, $|\gamma_i\rangle$ pertence a $S_{total}^z = 1$. Finalmente, para $|g\rangle$ e $|s\rangle$, $|\gamma_i\rangle$ pertence a $S_{total}^z = 0$.

Dentro desse quadro se considerarmos ψ como o estado fundamental da cadeia de N sítios, e se interpretarmos B como o operador de criação de ondas de spin, podemos entender a equação 3.17 e o parágrafo anterior como a tabela 3.21.

H^N	\equiv	H^{N-2}	\otimes	H^2
$\frac{N}{2}$ ondas de spin	=	$\frac{N}{2} - 1$ ondas de spin	+	1 onda de spin
	=	$\frac{N}{2} - 2$ ondas de spin	+	2 ondas de spin
	=	$\frac{N}{2}$ ondas de spin	+	0

Tabela 3.3: renormalização no espaço real para a cadeia de Heisenberg.

Exemplo: $H^6 = H^4 \otimes H^2$ - representação do estado fundamental

Nosso objetivo é encontrar a melhor representação do estado fundamental da cadeia de 6 sítios como um produto tensorial dos auto-estados da cadeia de 4 sítios com os auto-estados da cadeia de 2 sítios.

Na cadeia de 4 sítios, os auto-estados relevantes para nosso exemplo são:

$|g\rangle$ estado fundamental

$|b\rangle$ estado 'ligado'

$|sw1, S^z\rangle$ onda de spin de mais baixa energia

$|sw2, S^z\rangle$ segunda excitação tipo onda de spin

$|sw2, S^z\rangle$ terceira excitação tipo onda de spin

$|b\rangle$ é mais energético que $|sw1, S^z\rangle$, porém tem energia menor que $|sw2, S^z\rangle$. Pela receita do DMRG, devemos calcular a matriz de densidade reduzida da cadeia de 4 sítios e encontrar seus auto-estados, $|\Lambda_i\rangle$, com os maiores autovalores.

$$|\Lambda_1\rangle \approx 0,6 |g\rangle + 0,2 |b\rangle + (0,4 + 0,3i) |sw1, 1\rangle + 0,2i |sw2, 1\rangle - 0,5 |sw3, 1\rangle \quad (3.18)$$

$$|\Lambda_2\rangle \approx 0,9 |sw1, -1\rangle - 0,23 [(1+i) |sw2, -1\rangle + (1-i) |sw3, -1\rangle] \quad (3.19)$$

$$|\Lambda_3\rangle \approx 0,9 |sw1, 0\rangle - 0,33i (|sw2, 0\rangle - |sw3, 0\rangle) \quad (3.20)$$

$$|\Lambda_4\rangle \approx (0,5 + 0,32i) |g\rangle + (-0,2 + 0,1i) |b\rangle + 0,7 |sw1, 1\rangle - 0,2(1+i) |sw2, 1\rangle \quad (3.21)$$

Ou seja os termos dominantes são:

$$|\Lambda_1\rangle \approx |g\rangle \quad |\Lambda_2\rangle \approx |sw1, -1\rangle$$

$$|\Lambda_3\rangle \approx |sw1, 1\rangle \quad |\Lambda_4\rangle \approx |sw1, 0\rangle$$

Esses correspondem aos estados de mais baixa energia, o que está de acordo com a idéia original de renormalização no espaço real.

O ponto relevante em 3.18-3.21 é o papel menor desempenhado por $|b\rangle$, apesar de ter menor energia que $|sw2\rangle$ e $|sw3\rangle$, sua contribuição para a construção do estado fundamental da cadeia de 6 sítios é menor que a destes. Podemos interpretar este resultado se lembrarmos que $|b\rangle$ deve conter efeito de tamanho maiores que os outros estados. Ou seja, DMRG está mostrando quais são os estados com menor efeito de tamanho.

Capítulo 4

Resultados e Conclusões

Nesse trabalho apresentamos três dos métodos mais importantes para o estudo de sistemas fortemente correlacionados: bosonização, *ansatz* de Bethe e o grupo de renormalização. Aplicamos o método de bosonização abeliana ao problema da rede de Kondo e usamos o *ansatz* de Bethe no estudo da cadeia de Heisenberg.

No estudo da rede de Kondo, o primeiro resultado que obtivemos foi o mapeamento do problema em um gás de Coulomb generalizado. Isso nos permitiu derivar as equações de renormalização e extrair o diagrama de fase. No decorrer do estudo, conectamos o problema da rede com o problema Jahn-Teller cooperativo e com o problema de 2 líquidos de Luttinger(2-LLs) interagindo por um termo de *hopping*. Esse último está para o problema da rede de Kondo assim como o problema de impurezas em um líquido de Luttinger está para o problema Kondo. O processo de renormalização nos permitiu identificar o surgimento de correlações de curto alcance que correspondem ao fenômeno de *hopping* correlacionado no problema de 2-LLs. Finalmente estudamos o diagrama de fase do modelo.

Apresentamos uma visão muito pessoal do *ansatz* de Bethe. Na cadeia de Heisenberg, mostramos que o *ansatz* de Bethe não é suficiente para construirmos todas as funções de onda de sistemas finitos, tanto na forma funcional como com o *ansatz* de Bethe algébrico. Finalmente apresentamos o método de renormalização da matriz de densidade (DMRG). Mostramos, através da solução de Bethe, que o DMRG escolhe os estados com menor efeito de tamanho para construir o passo de renormalização, enquanto o método de renormalização no espaço real proposto por Wilson escolhe de forma menos sutil os estados a serem usados.

Apêndice A

Definições e identidades

A.1 funções e distribuições

A.1.1 função delta de Kronecker

De forma geral, a delta de Kronecker é definida como:

$$\delta_{l,m} = \begin{cases} 1 & l = m \\ 0 & l \neq m \end{cases},$$

com $\{l, m\} \in \mathcal{N}$.

Uma das possíveis representações desta distribuição tem a forma:

$$\delta_{l,m} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} e^{2\pi i(l-m)n},$$

assim, se definirmos $k = \frac{2\pi}{L}l$ e $q = \frac{2\pi}{L}m$ e $\{l, m \in \mathcal{N}\}$, somos levados à representação integral:

$$\delta_{k,q} = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dx e^{i(k-q)x}.$$

A.1.2 distribuição delta de Dirac

Por definição, a função de Dirac é:

$$\delta(y-x) = \begin{cases} \infty & , y = x \\ 0 & , y \neq x \end{cases}, \{x, y\} \in \mathfrak{R}$$

Uma das possíveis representações integrais [25] tem a forma:

$$\delta(\vec{y} - \vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} dl^d \exp[i(\vec{y} - \vec{x}) \cdot \vec{l}].$$

No caso particular de uma dimensão:

$$\delta(y - x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dl \exp[i(y - x)l]$$

A.1.3 função degrau

Definimos a função degrau como:

$$\Theta(x - y) = \begin{cases} 1, & x > y \\ 0, & x \leq y \end{cases}.$$

Da definição pode-se mostrar que:

$$\partial_x \Theta(x - y) = \delta(x - y),$$

e que:

$$\partial_y \Theta(x - y) = -\delta(x - y).$$

A.1.4 função sinal

A função é definida como:

$$\Xi(x - y) = \Theta(x - y) - \Theta(y - x) = \begin{cases} 1 & , x > y \\ 0 & x = y \\ -1 & x < y \end{cases},$$

logo:

$$\partial_y \Xi(x - y) = -2\delta(x - y).$$

A.2 identidades úteis

Listamos aqui algumas identidades úteis:

- Dada as condições[78]:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \text{ e } [\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{B}, \hat{C}] = 0,$$

são válidas as identidades:

$$e^{\hat{A}} \cdot e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}\hat{C}}. \quad (\text{A.1})$$

$$e^{-\hat{B}} f(\hat{A}) e^{\hat{B}} = f(\hat{A} + \hat{C}) \quad (\text{A.2})$$

• Dada as condições [78]:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{D} \hat{B} \text{ e } [\hat{A}, \hat{D}] = [\hat{B}, \hat{D}] = 0,$$

e f uma função arbitrária, é válida a identidade:

$$f(\hat{A}) \hat{B} = \hat{B} f(\hat{A} + \hat{D}). \quad (\text{A.3})$$

• Teorema de Baker-Hausdorff:

$$e^{-\hat{B}} \hat{A} e^{\hat{B}} = \hat{A} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!} [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}] + \dots \quad (\text{A.4})$$

A.3 álgebra SU(2)

As matrizes de Pauli são definidas como:

$$1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

Os operadores de spin $\frac{1}{2}$ são:

$$S^z = \frac{1}{2}\sigma^z, \quad S^x = \frac{1}{2}\sigma^x \text{ e } S^y = \frac{1}{2}\sigma^y.$$

Obedecendo à álgebra:

$$[S^x, S^y] = iS^z.$$

Os operadores de criação e destruição são definidos como:

$$S^+ = S^x + iS^y$$

$$S^- = S^x - iS^y,$$

o que implica que:

$$[S^z, S^-] = -S^-,$$

$$[S^z, S^+] = S^+.$$

A.4 coordenadas polares

para o espaço de momentos (k, ω) e o espaço real $(\Delta x, \Delta \tau)$, usamos ao longo do texto a convenção:

$$\left. \begin{array}{l} k = \rho \cos(\theta) \\ \omega = \rho \sin(\theta) \\ \Delta x = r \sin(\varphi) \\ \Delta \tau = r \cos(\varphi) \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} k\Delta x + \omega\Delta \tau = r\rho \sin(\theta + \varphi) \\ dk \wedge d\omega = \rho d\rho \wedge d\theta \end{array}$$

Apêndice B

Bosonização e Rede de Kondo

B.1 função de correlação de 2 pontos

$$I = \left\langle e^{i\tilde{\alpha}\hat{\theta}(1)+i\tilde{\beta}\hat{\phi}(1)} e^{-i\tilde{\alpha}\hat{\theta}(2)-i\tilde{\beta}\hat{\phi}(2)} \right\rangle$$

definido:

$$\hat{\alpha} = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta} \quad e \quad \hat{\beta} = \tilde{\beta} - \tilde{\alpha}$$

separamos a função em componentes holonômicas e anti-holonômicas:

$$I = I_1 I_2 = \left\langle e^{i\hat{\alpha}(\varphi(1)-\varphi(2))} \right\rangle \left\langle e^{i\hat{\beta}(\phi(1)-\phi(2))} \right\rangle$$

$$\ln I_1 = -\frac{\hat{\alpha}^2}{L\beta} \sum_{k,\omega} \frac{1}{k} \frac{1 - \cos(k\Delta x + \omega\Delta\tau)}{-i\omega + k}$$

$$\ln I_2 = -\frac{\hat{\beta}^2}{L\beta} \sum_{k,\omega} \frac{1}{k} \frac{1 - \cos(k\Delta x + \omega\Delta\tau)}{i\omega + k}$$

$$\ln I = -\frac{1}{L\beta} \sum_{k,\omega} \frac{1 - \cos(k\Delta x + \omega\Delta\tau)}{k} \frac{(\hat{\alpha}^2 + \hat{\beta}^2) k + i\omega (\hat{\alpha}^2 - \hat{\beta}^2)}{k^2 + \omega^2}$$

No limite contínuo:

$$\ln I = -\frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{1 - \cos(k\Delta x + \omega\Delta\tau)}{k} \frac{(\hat{\alpha}^2 + \hat{\beta}^2) k + i\omega (\hat{\alpha}^2 - \hat{\beta}^2)}{k^2 + \omega^2}$$

$$A = -\frac{\hat{\alpha}^2 + \hat{\beta}^2}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{1 - \cos(k\Delta x + \omega\Delta\tau)}{k^2 + \omega^2}$$

$$B = -\frac{i(\hat{\alpha}^2 - \hat{\beta}^2)}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{1 - \cos(k\Delta x + \omega\Delta\tau)}{k^2 + \omega^2} \frac{\omega}{k}$$

Se $\Delta\tau = 0$ imediatamente temos: $B = 0$. Sem perda de generalidades considere $\Delta\tau > 0$:

$$B = -\frac{i(\hat{\alpha}^2 - \hat{\beta}^2)}{4\pi} \arctan\left(\frac{\Delta x}{\Delta\tau}\right)$$

o que define o spin conforme.

$$S = \frac{\hat{\alpha}^2 - \hat{\beta}^2}{8\pi}$$

$$A = -\frac{\hat{\alpha}^2 + \hat{\beta}^2}{4\pi} \int_0^\rho d\rho \frac{1 - J_0(r\rho)}{\rho} = \frac{\hat{\alpha}^2 + \hat{\beta}^2}{4\pi} \left(\ln \Lambda - \ln |r| + O\left(\frac{1}{\Lambda^2}\right) \right)$$

o que define o peso conforme (*conformal weight*):

$$h = \frac{\hat{\alpha}^2 + \hat{\beta}^2}{8\pi}$$

Ou seja:

$$I = \left(\frac{\Lambda}{r}\right)^{2h - 2iS \arctan\left(\frac{\Delta x}{\Delta\tau}\right)}$$

Em termos das coordenadas complexas: $z_{12} = \Delta\tau + i\Delta x$

$$I \cong \frac{1}{|z_{12}|^{2h}} \left(\frac{z_{12}}{\bar{z}_{12}}\right)^S = z_{12}^{-\frac{\hat{\alpha}^2}{4\pi}} \bar{z}_{12}^{-\frac{\hat{\beta}^2}{4\pi}}$$

Note que devido a escolha do ramo do logaritmo, a função será univaluada somente se S for um inteiro ou semi-inteiro:

$$I = \left(\frac{\Lambda}{r}\right)^{2h - 2iS(\theta_{12} + 2\pi n)}$$

B.2 propagadores para a rede de Kondo

B.2.1 propagador spin-spin

Inicialmente vamos calcular o propagador sobre o campo direito:

$$\begin{aligned} & \sum_{x_1 > x_2} \int_{\tau_1 > \tau_2} d\tau_1 d\tau_2 S^z(1) K_{1R}(\Delta x, \Delta\tau) S^z(2) = \\ & = \frac{2J_z^2}{\pi L \beta^2} \sum_{x_1 > x_2} \int_{\tau_1 > \tau_2} d\tau_1 d\tau_2 S^z(1) S^z(2) \sum_{k > 0, \omega_n} k \frac{\cos(k\Delta x_{12} + \omega_n \Delta\tau_{12})}{k + i\omega_n} \\ & + \frac{J_z^2}{4\pi L \beta} \sum_x \int_\tau d\tau \sum_{k > 0, \omega_n} \frac{k}{k + i\omega_n} \end{aligned}$$

A última parcela é uma constante correspondendo ao locador, a sua parte imaginária será cancelada pela parcela proveniente do campo esquerdo. A divergência no ultra-violeta é controlada pelo *cut-off*. Os cálculos se tornam mais simples se passarmos para coordenadas polares¹:

$$\begin{aligned} K_{1R}(r, \varphi) &= \frac{J_z^2}{2\pi^3} \int_0^\Lambda d\rho \int_{-\pi}^\pi d\theta \rho (1 + e^{-2i\theta}) e^{i\rho r \sin(\theta + \varphi)} \\ &= \frac{J_z^2}{2\pi^2} \int_0^\Lambda d\rho \rho (J_0(\rho r) + e^{-2i\varphi} J_2(\rho r)) \\ &= \frac{J_z^2}{2\pi^2} (1 - e^{-2i\varphi}) \frac{\Lambda}{r} J_1(r\Lambda) - \frac{J_z^2}{2\pi^2} \frac{e^{-2i\varphi}}{r^2} J_0(\Lambda r) + \frac{J_z^2}{2\pi^2} \frac{e^{-2i\varphi}}{r^2} \end{aligned}$$

De maneira análoga para o campo esquerdo obtemos:

$$K_{1L}(r, \varphi) = \frac{J_z^2}{2\pi^2} (1 - e^{2i\varphi}) \frac{\Lambda}{r} J_1(r\Lambda) - \frac{J_z^2}{2\pi^2} \frac{e^{2i\varphi}}{r^2} J_0(\Lambda r) + \frac{J_z^2}{2\pi^2} \frac{e^{2i\varphi}}{r^2}$$

Somando os dois resultados, obtemos o propagador spin-spin:

$$K_{1R}(r, \varphi) + K_{1L}(r, \varphi) = \tilde{K}_1 + \frac{J_z^2 \cos(2\varphi)}{\pi^2 r^2}$$

onde:

$$\tilde{K}_1 = \frac{J_z^2}{\pi^2} (1 - \cos(2\varphi)) \frac{\Lambda}{r} J_1(r\Lambda) - \frac{J_z^2 \cos(2\varphi)}{\pi^2 r^2} J_0(\Lambda r)$$

B.2.2 propagador *kink-kink*

K_2 é o propagador padrão do campo bosônico.

¹apêndice A.4.

$$\begin{aligned} \sum_{i>j} q(i) K_{2R}(\Delta x, \Delta \tau) q(j) &= \frac{8\pi}{L\beta} \sum_{i>j} q(i) q(j) \sum_{k>0, \omega_n} \frac{1}{k} \frac{\cos(k\Delta x_{ij} + \omega_n \Delta \tau_{ij})}{k + i\omega_n} \\ &\quad + \frac{4\pi}{L\beta} \sum_i q(i)^2 \sum_{k>0, \omega_n} \frac{1}{k(k + i\omega_n)} \\ \sum_{l>m} q(l) K_{2L}(\Delta x, \Delta \tau) q(m) &= + \frac{8\pi}{L\beta} \sum_{l>m} q(l) q(m) \sum_{k>0, \omega_n} \frac{1}{k} \frac{\cos(k\Delta x_{lm} + \omega_n \Delta \tau_{lm})}{k - i\omega_n} \\ &\quad + \frac{4\pi}{L\beta} \sum_l q(l)^2 \sum_{k>0, \omega_n} \frac{1}{k(k - i\omega_n)} \end{aligned}$$

onde os conjuntos $\{i, j\}$, correspondem as coordenadas de *flips* ocasionados por um boson direito, e $\{l, m\}$, por um boson do campo esquerdo.

A condição de neutralidade nos permite controlar a divergência logarítmica em infra-vermelho que surge²:

$$\sum_i q(i) = 0 \Rightarrow \sum_i q(i)^2 = -2 \sum_{i>j} q(i) q(j)$$

$$\sum_l q(l) = 0 \Rightarrow \sum_l q(l)^2 = -2 \sum_{l>m} q(l) q(m)$$

$$\sum_{i>j} q(i) K_{2R}(\Delta x, \Delta \tau) q(j) = -\frac{8\pi}{L\beta} \sum_{i>j} q(i) q(j) \sum_{k>0, \omega_n} \frac{1}{k} \frac{1 - \cos(k\Delta x_{ij} + \omega_n \Delta \tau_{ij})}{k + i\omega_n}$$

$$\sum_{l>m} q(l) K_{2L}(\Delta x, \Delta \tau) q(m) = -\frac{8\pi}{L\beta} \sum_{l>m} q(l) q(m) \sum_{k>0, \omega_n} \frac{1}{k} \frac{1 - \cos(k\Delta x_{lm} + \omega_n \Delta \tau_{lm})}{k - i\omega_n}$$

Ou em termos de parte real e imaginária:

$$\sum_{i>j} q(i) K_{2R}(\Delta x, \Delta \tau) q(j) = -\frac{8\pi}{L\beta} \sum_{i>j} q(i) q(j) \sum_{k>0, \omega_n} \frac{1 - \cos(k\Delta x_{ij} + \omega_n \Delta \tau_{ij})}{k^2 + \omega_n^2} \left(1 - i \frac{\omega_n}{k}\right)$$

$$\sum_{l>m} q(l) K_{2L}(\Delta x, \Delta \tau) q(m) = -\frac{8\pi}{L\beta} \sum_{l>m} q(l) q(m) \sum_{k>0, \omega_n} \frac{1 - \cos(k\Delta x_{lm} + \omega_n \Delta \tau_{lm})}{k^2 + \omega_n^2} \left(1 + i \frac{\omega_n}{k}\right)$$

²uma teoria escalar em dimensão 2 é super-renormalizavel[93].

Em coordenadas polares e no limite contínuo:

$$\sum_{i>j} q(i) K_{2R}(r, \varphi) q(j) = -\frac{2}{\pi} \sum_{i>j} q(i) q(j) \int_0^\Lambda d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \frac{1 - \cos(r\rho \sin(\theta + \varphi))}{\rho} (1 + i \cot \theta)$$

$$\sum_{l>m} q(l) K_{2L}(r, \varphi) q(m) = -\frac{2}{\pi} \sum_{l>m} q(l) q(m) \int_0^\Lambda d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \frac{1 - \cos(r\rho \sin(\theta + \varphi))}{\rho} (1 - i \cot \theta)$$

As integrais são imediatas:

$$-\frac{2}{\pi} \sum_{i>j} q(i) q(j) \int_0^\Lambda d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \frac{1 - \cos(r\rho \sin(\theta + \varphi))}{\rho} = -2 \sum_{i>j} q(i) q(j) \int_0^\Lambda d\rho \frac{1 - J_0(\rho r)}{\rho}$$

$$\int_0^\Lambda d\rho \frac{1 - J_0(\rho r)}{\rho} = \ln |\Lambda| - \ln |r| + O\left(\frac{1}{\Lambda^2}\right)$$

$$\frac{2}{\pi} \int_0^\Lambda d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \frac{1 - \cos(r\rho \sin(\theta + \varphi))}{\rho} \cot \theta = -2\varphi$$

Com isso, obtemos:

$$\sum_{i>j} q(i) K_{2R}(r, \varphi) q(j) = 2 \sum_{i>j} q(i) q(j) [\ln |r| + i\varphi] = 2 \sum_{i>j} q(i) q(j) \ln z_{ij}$$

$$\sum_{l>m} q(l) K_{2L}(r, \varphi) q(m) = 2 \sum_{l>m} q(l) q(m) \ln \bar{z}_{lm}$$

onde $z = \Delta\tau + i\Delta x$.

De maneira oposta a K_1 , os pontos calculados em K_2 tem carga esquerda/direita $\pm 1/0$ ou $0/\pm 1$, tendo assim um spin conforme diferente de zero. Isso simplesmente vem do fato que K_1 é o propagador do campo bosônico $\hat{\phi}$, enquanto K_2 de combinações lineares de $\hat{\theta}$ e $\hat{\phi}$.

B.2.3 propagador spin-kink

$$\sum_i \sum_x \int d\tau q(i) S^z(x, \tau) K_{3R}(\Delta x, \Delta\tau) = \frac{4iJ}{L\beta} \sum_i \sum_x \int d\tau q(i) S^z(x, \tau) \sum_{k>0, \omega_n} \frac{\sin(k\Delta x + \omega_n \Delta\tau)}{k + i\omega_n}$$

$$K_{3R}(\Delta x, \Delta\tau) = \frac{4iJ}{L\beta} \sum_{k>0, \omega_n} (k - i\omega_n) \frac{\sin(k\Delta x + \omega_n\Delta\tau)}{k^2 + \omega_n^2}$$

$$K_{3L}(\Delta x, \Delta\tau) = -\frac{4iJ}{L\beta} \sum_{k>0, \omega_n \neq 0} (k + i\omega_n) \frac{\sin(k\Delta x + \omega_n\Delta\tau)}{k^2 + \omega_n^2}$$

parte imaginária

$$\begin{aligned} \Im(K_{3R}(\Delta x, \Delta\tau)) &= \frac{4iJ}{L\beta} \sum_{k>0, \omega_n} k \frac{\sin(k\Delta x + \omega_n\Delta\tau)}{k^2 + \omega_n^2} \\ &= \frac{iJ}{\pi^2} \int dk d\omega \frac{k \sin(k\Delta x + \omega\Delta\tau)}{k^2 + \omega^2} \\ &= \frac{iJ}{4\pi^2} \int_{0+}^{\Lambda} d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \cos(\theta) \sin(r\rho \sin(\theta + \varphi)) \\ &= iJ \frac{\sin(\varphi)}{\pi} \int_{0+}^{\Lambda} d\rho J_1(r\rho) = iJ \frac{\sin(\varphi)}{\pi r} \end{aligned}$$

onde, tomamos $\Lambda \rightarrow \infty$ [32, pp. 665], ou seja essa é uma expressão assintoticamente correta.

Em termos do *cut-off* na realidade temos:

$$\Im(K_{3R}) = iJ \frac{\sin(\varphi)}{\pi r} \int_{0+}^z dz J_1(z) = iJ \frac{\sin(\varphi)}{2\pi r} (1 - J_0(r\Lambda))$$

De maneira análoga, para o campo esquerdo obtemos:

$$\Im(K_{3L}) = -iJ \frac{\sin(\varphi)}{\pi r} \int_{0+}^z dz J_1(z) = -iJ \frac{\sin(\varphi)}{2\pi r} (1 - J_0(r\Lambda))$$

parte real

$$\begin{aligned} \Re(K_{3R}(\Delta x, \Delta\tau)) = \Re(K_{3L}(\Delta x, \Delta\tau)) &= \frac{4J}{L\beta} \sum_{k>0, \omega_n} \omega_n \frac{\sin(k\Delta x + \omega_n\Delta\tau)}{k^2 + \omega_n^2} \\ &= \frac{J}{\pi^2} \int_{0+}^{\Lambda} dk \int_{-\Lambda}^{\Lambda} d\omega \omega \frac{\sin(k\Delta x + \omega\Delta\tau)}{k^2 + \omega^2} \\ &= \frac{J}{\pi^2} \int_{0+}^{\Lambda} d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \sin(\theta) \sin(r\rho \sin(\theta + \varphi)) \\ &= \frac{J \cos(\varphi)}{\pi} \int_{0+}^{\Lambda} d\rho J_1(r\rho) = \frac{J \cos(\varphi)}{\pi r} \end{aligned}$$

B.3 integrais de caminho com estados coerentes de spin

Neste apêndice, fornecemos a passagem do formalismo hamiltoniano para o formalismo de integrais de caminho para a rede de Kondo de maneira bem resumida. O formalismo aqui usado segue de maneira muito próxima o usado por Negele e Orland[55] e Fradkin[27]. Está presumido que o leitor esta familiarizado com o formalismo de integrais de caminho no modelo de Heisenberg e de campos bosônicos, este apêndice apenas liga os dois tópicos.

Consideremos inicialmente a hamiltoniana:

$$H = H_0 + \sum_j \vec{B}(\phi(j), \theta(j)) \cdot \vec{S}(j).$$

O primeiro passo é escrevermos a função de partição correspondente a este hamiltoniano:

$$Z = \text{tr} e^{-\beta H}.$$

Para escrevermos os estados coerentes de spin, devemos fixar um estado e escrever todos os outros em função deste. Seguindo Fradkin, escolhemos o estado de maior peso na álgebra:

$$|0\rangle = \left| S = \frac{1}{2}, S^z = \frac{1}{2} \right\rangle$$

Dividimos o tempo imaginário em M intervalos iguais $\delta t = \frac{\beta}{M}$:

$$Z = \sum_{\lambda} \langle \lambda | e^{-\delta t \sum_{n=1}^M H_n} | \lambda \rangle = \sum_{\lambda} \langle \lambda | \prod_{n=1}^M e^{-\delta t H_n} | \lambda \rangle. \quad (\text{B.1})$$

Sejam os estados coerentes do campo bosônico e dos spin denotados por:

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\vec{s}\rangle.$$

Usando a resolução da identidade na base de estados coerentes:

$$I = \int d\vec{s} d\phi |\phi\rangle \otimes |\vec{s}\rangle \langle \vec{s}| \otimes \langle \phi| = \int d\psi |\psi\rangle \langle \psi|.$$

Entre cada um dos termos da produtória de B.1, temos:

$$Z = \sum_{\lambda} \left(\prod_{n=1}^M \int d\psi_n \right) \langle \lambda | e^{-\delta t H_M} | \psi_M \rangle \langle \psi_M | e^{-\delta t H_{M-1}} | \psi_{M-1} \rangle \langle \psi_{M-1} | \dots \\ \dots | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | e^{-\delta t H_1} | \lambda \rangle$$

Assumindo condições periódicas, ou seja $|\psi_{M+1}\rangle = |\psi_1\rangle$, a função de partição é reescrita como:

$$Z = \prod_{n=1}^M \int d\psi_n \langle \psi_{n+1} | e^{-\delta t H_n} | \psi_n \rangle.$$

Finalmente, se definirmos:

$$D\psi = \prod_{n=1}^M d\psi_n \text{ e } L(n) = \ln \langle \psi_{n+1} | e^{-\delta t H_n} | \psi_n \rangle,$$

$$Z = \int D\psi e^{-\delta t \sum_n L(n)},$$

que, no limite de $\delta t \rightarrow 0$, tem a forma tradicional:

$$Z = \int D\psi e^{-\int dt L(t)}.$$

Falta, então, calcularmos a “lagrangeana” associada. Expandindo a exponencial para δt pequeno, temos:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{n+1} | e^{-\delta t H_n} | \psi_n \rangle &\cong \langle \psi_{n+1} | 1 - \delta t H_n | \psi_n \rangle \\ &\cong \langle \psi_{n+1} | \psi_n \rangle - \delta t \langle \psi_{n+1} | H_n | \psi_n \rangle \end{aligned}$$

É trivial (mas nada óbvio [27]) mostrar que:

$$\langle \psi_{n+1} | \psi_n \rangle = \langle \phi_{n+1} | \phi_n \rangle \left(\frac{1 + \vec{s}(n) \cdot \vec{s}(n+1)}{2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{2} \Phi(\vec{s}(n), \vec{s}(n+1))}.$$

Por outro lado:

$$\langle \psi_{n+1} | H_n | \psi_n \rangle = \tilde{H}(n),$$

onde usamos que:

$$|\psi_{n+1}\rangle \cong \langle \psi_{n+1} | \psi_n \rangle |\psi_n\rangle + O(\delta t)$$

Assim, considerando apenas termos de ordem δt e re-exponenciando, obtemos a função de partição em termos dos estados coerentes de spin e dos campos bosônicos:

$$Z = \int D\psi e^{-\int dt L_0(t) + \sum_j \vec{B}(\varphi(j,t), \phi(j,t)) \cdot \vec{S} - \frac{i}{2} \sum_j S_{\omega z \omega}(j) - \frac{\delta t}{8} \sum_j \int dt (\partial_t \vec{S}(j,t))^2},$$

onde a lagrangeana livre é dada por:

$$L_0 = \sum_{q>0} \phi^*(q, t) [\partial_t + v_F q] \phi(q, t) + \varphi^*(q, t) [\partial_t + v_F q] \varphi(q, t),$$

e S_{wzw} é o termo de Wess-Zumino-Witten:

$$S_{wzw}(j) = \int_0^1 d\tau \int_0^\beta dt \vec{n}(j, t, \tau) \cdot \partial_t \vec{n}(j, t, \tau) \times \partial_\tau \vec{n}(j, t, \tau),$$

onde:

$$\vec{n}(j, t, 0) = \vec{s}(j, t)$$

$$\vec{n}(j, t, 1) = \vec{s}_0$$

$$\vec{n}(j, 0, \tau) = \vec{n}(j, \beta, \tau).$$

B.4 condições de neutralidade

Vamos definir:

1. condição de neutralidade: $\sum_i q(i) = 0$
2. condição de neutralidade forte: $\sum_i q(x, \tau_i) = 0$

Como condição particular da condição de neutralidade forte, obtemos a condição:

$$\forall x > y, \quad \sum_i q(x_i, \tau_i) = 0$$

em outras palavras, se você divide o espaço-tempo em dois subsistemas em uma dada coordenada espacial, o gás de *kinks* e sempre neutro em cada subsistema.

No caso da função de correlação que calculamos no apêndice B.1 a condição de neutralidade forte só é satisfeita quando os dois operadores se encontram em posições iguais. Vamos refazer rapidamente o calculo com essa condição:

$$B = -\frac{i(\hat{\alpha}^2 - \hat{\beta}^2)}{4\pi^2} \int_0^\infty dk \int_{-\infty}^\infty d\omega \frac{1 - \cos(\omega \Delta \tau) \omega}{k^2 + \omega^2} \frac{1}{k}$$

Como o integrando é anti-simétrico em ω , $B=0$. De maneira geral a parte complexa da ação assume a forma:

$$\sum_{j \neq i} q(x_j, \tau_j) (\theta_{ij} + 2\pi n_i) q(x_i, \tau_i) = \sum_{x_j > x_i} + \sum_{x_j < x_i} q(x_j, \tau_j) (\theta_{ij} + 2\pi n_i) q(x_i, \tau_i)$$

Os termos com a mesma coordenada espacial são nulos. Como consequência direta da condição de neutralidade forte o termo do índice da seção da superfície de Riemann é nulo. O que mostra de forma geral o resultado que havíamos derivado no texto.

A condição de neutralidade forte implica que o spin conforme pode assumir qualquer valor real, sendo que para efeito de calculo temos de considerar apenas o ramo principal do logarítmo (ou qualquer outro, mas depois de escolhido ele é único).

B.5 gás molecular

Os termos de *foward* da hamiltoniana da rede de Kondo bosonizada é:

$$H_1^{(f)} = J \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_x \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x)$$

$$H_2^{(f)} = \frac{J}{4\pi\alpha} \sum_x \left[F_R^\dagger e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(x) - \hat{\theta}_s(x))} + F_L^\dagger e^{-i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(x) + \hat{\theta}_s(x))} \right] S^+(x) + H.c.$$

onde $F_L^\dagger = F_{L\uparrow}^\dagger F_{L\downarrow}$, $F_R^\dagger = F_{R\uparrow}^\dagger F_{R\downarrow}$ e $J = \frac{J_k}{v_F}$.

Vamos supor agora que no tempo (1) o spin inverte de \uparrow para \downarrow e em (2) ele retorna para \uparrow .

$$\dots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \sim (1) \sim \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \dots \downarrow\downarrow\downarrow \sim (2) \sim \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots$$

O termo transverso fornece as contribuições para a fugacidade:

$$\left(\frac{J}{4\pi\alpha} \right)^2 \left(F_R^\dagger e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(2) - \hat{\theta}_s(2))} + F_L^\dagger e^{-i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(2) + \hat{\theta}_s(2))} \right) \times$$

$$\times \left(F_R e^{-i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1) - \hat{\theta}_s(1))} + F_L e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1) + \hat{\theta}_s(1))} \right)$$

Fazendo o produto, encontramos 4 termos:

$$\left(\frac{J}{4\pi\alpha} \right)^2 \times \left[F_R^\dagger F_R e^{-i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1) - \hat{\theta}_s(1) - \hat{\phi}_s(2) + \hat{\theta}_s(2))} + F_L^\dagger F_L e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1) + \hat{\theta}_s(1) - \hat{\phi}_s(2) - \hat{\theta}_s(2))} + F_R^\dagger F_L e^{-i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1) - \hat{\theta}_s(1) + \hat{\phi}_s(2) + \hat{\theta}_s(2))} + F_L^\dagger F_R e^{+i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1) + \hat{\theta}_s(1) + \hat{\phi}_s(2) - \hat{\theta}_s(2))} \right]$$

Por outro lado $H_0 + H_1^{(J)}$ fornece:

$$\begin{aligned} -S_0 - J\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int d\tau \partial_x \hat{\phi}_s(\tau) S^z(\tau) &= -S_0 - iJ\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int d\tau \partial_\tau \hat{\theta}_s(\tau) S^z(\tau) = \\ &= -S_0 - iJ\sqrt{\frac{2}{\pi}} \hat{\theta}_s(1) + iJ\sqrt{\frac{2}{\pi}} \hat{\theta}_s(2) = -S_0 - i\frac{J}{\pi} \sqrt{2\pi} \hat{\theta}_s(1) + i\frac{J}{\pi} \sqrt{2\pi} \hat{\theta}_s(2) \end{aligned}$$

Juntando os dois resultados e usando que $F_R^\dagger F_R = F_L^\dagger F_L = 1$:

$$\begin{aligned} &\left(\frac{J}{4\pi\alpha}\right)^2 \times e^{-S_0} \left[e^{i\sqrt{2\pi}(-\hat{\phi}_s(1)+(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(1)+\hat{\phi}_s(2)-(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(2))} + \right. \\ &e^{-i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1)+(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(1)-\hat{\phi}_s(2)-(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(2))} + \\ &F_R^\dagger F_L e^{i\sqrt{2\pi}(-\hat{\phi}_s(1)+(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(1)-\hat{\phi}_s(2)-(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(2))} + \\ &\left. F_L^\dagger F_R e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1)+(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(1)+\hat{\phi}_s(2)-(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(2))} \right] \end{aligned}$$

Como o terceiro e quarto termos não são neutros, sua média pela ação Gaussiana é nula, o que nos deixa com apenas:

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{J}{4\pi\alpha}\right)^2 \times e^{-S_0} \left[e^{i\sqrt{2\pi}(-\hat{\phi}_s(1)+(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(1)+\hat{\phi}_s(2)-(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(2))} + \right. \\ &\left. e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1)+(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(1)-\hat{\phi}_s(2)-(1-\frac{J}{\pi})\hat{\theta}_s(2))} \right] \end{aligned}$$

que são as duas possíveis configurações “atômicas” (os sinais de ϕ e θ coincidem ou não em uma dada posição do espaço tempo) que obedecem a neutralidade.

Note como a função de partição é completamente livre dos fatores de Klein. Para uma configuração com 2 pares de *kink-antikink* o terceiro e quarto termos podem se compensar e criar uma configuração neutra.

Outra fato interessante é o ponto de Toulouse, $J = \pi$, onde os termos no campo dual se anulam.

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{4\alpha}\right)^2 \times e^{-S_0} \left[e^{i\sqrt{2\pi}(-\hat{\phi}_s(1)+\hat{\phi}_s(2))} + \right. \\ &\left. e^{i\sqrt{2\pi}(\hat{\phi}_s(1)-\hat{\phi}_s(2))} \right] \end{aligned}$$

Nossa ultima consideração é com relação a condição de alternância de cargas. Inicialmente vamos definir o par (carga magnética, carga elétrica), ou os átomos de nosso problema:

$$\begin{aligned} A^\dagger &= (-, -) \\ A &= (+, +) \\ B^\dagger &= (-, +) \\ B &= (+, -) \end{aligned}$$

Nessa notação o exemplo anterior se escreve:

$$Z = y \langle A^\dagger A + B^\dagger B \rangle$$

Dada uma configuração de spins no espaço-tempo existem várias possíveis configurações “atômicas” que se adequam a essa configuração:

$$Z = \sum_q \prod_i (kink - i) (antikink - i)$$

onde i é o produto é sobre os operadores de *kink-antikink* consecutivos no tempo.

$$Z = \sum_q \prod_i \left(F_R^\dagger B^\dagger(i) + F_L^\dagger A^\dagger(i) \right) (F_R B(i) + F_L A(i))$$

Podemos definir as “moléculas” básicas:

$$\begin{aligned} \alpha &= A^\dagger A \\ \beta &= B^\dagger B \\ \gamma^\dagger &= F_R^\dagger F_L B^\dagger A \\ \gamma &= F_L^\dagger F_R A^\dagger B \end{aligned}$$

Uma dada história de *kink-antikink* deve ser somada sobre todas as possíveis configurações “moleculares”, por exemplo uma história com 10 *flips* deve ser somada sobre:

$$\begin{aligned} &\alpha\alpha\alpha\alpha \\ &\alpha\beta\alpha\beta \\ &\gamma\alpha\beta\alpha\gamma^\dagger \\ &\dots \end{aligned}$$

Poderíamos pensar que os fatores de Klein pudessem introduzir um sinal adicional. Usando a notação “molecular” fica claro que isso não acontece. α e β não tem fatores de Klein e por isso não interferem em nada. Um par temporalmente ordenado $(\gamma\dots\gamma^\dagger)$ também não introduz nenhum sinal. Nos pares $(\gamma\dots\gamma)$ e $(\gamma^\dagger\dots\gamma^\dagger)$ os fatores de Klein não se cancelam, contudo um par desses não pode aparecer só, porque violaria a condição de neutralidade de carga do gás, o que o reduz ao problema anterior. Em resumo não há fatores de Klein ou sinais oriundos deles na parte *foward* no hamiltoniano.

Do ponto de vista das cargas é importante perceber que não há nenhuma condição adicional sobre as cargas elétricas. Elas podem aparecer em qualquer ordem no tempo. Por exemplo:

$$\begin{array}{ccc} A^\dagger A A^\dagger A A^\dagger A & \begin{array}{l} - + - + - + \\ - + - + - + \end{array} & \begin{array}{l} \rightarrow \text{carga magnética} \\ \rightarrow \text{carga elétrica} \end{array} \\ \Downarrow & \iff & \Downarrow \\ B^\dagger A A^\dagger B A^\dagger A & \begin{array}{l} - + - + - + \\ + + - - - + \end{array} & \begin{array}{l} \rightarrow \text{carga magnética} \\ \rightarrow \text{carga elétrica} \end{array} \end{array}$$

No caso particular de só termos uma espécie atômica a situação fica diferente, aí as cargas magnéticas devem se alternar.

No ponto de Toulouse, A e B desenvolvem uma relação de dualidade $A^\dagger = B$, já que a constante de acoplamento elétrico vai a zero.

B.6 método do operador deslocamento

Considere:

$$\begin{cases} \bar{a}_{k,s}^\dagger &= a_{k,s}^\dagger(k) - i\frac{\eta}{\sqrt{k}}S_{-k}^z \\ \bar{b}_{k,s}^\dagger &= b_{k,s}^\dagger(k) - i\frac{\eta}{\sqrt{k}}S_k^z \end{cases}$$

Estes novos campos também têm relações de comutação bosônicas:

$$\begin{aligned} [\bar{a}_k, \bar{a}_{k'}^\dagger] &= \delta_{kk'} & [\bar{b}_k, \bar{b}_{k'}^\dagger] &= \delta_{kk'} & [\bar{a}_k, \bar{b}_{k'}] &= 0 \\ [\bar{a}_k, \bar{a}_{k'}] &= 0 & [\bar{b}_k, \bar{b}_{k'}] &= 0 & [\bar{a}_k, \bar{b}_{k'}^\dagger] &= 0 \end{aligned}$$

Calculando a hamiltoniana livre desses campos vestidos pelos spins:

$$\begin{aligned} \sum_{k>0} k \bar{a}_{k,s}^\dagger \bar{a}_{k,s} + k \bar{b}_{k,s}^\dagger \bar{b}_{k,s} &= \sum_{k>0} k a_{k,s}^\dagger a_{k,s} + k b_{k,s}^\dagger b_{k,s} + i\eta\sqrt{k} S_k^z a_{k,s}^\dagger \\ &\quad - i\eta\sqrt{k} S_{-k}^z a_{k,s} + i\eta\sqrt{k} S_{-k}^z b_{k,s}^\dagger - i\eta\sqrt{k} S_k^z b_{k,s} \\ &\quad + 2\eta^2 S_k^z S_{-k}^z \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Se lembrarmos da definição da transformada de Fourier dos operadores de spin:

$$S_k^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_x e^{-ikx} S^z(x),$$

observamos que podemos re-escrever B.2 como:

$$\begin{aligned} \bar{H}_0 &= H_0^s + i\eta\sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{\sqrt{2L}} \int dx \sum_{k>0} \left[\sqrt{k} e^{ikx} \left(b_{k,s}^\dagger - a_{k,s} \right) S^z(x) \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{k} e^{-ikx} \left(b_{k,s} - a_{k,s}^\dagger \right) S^z(x) \right] + 2\eta^2 \sum_{k>0} S_k^z S_{-k}^z, \end{aligned}$$

que pela definição do campo de spin no espaço de momentos, nos leva a:

$$\bar{H}_0 = H_0^s + \eta \sqrt{\frac{2}{a}} \int dx \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x) + 2\eta^2 \sum_{k>0} S_k^z S_{-k}^z.$$

Ou seja, se escolhermos :

$$\eta = \frac{\Delta J}{\sqrt{a\pi}}, \quad (\text{B.3})$$

encontramos que \bar{H}_0 é igual a 2.32 mais um termo que surgiu para “completar o quadrado”:

$$\begin{aligned} \bar{H}_0 &= H_0^s + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\Delta J}{a} \int dx \partial_x \hat{\phi}_s(x) S^z(x) + \Delta H, \\ &= \tilde{H}^s + \Delta H \end{aligned},$$

onde:

$$\Delta H = \Gamma \sum_{k>0} S_k^z S_{-k}^z.$$

É importante que:

$$[\bar{H}_0, \Delta H] = 0, \quad (\text{B.4})$$

ou seja, podemos usar os números “quânticos” de ΔH para classificar os estados de \bar{H}_0 .

Das relações de comutação do campo \bar{a} e \bar{b} , podemos mostrar que:

$$[\bar{H}_0, \bar{a}_k^\dagger] = k \bar{a}_k^\dagger \text{ e } [\bar{H}_0, \bar{b}_k^\dagger] = k \bar{b}_k^\dagger.$$

Falta encontrarmos o(s) vácuo(s) dos operadores \bar{a} e \bar{b} . Um “chute” inicial seria o vácuo dos campos bosônicos originais:

$$|0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle,$$

onde $|\vec{S}\rangle$ é uma auto-estado de

$$S^z = \frac{1}{N} \sum_k S_k^z.$$

A ação desse estado no operador de destruição \bar{a} é:

$$\begin{aligned}\bar{a}_k |0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle &= \left(a_{k,s} + i \frac{\eta}{\sqrt{k}} S_k^z \right) |0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle \\ &= i \frac{\eta}{\sqrt{k}} \left(\pm \frac{1}{2} \right) |0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle\end{aligned}$$

e de forma análoga para \bar{b} :

$$\begin{aligned}\bar{b}_k |0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle &= \left(b_{k,s} + i \frac{\eta}{\sqrt{k}} S_{-k}^z \right) |0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle \\ &= i \frac{\eta}{\sqrt{k}} \left(\pm \frac{1}{2} \right) |0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle\end{aligned}$$

Fica claro que precisamos de um estado que quando aplicado ao operador a (ou b) gere um pré-fator com sinal oposto a este. Isso pode ser conseguido com um estado coerente do campo original:

$$|\Omega(\vec{S})\rangle = e^{-i \sum_{k>0} \beta_k a_{k,s}^\dagger S_{-k}^z + \gamma_k b_{k,s}^\dagger S_k^z} |0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle.$$

Agora obtemos:

$$\begin{aligned}\bar{a}_q |\Omega(\vec{S})\rangle &= a_{q,s} |\Omega(\vec{S})\rangle + i \frac{\eta}{\sqrt{q}} S_{-q}^z |\Omega(\vec{S})\rangle \\ &= \pm \frac{i}{2} \left(\beta_q - \frac{\eta}{\sqrt{q}} \right) |\Omega(\vec{S})\rangle\end{aligned}$$

e:

$$\begin{aligned}\bar{b}_q |\Omega(\vec{S})\rangle &= b_{q,s} |\Omega(\vec{S})\rangle + i \frac{\eta}{\sqrt{q}} S_q^z |\Omega(\vec{S})\rangle \\ &= \pm \frac{i}{2} \left(\gamma_q - \frac{\eta}{\sqrt{q}} \right) |\Omega(\vec{S})\rangle\end{aligned}$$

Assim se escolhermos:

$$\beta_q = \gamma_q = \frac{\eta}{\sqrt{q}},$$

os estados $|\Omega(\vec{S})\rangle$ são os estados de vácuo que procuramos. Eles e as relações de comutação bosônicas garantem que obtemos uma base do espaço de Hilbert da rede. A expressão para os estados de vácuo de \bar{H}_0 têm a forma:

$$|\Omega(\vec{S})\rangle = e^{-i \sum_{k>0} \frac{\eta}{\sqrt{k}} (a_{k,s}^\dagger + b_{k,s}) S_{-k}^z + \frac{\eta}{\sqrt{k}} (b_{k,s}^\dagger + a_{k,s}) S_k^z} |0\rangle \otimes |\vec{S}\rangle$$

$$(\alpha \bar{a}_q + \beta \bar{b}_q) \left| \Omega \left(\vec{S} \right) \right\rangle = 0, \quad \alpha \text{ e } \beta \in C,$$

e um auto-estado geral:

$$\left| \psi \left(\vec{S} \right) \right\rangle = \prod_{\{j,l\}} \bar{a}_{q_j}^\dagger \bar{b}_{q_l}^\dagger \left| \Omega \left(\vec{S} \right) \right\rangle, \quad (\text{B.5})$$

com energia:

$$\bar{\epsilon}_0 = v_F \sum_{\{j,l\}} q_j + q_l.$$

Já que ΔH , \tilde{H}_0 e \bar{H}_0 comutam, é imediato que B.5 são auto-estados de H_0^s com autovalor:

$$\epsilon_0^s = \bar{\epsilon}_0 - \Gamma s,$$

onde s é o autovalor de ΔH correspondente a \vec{S} .

B.7 *cut-off* suave

Ao escrevermos o problema com o operador composto vimos que surgiu um termo de interação spin-spin que aparentemente é de longo alcance:

$$\frac{\sin(\Lambda r)}{r}, \quad \text{ou na forma} \quad \frac{J_1(\Lambda r)}{r}$$

vamos mostrar que ao introduzirmos um *cut-off* suave tornamos esses termos de curto alcance. Retornando a definição do campo bosônico (equações 2.4), escrevemos o campo composto com um *cut-off* suave como:

$$\bar{\phi}(x) = \hat{\phi}(x) + iJ_z \sqrt{\frac{2}{\pi N}} \sum_{k \neq 0} \frac{e^{-2\pi\alpha|k|+ikx}}{k} S_k^z$$

e a sua derivada como:

$$\partial_x \bar{\phi}(x) = \partial_x \hat{\phi}(x) - J_z \sqrt{\frac{2}{N\pi}} \sum_{k \neq 0} e^{-2\pi\alpha|k|+ikx} S_k^z$$

No hamiltoniano deslocado criamos um termo de interação spin-spin da forma ΔH :

$$\frac{1}{2} \int dx (\partial_x \bar{\phi})^2 = \int dx \frac{1}{2} (\partial_x \hat{\phi})^2 + J_z \sqrt{\frac{2}{\pi}} \partial_x \hat{\phi} S^z + \frac{2J_z^2}{\pi} \sum_{k>0} e^{-4\pi\alpha|k|} S_k^z S_{-k}^z$$

$$\Delta H = \sum_{k>0} e^{-4\pi k\alpha} S_k^z S_{-k}^z = \frac{1}{N} \sum_{x,y} S^z(x) S^z(y) \sum_{k>0} e^{-4\pi k\alpha - ik(x-y)}$$

Fourier transformando os spins e tomando o limite contínuo:

$$\Delta H = \frac{ac}{2\pi} \sum_{x,y} S^z(x) S^z(y) \int_{0+}^{\infty} dk e^{-4\pi k\alpha - ik(x-y)}$$

onde c é o número de sítios bosônicos entre dois spins e a é o parâmetro de rede bosônico.

$$\Delta H = \frac{ac}{2\pi} \sum_{x,y} S^z(x) S^z(y) \left. \frac{e^{-4\pi k\alpha - ik(x-y)}}{-4\pi\alpha - i(x-y)} \right|_{0+}^{\infty}$$

$$\Delta H = \frac{ac}{2\pi} \sum_{x>y} S^z(x) S^z(y) \left(\frac{1}{4\pi\alpha + i(x-y)} + \frac{1}{4\pi\alpha - i(x-y)} \right)$$

$$\Delta H = \frac{ac}{2\pi} \sum_{x>y} S^z(x) S^z(y) \left(\frac{8\pi\alpha}{16\pi^2\alpha^2 + (x-y)^2} \right)$$

o que mostra que, no limite de $\alpha \rightarrow 0$, ΔH é diferente de zero apenas para distâncias da ordem de α . Em particular para os primeiros vizinhos obtemos:

$$\frac{2J_z^2}{\pi} \Delta H = \frac{J_z^2}{\pi^2} \sum_x \left(\frac{8\pi\alpha ac}{16\pi^2\alpha^2 + a^2} \right) S^z(x) S^z(x+1) + \left(\frac{8\pi\alpha ac}{16\pi^2\alpha^2 + 4a^2} \right) S^z(x) S^z(x+2) + \dots$$

Se usarmos o mesmo tipo de aproximação que usamos ao fazermos *point-splitting* ($a = 2\pi\alpha$) e considerarmos que existe um spin por sítio ($c = 1$):

$$\frac{2J_z^2}{\pi} \Delta H = \frac{J_z^2}{\pi^2} \sum_x \frac{4}{5} S^z(x) S^z(x+1) + \frac{1}{2} S^z(x) S^z(x+2) + \dots$$

Apêndice C

Gás de Coulomb e Grupo de Renormalização

C.1 renormalização do problema Kondo

C.1.1 problema de 1 canal

A ação do problema Kondo (equação 2.42) é dada por:

$$S = S_0 + i\sqrt{2\pi\bar{g}} \sum_j \left(\hat{\theta}(j) + \hat{\phi}(j) \right) q(j) + N \ln y$$

ou na representação do gás de Coulomb (equação 2.43) :

$$S_{ef} = \bar{g}^2 \sum_{i>j} \ln |r_{ij}| q(i) q(j) + N \ln y$$

onde $q(i) = \pm 1$, sendo que eles obrigatoriamente se alternam no tempo (porque estão ligados a inversão de um spin).

O primeiro passo da renormalização é a mudança geral de escala. Isso é trivial no espaço de momentos, seguindo a notação de Shankar, vamos dividir os modos bosônicos em modos de alta frequência e modos de baixa frequência:

$$S = S_{<} + S_{>}$$

Integrar $S_{>}$ é bastante simples. Decompondo em componentes holonômicas e anti-holonômicas, a integral será do tipo:

$$\begin{aligned} \langle S_{>} \rangle &= -\frac{\bar{g}^2}{\pi} \sum_{i \neq j} q(i) q(j) \int dk \int d\omega \frac{1 - \cos(\omega \Delta \tau)}{k^2 + \omega^2} + \\ &\quad -\frac{i\bar{g}^2}{\pi} \sum_{i \neq j} q(i) q(j) \int dk \int d\omega \frac{1 - \cos(\omega \Delta \tau)}{k^2 + \omega^2} \frac{\omega}{k} \end{aligned}$$

onde os limites de integração são sobre os modos rápidos. Em coordenadas polares temos:

$$\begin{aligned} \langle S_{>} \rangle &= -\frac{\bar{g}^2}{\pi} \sum_{i \neq j} q(i) q(j) \int_{\Lambda}^{\Lambda+\delta\Lambda} d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \frac{1-\cos(\Delta\tau\rho\sin(\theta))}{\rho} + \\ &\quad -\frac{i\bar{g}^2}{\pi} \sum_{i \neq j} q(i) q(j) \int_{\Lambda}^{\Lambda+\delta\Lambda} d\rho \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta \frac{1-\cos(\Delta\tau\rho\sin(\theta))}{\rho} \tan(\theta) \end{aligned}$$

A integral em ρ é trivial:

$$\begin{aligned} \langle S_{>} \rangle &= -\frac{\bar{g}^2}{\pi} \frac{\delta\Lambda}{\Lambda} \sum_{i \neq j} q(i) q(j) \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta (1 - \cos(\Delta\tau\Lambda \sin(\theta))) + \\ &\quad -\frac{i\bar{g}^2}{\pi} \frac{\delta\Lambda}{\Lambda} \sum_{i \neq j} q(i) q(j) \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta (1 - \cos(\Delta\tau\Lambda \sin(\theta))) \tan(\theta) \end{aligned}$$

Usando que: $\Lambda\Delta\tau = 2\pi n$, onde n é um inteiro, isso imediatamente implica que a segunda integral angular seja nula por simetria em θ . Por outro lado a primeira integral se reduz a:

$$\langle S_{>} \rangle = -\frac{2\bar{g}^2}{\pi} \frac{\delta\Lambda}{\Lambda} \sum_{i \neq j} q(i) q(j) \int_0^{\pi/2} d\theta (1 - \cos(2\pi n \sin(\theta))) \cong -\bar{g}^2 \frac{\delta\Lambda}{\Lambda} \sum_{i \neq j} q(i) q(j) \quad (\text{C.1})$$

para $n \gg 1$ (os *kinks* estão bem separados no tempo).

Pela condição de neutralidade:

$$\sum_{ij} q(i) q(j) = \sum_i q(i)^2 + \sum_{i \neq j} q(i) q(j) = 0 \quad (\text{C.2})$$

$$\langle S_{>} \rangle = \bar{g}^2 \frac{\delta\Lambda}{\Lambda} \sum_i q(i)^2 = \bar{g}^2 \frac{\delta\Lambda}{\Lambda} N$$

Vamos renormalizar a ação livre:

$$S_{0,<} = \sum_{k>0} \sum_{\omega} \left(k + i\omega \right) \phi^\dagger(k, \omega) \phi(k, \omega) + \left(k - i\omega \right) \varphi^\dagger(k, \omega) \varphi(k, \omega)$$

que em coordenadas polares se escreve como:

$$S_{0,<} = \sum_{\rho} \sum_{\theta} \rho e^{i\theta} \phi^\dagger(\rho, \theta) \phi(\rho, \theta) + \rho e^{-i\theta} \varphi^\dagger(\rho, \theta) \varphi(\rho, \theta)$$

Para reconstituir o *cut-off* original devemos multiplicar ρ por $\xi = 1 - \frac{\delta\Lambda}{\Lambda} = 1 - dl$, o que nos obriga a re-escrever o campo bosônico lento como:

$$\phi(\rho, \theta) = \frac{\phi(\hat{\rho}, \theta)}{\xi^{1/2}}$$

claramente para que o produto escalar $k\Delta x + \omega\Delta\tau = r\rho \sin(\theta + \varphi)$ fique invariante devemos re-escalar o espaço real para:

$$r = \frac{r'}{\xi}$$

Considerando todos esses fatores, os campos no espaço real re-escalam:

$$\hat{\phi}_<(j) = \hat{\phi}\left(\frac{j}{\xi}\right) \quad e \quad \hat{\theta}_<(j) = \hat{\theta}\left(\frac{j}{\xi}\right)$$

$$z = y^N e^{-S_0, <-S_1, <} \langle e^{-S} \rangle = y^N e^{-S_0 - \tilde{S}_1} e^{-\bar{g}^2 N dl}$$

onde:

$$\tilde{S}_1 = ij \sum_j \left(\hat{\theta}_<(j) + \hat{\phi}_<(j) \right) q(j) = ij \sum_j \left(\hat{\theta}\left(\frac{j}{\xi}\right) + \hat{\phi}\left(\frac{j}{\xi}\right) \right) q\left(\frac{j}{\xi}\right)$$

A ação efetiva que surge é simplesmente:

$$\tilde{S}_{ef} = \bar{g}^2 \sum_{i>j} \ln(r) q(i) q(j) + N \ln y$$

que tem a mesma forma original já que tanto S_0 e S_1 foram renormalizados. Usando isso re-escrevemos a função de partição:

$$z = y^N e^{-S_0 - S_1} e^{-\bar{g}^2 N dl} \cong y^N e^{-S_0 - S_1} (1 - \bar{g}^2 dl)^N$$

Para completar a renormalização temos que incluir a integração (soma) sobre as diversas configurações:

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(y(1 - \bar{g}^2 dl))^N}{N!} \int \prod_{i=1}^N d\tau_i e^{-S}$$

Aqui é o ponto em que entra a dimensionalidade do problema, no caso como nós só temos um spin só existe uma coordenada possível para os vórtices (*kinks*):

$$d\tau_i = \frac{d\tau_i}{\xi} = \frac{d\tau_i}{(1 - dl)} \Rightarrow d\tau_i \cong (1 + dl) d\tau_i$$

$$Z = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{(y(1 - \bar{g}^2 dl)(1 + dl))^N}{N!} \int \prod_{i=1}^N d\tau_i e^{-S}$$

Em ordem mais baixa em dl :

$$\dot{y} = y (1 + (1 - \bar{g}^2) dl) \Rightarrow \frac{dy}{dl} = (1 - \bar{g}^2) y \quad (\text{C.3})$$

Substituindo o valor de $\bar{g} = 1 - \frac{J_z}{2\pi}$, obtemos a equação de RG para a fugacidade ($y = \frac{J_\perp}{2}$):

$$\frac{dy}{dl} = \left(\frac{J_z}{\pi} - \frac{J_z^2}{4\pi^2} \right) y$$

Note que eu usamos explicitamente que só existiam cargas $q = \pm 1$. Em verdade, a forma mais geral deve incluir a possibilidade de termos cargas mais altas, voltando a C.2:

$$\sum_{ij} q(i) q(j) = \sum_i q(i)^2 + \sum_{i \neq j} q(i) q(j) = 0$$

Vamos separar a fugacidade em função de cada valor de carga e também a integração dos modos rápidos devido a esses diferentes tipos:

$$\sum_{i \neq j} q(i) q(j) = - \sum_i q(i)^2 = \sum_e e^2 N(e)$$

onde $N(e)$ é o numero de partículas com a carga e . Ao fazermos isso encontramos a equação de renormalização da fugacidade em função do valor da carga:

$$\dot{y}(e) = y(e) (1 + (1 - \bar{g}^2 e^2) dl) \Rightarrow \frac{dy(e)}{dl} = (1 - \bar{g}^2 e^2) y(e)$$

O que implica que a fugacidade de cargas maiores que 1 renormaliza para zero. Precisamos levar esse tipo de resultado em conta porque nos problemas de rede, apesar de no começo do processo de renormalização não termos cargas mais altas, elas podem ser geradas pela renormalização.

O passo seguinte é estudar o que ocorre quando temos cargas próximas, note que usamos explicitamente que todas as partículas (*kinks*) estavam bem separados no espaço-tempo (na equação C.1). Devemos considerar agora a possibilidade de fundirmos ou aniquilarmos duas partículas.

Em ordem mais baixa nós só precisamos considerar a possibilidade de que em uma dada configuração só exista um par próximo (usando a linguagem de [89]). Ou seja, existe um par de partículas que se encontra a uma distância menor que a “nova menor escala” $\tau + \delta\tau$, que introduzimos ao reduzirmos o *cut-off*. Fica bastante claro que a renormalização da fugacidade é obtida diretamente da renormalização da função de correlação de dois pontos, o que estamos fazendo agora é obter a correção a esta renormalização imposta pela função de correlação de 4 pontos quando dois desses pontos se encontram a uma distância menor que a “nova menor escala”.

O problema Kondo apresenta uma simplificação que é a imposição da alternância de cargas. Ou seja, a única possibilidade de duas partículas estarem a uma distância menor que $\delta\tau$ é que elas se-

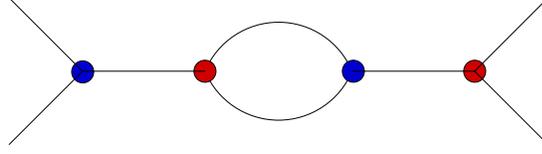


Figura C.1: correção de primeira ordem devido a polarização do vácuo.

jam alternadas criando uma partícula composta de carga nula. No processo de renormalização esse mecanismo altera tanto a fugacidade do gás como a “constante dielétrica” do meio, por que devemos compensar a retirada do par mudando a constante de acoplamento das demais cargas. Podemos dar uma interpretação pictórica a esse processo, estamos incluindo (ou melhor, retirando) correções de pares de partículas “virtuais” a interação de dois vértices do campo Gaussiano (ou partículas do gás de Coulomb).

Para poder usar o resultado que estamos para derivar nos problemas posteriores, vamos estudar a ação em sua forma mais geral.

$$S_{eff} = \sum_{i,j} \ln(r) [g_1 m(x_i, \tau_i) m(x_j, \tau_j) + g_2 e(x_i, \tau_i) e(x_j, \tau_j)] - i\sqrt{g_1 g_2} \varphi_{i,j} e(x_i, \tau_i) m(x_j, \tau_j)$$

Ou em termos da ação bosônica:

$$S = S_0 + i\sqrt{2\pi g_1} \sum_j \hat{\theta}(j) m(j) - i\sqrt{2\pi g_2} \sum_j \hat{\phi}(j) e(j)$$

onde e e m são inteiros quaisquer.

Vamos separar a soma em função do único par próximo (*closed pair*) que temos (por hipótese). Digamos que eles estejam nas posições \vec{x} e \vec{y}

$$\begin{aligned} S_{eff} = & \sum_{\vec{r}_i, \vec{r}_j \neq \vec{x}, \vec{y}} \ln(r_{ij}) [g_1 m(x_i, \tau_i) m(x_j, \tau_j) + g_2 e(x_i, \tau_i) e(x_j, \tau_j)] - i\sqrt{g_1 g_2} \varphi_{i,j} e(\vec{r}_i) m(\vec{r}_j) + \\ & \sum_{\vec{r}_i \neq \vec{x}, \vec{y}} \ln(r_{ix}) [g_1 m(\vec{r}_i) m(\vec{x}) + g_2 e(\vec{r}_i) e(\vec{x})] - i\sqrt{g_1 g_2} (\varphi_{i,x} e(\vec{r}_i) m(\vec{x}) + \varphi_{x,i} m(\vec{r}_i) e(\vec{x})) + \\ & \sum_{\vec{r}_i \neq \vec{x}, \vec{y}} \ln(r_{iy}) [g_1 m(\vec{r}_i) m(\vec{y}) + g_2 e(\vec{r}_i) e(\vec{y})] - i\sqrt{g_1 g_2} (\varphi_{i,y} e(\vec{r}_i) m(\vec{y}) + \varphi_{y,i} m(\vec{r}_i) e(\vec{y})) + \\ & \ln(r_{yx}) [g_1 m(\vec{y}) m(\vec{x}) + g_2 e(\vec{y}) e(\vec{x})] - i\sqrt{g_1 g_2} \varphi_{y,x} e(\vec{y}) m(\vec{x}) - i\sqrt{g_1 g_2} \varphi_{x,y} m(\vec{y}) e(\vec{x}) \end{aligned}$$

Usamos o fato que o par se aniquila ($m(\vec{x}) = -m(\vec{y})$ e $e(\vec{x}) = -e(\vec{y})$)

$$\begin{aligned}
S_{eff} = & \sum_{\vec{r}_i, \vec{r}_j \neq \vec{x}, \vec{y}} \ln(r_{ij}) [g_1 m(x_i, \tau_i) m(x_j, \tau_j) + g_2 e(x_i, \tau_i) e(x_j, \tau_j)] - i\sqrt{g_1 g_2} \varphi_{i,j} e(\vec{r}_i) m(\vec{r}_j) + \\
& \sum_{\vec{r}_i \neq \vec{x}, \vec{y}} [\ln(r_{ix}) - \ln(r_{iy})] [g_1 m(\vec{r}_i) m(\vec{x}) + g_2 e(\vec{r}_i) e(\vec{x})] + \\
& \sum_{\vec{r}_i \neq \vec{x}, \vec{y}} -i\sqrt{g_1 g_2} ((\varphi_{i,x} - \varphi_{i,y}) e(\vec{r}_i) m(\vec{x}) + (\varphi_{x,i} - \varphi_{y,i}) m(\vec{r}_i) e(\vec{x})) + \\
& -\ln(|\vec{x} - \vec{y}|) [g_1 (m(\vec{x}))^2 + g_2 (e(\vec{x}))^2] - i\sqrt{g_1 g_2} (\varphi_{y,x} + \varphi_{x,y}) e(\vec{y}) m(\vec{x})
\end{aligned}$$

Passamos para coordenadas relativas:

$$\vec{R} = \frac{\vec{x} + \vec{y}}{2}$$

$$\vec{r} = \frac{\vec{x} - \vec{y}}{2}$$

e expandimos as diversas funções em $|\vec{r}| \ll 1$:

$$\begin{aligned}
\ln(r_{ix}) - \ln(r_{iy}) & \cong 2 \frac{\vec{r} \cdot (\vec{r}_i - \vec{R})}{|\vec{r}_i - \vec{R}|^2} \\
\varphi_{i,x} - \varphi_{i,y} & \cong \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_x) \times (\vec{r}_i - \vec{r}_y)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_x| |\vec{r}_i - \vec{r}_y|} = \frac{(\vec{r}_i - \vec{R} - \vec{r}) \times (\vec{r}_i - \vec{R} + \vec{r})}{|\vec{r}_i - \vec{R} - \vec{r}| |\vec{r}_i - \vec{R} + \vec{r}|} \\
& \cong 2 \frac{(\vec{r}_i - \vec{R}) \times \vec{r}}{|\vec{r}_i - \vec{R}|^2} \\
\varphi_{a,b} & = \pi + \varphi_{b,a}
\end{aligned}$$

Definindo a função de aniquilação de par:

$$\begin{aligned}
A(\vec{R}, \vec{r}) = & 2 \sum_{\vec{r}_i \neq \vec{x}, \vec{y}} \frac{\vec{r} \cdot (\vec{r}_i - \vec{R})}{|\vec{r}_i - \vec{R}|^2} [g_1 m(\vec{r}_i) m(\vec{x}) + g_2 e(\vec{r}_i) e(\vec{x})] \\
& - 2i\sqrt{g_1 g_2} \sum_{\vec{r}_i \neq \vec{x}, \vec{y}} \frac{(\vec{r}_i - \vec{R}) \times \vec{r}}{|\vec{r}_i - \vec{R}|^2} (e(\vec{r}_i) m(\vec{x}) + m(\vec{r}_i) e(\vec{x}))
\end{aligned}$$

Finalmente podemos expandir a função de partição até segunda ordem em \vec{r} :

$$z = ly^N e^{S_{ef}} \left[1 + A(\vec{R}, \vec{r}) + \frac{1}{2} A^2(\vec{R}, \vec{r}) + \dots \right] \quad (\text{C.4})$$

Vamos voltar agora ao problema Kondo. Obviamente os termos com rotacionais são nulos, porque

todos os vetores são colineares. Com isso $A(R, r)$ se reduz a:

$$A(R, r) = 2 \sum_{r_i \neq x, y} \frac{r \cdot (r_i - R)}{|r_i - R|^2} [g_1 + g_2] q(r_i) q(x)$$

Devemos agora integrar sobre todo r e R , já que todas essas configurações levam a mesma ação efetiva renormalizada \hat{S}_{eff} , onde desconsideramos a energia interna do dipolo.

Em modelos mais gerais, o termo linear em r normalmente é nulo. Isto porque para uma dada configuração podemos escrever a mesma mas com o sinal de $q(x)$ invertido. É isso que acontece por exemplo no problema da impureza em um líquido de Luttinger estudado por Kane e Fisher. A correção para as interações aparece apenas em segunda ordem. No problema Kondo isso não acontece. Restrição de que as cargas sejam alternadas no tempo faz com que o termo de primeira ordem não seja nulo.

$$\hat{z} = ly^N e^{-\hat{S}_{eff}} \left[1 + 2 [g_1 + g_2] q(x) \sum_{r_i \neq x, y} \int_l^{l+dl} dr \int dR \frac{r}{|r_i - R|} q(r_i) + \dots \right]$$

e a integral em R é definida em todo o espaço a menos de discos de raio l em torno de cada partícula.

$$\hat{z} = y^N e^{-\hat{S}_{ef}} \left[1 + 2 [g_1 + g_2] q(x) dl \sum_{r_i \neq x, y} q(r_i) \int dR \frac{1}{|r_i - R|} \right]$$

integrando sobre todos os tempos e usando o fato que as cargas devem se alternar no tempo (veja apêndice C.2 para os detalhes):

$$\hat{z} = y^N e^{-\hat{S}_{ef}} \left[1 - 4 [g_1 + g_2] dl \sum_{r_i, r_j \neq x, y} \ln(|r_i - r_j|) q(r_i) q(r_j) \right]$$

Devemos somar sobre as configurações com $N-2$ partículas, onde não há aniquilação:

$$z = y^{N-2} e^{-\hat{S}_{ef}} \left[1 + y^2 - 4y^2 [g_1 + g_2] dl \sum_{r_i, r_j \neq x, y} \ln(|r_i - r_j|) q(r_i) q(r_j) \right]$$

Considerando $y \ll 1$ e re-exponenciando:

$$\sum_{r_i \neq r_j \neq x, y} \ln |r_i - r_j| ((g_1 + g_2) - 4y^2 (g_1 + g_2) dl) q(r_i) q(r_j)$$

o que implica nas equações de renormalização para as interações:

$$(\tilde{g}_1 + \tilde{g}_2) = (g_1 + g_2) - 4y^2 (g_1 + g_2) dl$$

$$\frac{d(g_1 + g_2)}{dl} = -4y^2 (g_1 + g_2)$$

Para o problema Kondo $g = g_1 = g_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{J}{2\pi}\right)^2$

$$\frac{dg}{dl} = -4y^2 g$$

$$\frac{d}{dl} \left(\frac{J}{\pi} - \frac{J^2}{4\pi^2} \right) = 4y^2 \left(1 - \frac{J}{\pi} + \frac{J^2}{4\pi^2} \right)$$

Identificando $J_{\parallel} = \frac{J}{\pi}$ (ou melhor ρJ_{\parallel}), $\bar{\varepsilon} = 2J_{\parallel} - \frac{J_{\parallel}^2}{2}$, $y = \frac{J_{\perp}}{2}$:

$$\frac{d}{dl} \left(2J_{\parallel} - \frac{J_{\parallel}^2}{2} \right) = (J_{\perp})^2 \left(2 - 2J_{\parallel} + \frac{J_{\parallel}^2}{2} \right)$$

$$\frac{d\bar{\varepsilon}}{dl} = \frac{1}{2} J_{\perp}^2 (2 - \bar{\varepsilon})$$

que é a equação que encontramos no artigo de Leggett et al. [51, eq. 3.84] para a segunda equação de RG do problema Kondo.

Apesar de não ser necessário para o RG do problema Kondo, vamos calcular a correção de segunda ordem as interações.

Integrado o termo de segunda ordem em r :

$$2[g_1 + g_2]^2 q(x)^2 \sum_{r_i, r_j \neq x, y} \int dr \int dR \frac{r^2}{|r_i - R| \cdot |r_j - R|} q(r_i) q(r_j)$$

obtemos:

$$4[g_1 + g_2]^2 l^2 dl q(x)^2 \sum_{r_i, r_j \neq x, y} \int dR \frac{1}{|r_i - R| \cdot |r_j - R|} q(r_i) q(r_j)$$

Para $i \neq j$:

$$\int dR \frac{1}{|r_i - R|} \frac{1}{|r_j - R|} \cong -\frac{2}{l} \ln |r_i - r_j|$$

enquanto para $i = j$

$$\int dR \frac{1}{|r_i - R|^2} \cong -\frac{2}{l}$$

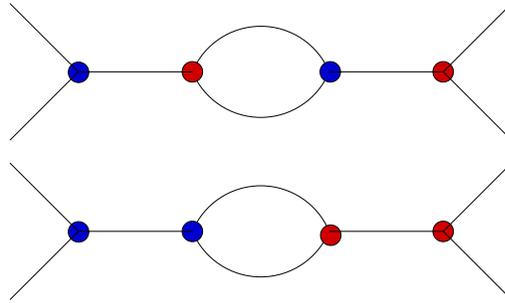


Figura C.2: quando não há restrições sobre o ordenamento das cargas os diagramas se cancelam.

$$-8 [g_1 + g_2]^2 dl q(x)^2 \left((N - 2) + \sum_{r_i \neq r_j \neq x, y} \ln |r_i - r_j| q(r_i) q(r_j) \right)$$

Que novamente iria nos permitir escrever as equações de RG para as constantes de acoplamento.

Em resumo, quando não existe imposições sobre a ordem das cargas o termo de primeira ordem na expansão de dipolos é nulo. Isso se deve ao fato de termos de somar sobre as duas possíveis configurações do par que se aniquila $(+, -)$ ou $(-, +)$, o que cancela a renormalização. Em termos esquemáticos, temos dois diagramas que se cancelam.

Por outro lado, quando existe uma imposição, como no caso do problema Kondo, o segundo diagrama não existe e assim o termo de primeira ordem não se cancela.

C.1.2 problema de 2 canais

O gás de Coulomb que nos temos é um gás com carga elétrica e magnética,

$$S_{ef} = \sum_{i,j} \ln(r) \left(\frac{\kappa^2}{g} m(\tau_i) m(\tau_j) + g e(\tau_i) e(\tau_j) \right).$$

A carga magnética obrigatoriamente se alterna no tempo, enquanto a carga elétrica pode assumir qualquer configuração.

A equação de renormalização da fugacidade do problema de dois canais é exatamente a mesma que obtivemos para o problema Kondo (eq. 2.45). Logo não precisamos considerar o caso de fusão de partículas, porque cargas maiores que 1 renormalizam para zero.

Esse problema já foi considerado por Kane e Fisher[41] no contexto de impurezas em um líquido de Luttinger e as equações.

É trivial obter a equação da fugacidade a partir dos resultados do parágrafo anterior, usando a eq. 2.45:

$$\frac{dy}{dl} = \left(1 - \frac{1}{2} \left(1 - \frac{J_z}{\pi} \right)^2 - \frac{1}{2} \right) y$$

$$\frac{dy}{dl} = \left[\frac{J_z}{\pi} - \frac{1}{2} \left(\frac{J_z}{\pi} \right)^2 \right] y$$

Para a renormalização da interação efetiva devemos voltar a equação C.4, onde:

$$A_+(R, r) = 2 \sum_{r_i \neq x, y} \frac{r_i (r_i - R)}{|r_i - R|^2} \left[\frac{\kappa^2}{g} m(r_i) m(x) + g e(r_i) e(x) \right]$$

Como não há restrição sobre a ordem da carga elétrica, podemos considerar uma configuração do gás que seja exatamente idêntica a anterior, só que mudando o sinal de $e(x)$ e $e(y)$:

$$A_-(R, r) = 2 \sum_{r_i \neq x, y} \frac{r_i (r_i - R)}{|r_i - R|^2} \left[\frac{\kappa^2}{g} m(r_i) m(x) - g e(r_i) e(x) \right]$$

$$z = z_+ + z_- = y^N e^{-\dot{S}_{eff}} \left[e^{A_+(\vec{R}, \vec{r})} + e^{A_-(\vec{R}, \vec{r})} \right]$$

o que expandindo em primeira ordem em \vec{r} fornece:

$$z = ly^N e^{-\dot{S}_{eff}} \left[2 + \left(A_+(\vec{R}, \vec{r}) + A_-(\vec{R}, \vec{r}) \right) \right]$$

$$z = ly^N e^{-\dot{S}_{eff}} \left[2 + 4 \frac{\kappa^2}{g} \sum_{r_i \neq x, y} \frac{r_i (r_i - R)}{|r_i - R|^2} m(r_i) m(x) \right]$$

O restante do desenvolvimento é igual ao que fizemos anteriormente, o que nos leva as equações de RG:

$$\frac{d(\kappa^2)}{dl} = -8y^2 \kappa^2$$

$$\frac{dg}{dl} = 0$$

Que é o resultado de [41] para o problema de 2 impurezas. Substituindo as definições para o problema Kondo de 2 canais:

$$\frac{d \left(1 - \frac{J_z}{\pi} \right)^2}{dl} = -8y^2 \left(1 - \frac{J_z}{\pi} \right)^2$$

Identificando $J_{||} = \frac{J_z}{\pi}$, $y = \frac{J_{\perp}}{2}$:

$$\frac{d(2J_{\parallel} - J_{\parallel}^2)}{dl} = 2J_{\perp}^2 (1 - 2J_{\parallel} + J_{\parallel}^2)$$

que é o resultado de [49] (a menos de um fator 2 na definição de J_{\parallel}) para o RG do problema Kondo de 2 canais em um líquido de Luttinger.

Note que a constante de acoplamento elétrico não renormaliza em primeira ordem. O que me parece indicar o ponto de Toulouse de Emery-Kivelson, onde não há acoplamento das cargas magnéticas.

C.2 cargas ordenadas

$$\dot{z} = y^N e^{\dot{S}_{ef}} \left[1 + 2Kq(x) dl \sum_{r_i \neq x, y} q(r_i) \int dR \frac{1}{|r_i - R|} \right]$$

$$\dot{z} = y^N e^{\dot{S}_{ef}} \left[1 + 2Kq(x) dl \sum_{r_i \neq x, y} q(r_i) \sum_j \int_{r_j + \frac{l}{2}}^{r_{j+1} - \frac{l}{2}} dR \frac{1}{|r_i - R|} \right]$$

$$\dot{z} = y^N e^{\dot{S}_{ef}} \left[1 + 2K dl \sum_{r_i, r_j \neq x, y} q(r_i) q(x) \left(\ln \left| r_i - r_{j+1} + \frac{l}{2} \right| - \ln \left| r_i - r_j - \frac{l}{2} \right| \right) \right]$$

para $|r_i - r_j| \gg 1$

$$\dot{z} = y^N e^{\dot{S}_{ef}} \left[1 + 2K dl \sum_{r_i \neq r_j} q(r_i) q(x) (\ln |r_i - r_{j+1}| - \ln |r_i - r_j|) \right]$$

como as cargas devem ser alternadas no tempo $q(x) = q(r_j)$, o que possibilita reescrevermos a soma em r_i e r_j como:

$$\dot{z} = y^N e^{\dot{S}_{ef}} \left[1 - 2K dl \sum_{r_i \neq r_j} q(r_i) q(r_j) \ln |r_i - r_j| + 2K dl \sum_{r_i \neq r_j} q(r_i) q(r_j) \ln |r_i - r_{j+1}| \right]$$

$$\dot{z} = y^N e^{\dot{S}_{ef}} \left[1 - 2K dl \sum_{r_i \neq r_j} q(r_i) q(r_j) \ln |r_i - r_j| - 2K dl \sum_{r_i \neq r_j} q(r_i) q(r_{j+1}) \ln |r_i - r_{j+1}| \right]$$

$$\dot{z} = y^N e^{\dot{S}_{eff}} \left[1 - 4K dl \sum_{r_i \neq r_j} q(r_i) q(r_j) \ln |r_i - r_j| \right]$$

C.3 ação efetiva com variável complexa

Definição:

$$\ln z = \ln |z| + i \arg z$$

$$\ln (z^a \cdot \bar{z}^b) = (a + b) \ln |z| + ai \arg z + bi \arg \bar{z}$$

usando que $\arg \bar{z} = 2\pi - \arg z$

$$\ln (z^a \cdot \bar{z}^b) = (a + b) \ln |z| + (a - b) i \arg z + const.$$

definindo:

$$\frac{g_1}{2} = a + b \quad e \quad \frac{g_2}{2} = a - b$$

$$\ln (z^a \cdot \bar{z}^b) = \frac{g_1}{2} \ln |z| + \frac{g_2}{2} i \arg z$$

A ação efetiva da rede de Kondo é:

$$\bar{S}_{eff} = \sum_{ij} \ln [z_{ij} \cdot \bar{z}_{ij}] \left(\frac{g_1}{4} m(z_i) m(z_j) + \frac{g_2}{4} e(z_i) e(z_j) \right) + \ln \left[\frac{z_{ij}}{\bar{z}_{ij}} \right] \left(\frac{\sqrt{g_1 g_2}}{2} m(z_i) e(z_j) \right)$$

com $g_1 = \left(1 - \frac{J}{\pi}\right)^2$ e $g_2 = 1$

C.4 integração da função de aniquilação

C.4.1 termo de primeira ordem

$$\int dx A(x, y) = \int dx \sum_{i \neq (x, y)} \left(\frac{\alpha_{ix}}{z_{ix}} - \frac{\beta_{ix}}{\bar{z}_{ix}} \right)$$

$$\int dx \frac{1}{z_{ix}} = \int_0^\infty d\rho \int_0^{2\pi} d\theta \rho \frac{1}{\rho e^{i\theta}} = \int_0^\infty d\rho \int_0^{2\pi} d\theta e^{-i\theta} = 0 \quad (\text{C.5})$$

ou seja, a correção de primeira ordem as interações é nula.

No problema Kondo nos tínhamos que $z_{ix} = \rho$

$$\int dx \frac{1}{z_{ix}} = \left(\int_0^\infty d\rho - \int_{-\infty}^0 d\rho \right) \frac{1}{\rho}$$

o que fazia aparecer a interação logarítmica entre as cargas¹. Devido a dimensionalidade 2 essa divergência não existe mais.

C.4.2 termo de segunda ordem

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int dx A(x, y)^2 &= \int dx \left[\sum_{i \neq (x, y)} \left(\frac{\alpha_{ix}}{z_{ix}} - \frac{\beta_{ix}}{\bar{z}_{ix}} \right) \right] \times \left[\sum_{j \neq (x, y)} \left(\frac{\alpha_{jx}}{z_{jx}} - \frac{\beta_{jx}}{\bar{z}_{jx}} \right) \right] \\ \frac{1}{2} \int dx A(x, y)^2 &= \int dx \left[\sum_{i, j \neq (x, y)} \left(\frac{\alpha_{ix}\alpha_{jx}}{z_{ix}z_{jx}} + \frac{\beta_{ix}\beta_{jx}}{\bar{z}_{ix}\bar{z}_{jx}} - 2\frac{\alpha_{ix}\beta_{jx}}{z_{ix}\bar{z}_{jx}} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Usando que:

$$\alpha_{ix}\alpha_{jx} = \alpha_{xx}\alpha_{ij}$$

$$\beta_{ix}\beta_{jx} = \beta_{xx}\beta_{ij}$$

e definindo:

$$\gamma_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(i) + \sqrt{g} e(i) \right) \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(j) - \sqrt{g} e(j) \right) \quad (\text{C.7})$$

$$\alpha_{ix}\beta_{jx} = \gamma_{xx}\gamma_{ij}$$

$$\frac{1}{2} \int dx A(x, y)^2 = \frac{1}{2} \int dx \left[\sum_{i, j \neq (x, y)} \left(\alpha_{xx} \frac{\alpha_{ij}}{z_{ix}z_{jx}} + \beta_{xx} \frac{\beta_{ij}}{\bar{z}_{ix}\bar{z}_{jx}} - 2\gamma_{xx} \frac{\gamma_{ij}}{z_{ix}\bar{z}_{jx}} \right) \right] \quad (\text{C.8})$$

onde:

¹veja o apêndice C.1.

$$\alpha_{xx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(x) + \sqrt{g} e(x) \right)^2$$

$$\beta_{xx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa}{\sqrt{g}} m(x) - \sqrt{g} e(x) \right)^2$$

$$\gamma_{xx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\kappa^2}{g} m(x)^2 - g e(x)^2 \right)$$

Vamos fazer a integral:

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} z_{jx}} \quad (\text{C.9})$$

É conveniente definir a variável de centro de massa:

$$z = \frac{z_i + z_j}{2} - z_x$$

$$z_{ix} = \frac{z_{ij}}{2} + z$$

$$z_{jx} = -\frac{z_{ij}}{2} + z$$

$$\int dx \frac{1}{\left(z + \frac{z_{ij}}{2}\right) \left(z - \frac{z_{ij}}{2}\right)}$$

$$z = \rho e^{i\theta}$$

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} z_{jx}} = \int d\rho d\theta \frac{\rho}{\left(\rho e^{i\theta} + \frac{z_{ij}}{2}\right) \left(\rho e^{i\theta} - \frac{z_{ij}}{2}\right)}$$

definindo $\frac{z_{ij}}{2\rho} = r$

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} z_{jx}} = \int d\rho \frac{1}{\rho} d\theta \frac{1}{(e^{i\theta} + r)(e^{i\theta} - r)}$$

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} z_{jx}} = \left(\int_{|r|<1} dr + \int_{|r|>1} dr + \int_{|r|=1} dr \right) \frac{1}{\rho} \int d\theta \frac{1}{(e^{i\theta} + \rho)(e^{i\theta} - \rho)}$$

e usando:

$$\tilde{z} = e^{i\theta} \quad d\tilde{z} = ie^{i\theta} d\theta = i\tilde{z}d\theta$$

$$\int d\theta \frac{1}{(e^{i\theta} + r)(e^{i\theta} - r)} = -i \int_{S^1} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}(\tilde{z} + r)(\tilde{z} - r)}$$

onde S^1 é o círculo unitário. Pelo teorema de resíduos, quando $|r| < 1$ a integral é nula:

$$-i \int_{S^1} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}(r + \tilde{z})(r - \tilde{z})} = -2\pi r \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{2r} - \frac{1}{2r} \right) = 0$$

Quando $|r| > 1$ existe apenas o pólo da origem:

$$-i \int_{S^1} d\tilde{z} \frac{1}{\tilde{z}(r + \tilde{z})(r - \tilde{z})} = -\frac{2\pi}{r^2}$$

Ficou faltando o caso $|r| = 1$:

$$r = e^{i\phi}$$

$$\int d\theta \frac{1}{(e^{i\theta} + e^{i\phi})(e^{i\theta} - e^{i\phi})} = \int d\theta \frac{1}{e^{i\phi} (e^{i(\theta-\phi)} + 1)(e^{i(\theta-\phi)} - 1)}$$

$$\varphi = \theta - \phi$$

$$\begin{aligned} e^{-i\phi} \int d\varphi \frac{1}{(e^{i\varphi} + 1)(e^{i\varphi} - 1)} &= e^{-i\phi} \int d\varphi \frac{e^{-i\varphi}}{(e^{i\frac{\varphi}{2}} + e^{-i\frac{\varphi}{2}})(e^{i\frac{\varphi}{2}} - e^{-i\frac{\varphi}{2}})} \\ &= e^{-i\phi} \int d\varphi \frac{e^{-i\varphi}}{4i \cos \frac{\varphi}{2} \sin \frac{\varphi}{2}} = e^{-i\phi} \int d\varphi \frac{e^{-i\varphi}}{2i \sin \varphi} \\ &= e^{-i\phi} \int d\varphi \frac{\cos \varphi - i \sin \varphi}{2i \sin \varphi} = -\frac{e^{-i\phi}}{2} \int d\varphi (i \cot \varphi - 1) = 0 \end{aligned}$$

Logo:

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} z_{jx}} = \int_0^1 d\rho \frac{1}{\rho} \left(-\frac{2\pi}{r^2} \right) = -2\pi \int_0^1 d\rho \frac{1}{\rho r^2} = -8\pi \int_0^1 d\rho \frac{\rho}{z_{ij}^2} = -\frac{8\pi}{z_{ij}^2}$$

De maneira análoga:

$$\int dx \frac{1}{\bar{z}_{ix} \bar{z}_{jx}} = -\frac{8\pi}{\bar{z}_{ij}^2} \quad (\text{C.10})$$

Vamos calcular o termo restante:

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} \bar{z}_{jx}} \quad (\text{C.11})$$

$$\int dx \frac{1}{\left(z + \frac{z_{ij}}{2}\right) \left(\bar{z} - \frac{\bar{z}_{ij}}{2}\right)} = \int d\rho d\theta \frac{\rho}{\left(\rho e^{i\theta} + \frac{z_{ij}}{2}\right) \left(\rho e^{-i\theta} - \frac{\bar{z}_{ij}}{2}\right)}$$

$$\int d\theta \frac{1}{(e^{i\theta} + r)(e^{-i\theta} - \bar{r})} = \int d\theta \frac{e^{i\theta}}{(e^{i\theta} + a)(1 - \bar{a}e^{i\theta})} = \frac{-1}{\bar{a}} \int d\theta \frac{e^{i\theta}}{(e^{i\theta} + a)\left(e^{i\theta} - \frac{1}{\bar{a}}\right)}$$

definindo $\tilde{z} = e^{i\theta}$ e $d\tilde{z} = ie^{i\theta} d\theta$

$$\frac{-1}{\bar{a}} \int d\theta \frac{e^{i\theta}}{(e^{i\theta} + a)\left(e^{i\theta} - \frac{1}{\bar{a}}\right)} = \frac{i}{\bar{a}} \int d\tilde{z} \frac{1}{\left(\tilde{z} + a\right)\left(\tilde{z} - \frac{1}{\bar{a}}\right)}$$

Se $|a| = \frac{|z_{ij}|}{2\rho} < 1$, pelo teorema de resíduos:

$$\frac{-1}{\bar{a}} \int d\theta \frac{e^{i\theta}}{(e^{i\theta} + a)\left(e^{i\theta} - \frac{1}{\bar{a}}\right)} = \frac{-2\pi}{\bar{a}} \left(\frac{1}{-a - \frac{1}{\bar{a}}} \right) = \frac{-2\pi}{|a|^2 + 1}$$

Por outro lado, para $|a| = \frac{|z_{ij}|}{2\rho} > 1$

$$\frac{-1}{\bar{a}} \int d\theta \frac{e^{i\theta}}{(e^{i\theta} + a)\left(e^{i\theta} - \frac{1}{\bar{a}}\right)} = \frac{-2\pi}{\bar{a}} \left(\frac{1}{a + \frac{1}{\bar{a}}} \right) = -\frac{2\pi}{|a|^2 + 1}$$

O caso mais simples é quando $|a| = 1$:

$$\begin{aligned} \int d\theta \frac{1}{(e^{i\theta} + a)(e^{-i\theta} - \bar{a})} &= \int d\theta \frac{1}{(e^{i\theta} + e^{i\phi})(e^{-i\theta} - e^{-i\phi})} = \int d\varphi \frac{1}{(e^{i\varphi} + 1)(e^{-i\varphi} - 1)} \\ &= \int d\varphi \frac{-1}{4i \sin \frac{\varphi}{2} \cos \frac{\varphi}{2}} = \frac{i}{2} \int d\varphi \frac{1}{\sin \varphi} = 0 \end{aligned}$$

Juntando esses resultados:

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} \bar{z}_{jx}} = -8\pi \int_0^\infty d\rho \frac{\rho}{|z_{ij}|^2 + 4\rho^2}$$

Usando que:

$$\int dy \frac{y}{a^2 + y^2} = \frac{1}{2} \ln |y^2 + a^2|$$

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} \bar{z}_{jx}} = -\frac{\pi}{2} \int_0^L dy \frac{y}{|z_{ij}|^2 + y^2} = -\frac{\pi}{4} \ln |y^2 + |z_{ij}^2||_0^L$$

$$\int dx \frac{1}{z_{ix} \bar{z}_{jx}} = \frac{\pi}{2} \ln |z_{ij}| - \frac{\pi}{2} \ln L \quad (\text{C.12})$$

onde L é o tamanho do sistema.

$$\frac{1}{2} \int dx A(x, y)^2 = \left[-\pi \sum_{i,j \neq (x,y)} \left(\frac{4\alpha_{xx}}{z_{ij}^2} \alpha_{ij} + \frac{4\beta_{xx}}{\bar{z}_{ij}^2} \beta_{ij} + \frac{\gamma_{xx}}{2} \gamma_{ij} (\ln |z_{ij}| - \ln L) \right) \right]$$

Se o gás é bastante diluído podemos desprezar os termos quadráticos

$$\frac{1}{2} \int dx A(x, y)^2 = -\frac{\pi}{2} \gamma_{xx} \sum_{i,j \neq (x,y)} \gamma_{ij} [\ln |z_{ij}| - \ln L] \quad (\text{C.13})$$

C.5 renormalização do problema de 2-LLs

O ponto de partida é como sempre a função de partição do problema. Vamos considerar que S_1 é uma perturbação em λ .

$$Z = \int D\phi e^{-S_0 - \lambda S_1}$$

Seguindo a receita geral de renormalização [80, 64], vamos dividir a integral funcional em campos rápidos ($>$) e campos lentos ($<$). Vamos supor que S_1 mistura modos rápidos e modos lentos.

$$Z = \int D\phi_{<} e^{-S_{0,<}} D\phi_{>} e^{-S_{0,>} - \lambda S_1}$$

$$Z = \int D\phi_{<} e^{-S_{0,<}} \langle e^{-\lambda S_1} \rangle_{>}$$

Usando a identidade $\exp(\ln(x)) = x$ e expandindo a segunda exponencial até segunda ordem em λ , obtemos:

$$Z = \int D\phi_{<} e^{-S_{0,<}} \exp \left(\ln Z_{0,>} + \ln \left[\left\langle 1 - \lambda S_1(1) + \frac{\lambda^2}{2} S_1(1) S_1(2) \right\rangle_{>} \right] \right)$$

$$Z = \int D\phi_{<} e^{-S_{0,<}} \exp \left(\ln Z_{0,>} + \ln \left[1 - \lambda \langle S_1(1) \rangle_{>} + \frac{\lambda^2}{2} \langle S_1(1) S_1(2) \rangle_{>} \right] \right)$$

Finalmente expandimos o logarítmo e mantemos os termos de até segunda ordem:

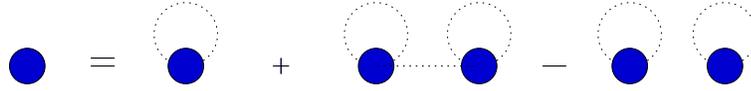


Figura C.3: expansão de cumulantes.

$$Z = \int D\phi_{<} e^{-S_{0,<}} \exp \left(\ln Z_{0,>} - \lambda \langle S_1(1) \rangle_{>} + \frac{\lambda^2}{2} (\langle S_1(1) S_1(2) \rangle_{>} - \langle S_1(1) \rangle_{>} \langle S_1(2) \rangle_{>}) \right)$$

Isso nos leva a famosa expansão de cumulantes:

$$\frac{Z}{Z_{0,>}} = \int D\phi_{<} e^{-S_{0,<} - \lambda \langle S_1(1) \rangle_{>} + \frac{\lambda^2}{2} (\langle S_1(1) S_1(2) \rangle_{>} - \langle S_1(1) \rangle_{>} \langle S_1(2) \rangle_{>})}$$

A expansão de cumulantes nada mais é que a renormalização da energia livre[93, pp. 115]. Na figura C.3 representamos a expansão de cumulantes até segunda ordem, nela o círculos representam vértices e as linhas tracejadas o propagador dos modos rápidos.

A função W (energia livre) é a função geradora dos diagramas conexos.

$$W_{1c} = \langle S_1(1) \rangle$$

$$W_{2c} = \langle S_1(1) S_1(2) \rangle - \langle S_1(1) \rangle \langle S_1(2) \rangle$$

Seguindo essa notação, definimos a função:

$$W_{2c,>} = \langle S_1(1) S_1(2) \rangle_{>} - \langle S_1(1) \rangle_{>} \langle S_1(2) \rangle_{>}$$

A figura C.3 é muito clara: estamos introduzindo na renormalização do operador de vértice apenas a energia interna do complexo de dois vértices que não podem ser distinguidos na nova menor escala. A subtração dos termos tipo média ao quadrado é porque estamos desconsiderando a auto-energia dos vértices originais.

Passemos a estudar o caso específico do problema de 2-LLs:

$$\lambda S_1 = \int dx y \cos \left(\sqrt{2\pi g} \phi(x) \right) \cos \left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}} \theta(x) \right) + G \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi(x) \right) + \tilde{G} \cos \left(\sqrt{\frac{8\pi}{g}} \theta(x) \right)$$

O termo $\langle S_1(1) \rangle_{>}$, como veremos em um instante, nos dará a renormalização da dimensão dos operadores. Inicialmente, considere:

$$\begin{aligned}\left\langle \cos \left(\sqrt{8\pi} \phi(x) \right) \right\rangle_{>} &= \frac{1}{2} \left\langle e^{i\sqrt{8\pi}g\phi(x)} + e^{-i\sqrt{8\pi}g\phi(x)} \right\rangle_{>} \\ \left\langle e^{i\sqrt{8\pi}g\phi(x)} \right\rangle_{>} &= \left\langle e^{i\sqrt{8\pi}g\phi_L(x)} \right\rangle_{>} \left\langle e^{i\sqrt{8\pi}g\phi_R(x)} \right\rangle_{>}\end{aligned}$$

Das definições dos campos e do propagador, calculamos a integral gaussiana:

$$\begin{aligned}\left\langle e^{i\sqrt{8\pi}g\phi_R(x)} \right\rangle_{>} &= e^{i\sqrt{8\pi}g\phi_{R,<}(x)} e^{-\frac{1}{\pi}g \int d\omega \int dq \frac{1}{q+i\omega}} \\ \left\langle e^{i\sqrt{8\pi}g\phi_L(x)} \right\rangle_{>} &= e^{i\sqrt{8\pi}g\phi_{L,<}(x)} e^{-\frac{1}{\pi}g \int d\omega \int dq \frac{1}{q-i\omega}}\end{aligned}$$

O que nos leva a:

$$\left\langle e^{i\sqrt{8\pi}g\phi(x)} \right\rangle_{>} = e^{i\sqrt{8\pi}g\phi_{<}(x)} e^{-\frac{2}{\pi}g \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta \int_{\Lambda}^{\Lambda+\delta\Lambda} d\rho \frac{1}{\rho}}$$

Definindo: $dl = \frac{\delta\Lambda}{\Lambda}$

$$\left\langle e^{i\sqrt{8\pi}g\phi(x)} \right\rangle_{>} = e^{i\sqrt{8\pi}g\phi_{<}(x)} e^{-2dl}$$

Ou seja:

$$\left\langle \cos \left(\sqrt{8\pi}g\phi(x) \right) \right\rangle_{>} = \cos \left(\sqrt{8\pi}g\phi_{<}(x) \right) e^{-2gdl}$$

Falta ainda a renormalização das coordenadas:

$$\int dx d\tau \cong (1 + 2dl) \int d\acute{x} d\acute{\tau}$$

O que nos leva a equação de renormalização da dimensão desse cosseno:

$$\acute{G} = (1 + 2dl) (1 - 4gdl) G = G + 2Gdl - 2gGdl$$

$$\frac{dG}{dl} = 2(1 - g)G$$

De maneira análoga para \acute{G} :

$$\frac{d\acute{G}}{dl} = 2 \left(1 - \frac{1}{g} \right) G$$

Finalmente falta calcularmos:

$$\begin{aligned}
4 \left\langle \cos \left(\sqrt{2\pi g} \phi(x) \right) \cos \left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}} \theta(x) \right) \right\rangle &= \left\langle e^{i\sqrt{2\pi} \left(\left(\sqrt{g} - \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_R(x) + \left(\sqrt{g} + \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_L(x) \right)} \right\rangle + \\
&\left\langle e^{i\sqrt{2\pi} \left(\left(-\sqrt{g} - \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_R(x) + \left(-\sqrt{g} + \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_L(x) \right)} \right\rangle + \\
&\left\langle e^{i\sqrt{2\pi} \left(\left(\sqrt{g} + \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_R(x) + \left(\sqrt{g} - \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_L(x) \right)} \right\rangle + \\
&\left\langle e^{-i\sqrt{2\pi} \left(\left(\sqrt{g} - \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_R(x) + \left(\sqrt{g} + \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_L(x) \right)} \right\rangle \\
I_1 &= \left\langle e^{i\sqrt{2\pi} \left(\left(\sqrt{g} - \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_R(x) + \left(\sqrt{g} + \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_L(x) \right)} \right\rangle
\end{aligned}$$

$$e^{i\sqrt{2\pi} \left(\left(\sqrt{g} - \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_{R,<}(x) + \left(\sqrt{g} + \frac{1}{\sqrt{g}} \right) \phi_{L,<}(x) \right)} e^{-\frac{1}{2} \left(g + \frac{1}{g} \right) dl}$$

O calculo dos demais termos é análogo e nos leva a:

$$\left\langle \cos \left(\sqrt{2\pi g} \phi(x) \right) \cos \left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}} \theta(x) \right) \right\rangle = \cos \left(\sqrt{2\pi g} \phi(x) \right) \cos \left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}} \theta(x) \right) e^{-\frac{1}{2} \left(g + \frac{1}{g} \right) dl}$$

Juntando esse resultado com a renormalização das coordenadas, encontramos a equação de renormalização de y :

$$\frac{dy}{dl} = \left(2 - \frac{1}{2} \left(g + \frac{1}{g} \right) \right) y$$

A renormalização da dimensão do operador é equivalente a re-escala global do gás de Coulomb. A expressão geral da renormalização da dimensão de um operador do tipo $\cos \left(\sqrt{2\pi g} \phi(x) \right) \cos \left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}} m \theta(x) \right)$, é:

$$\frac{dy}{dl} = \left(2 - \frac{1}{2} \left(\frac{m^2}{g} + g e^2 \right) \right) y$$

Como havíamos derivado para o gás de Coulomb.

Passemos agora a estudar as correções dos diagramas de segunda ordem. Inicialmente considere a correção dos operadores com spin conforme zero.

$$4 \left\langle \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi(x) \right) \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi(y) \right) \right\rangle_{>} = \left\langle e^{i(\sqrt{8\pi g} \phi(x) + \sqrt{8\pi g} \phi(y))} + e^{i(\sqrt{8\pi g} \phi(x) - \sqrt{8\pi g} \phi(y))} + h.c. \right\rangle_{>}$$

$$\left\langle e^{i(\sqrt{8\pi g} \phi(x) \pm \sqrt{8\pi g} \phi(y))} \right\rangle_{>} = e^{-2g(1 \pm J_0(r\Lambda))dl}$$

$$2 \left\langle \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi(x) \right) \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi(y) \right) \right\rangle_{>} = \cos \left(\sqrt{8\pi g} (\phi_{<}(x) + \phi_{<}(y)) \right) e^{-4g(1+J_0(r\Lambda))dl} + \\ \cos \left(\sqrt{8\pi g} (\phi_{<}(x) - \phi_{<}(y)) \right) e^{-4g(1-J_0(r\Lambda))dl}$$

Por outro lado:

$$\left\langle \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi(x) \right) \right\rangle_{>} \left\langle \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi(y) \right) \right\rangle_{>} = \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi_{<}(x) \right) \cos \left(\sqrt{8\pi g} \phi_{<}(y) \right) e^{-4gdl}$$

Logo:

$$W_{2c,>} = 2gG^2 dl \int dx dy J_0(r\Lambda) \cos \left(\sqrt{8\pi g} (\phi_{<}(x) - \phi_{<}(y)) \right) \\ - J_0(r\Lambda) \cos \left(\sqrt{8\pi g} (\phi_{<}(x) + \phi_{<}(y)) \right)$$

Passando para coordenadas relativas e expandindo $\phi(y)$ em série de Taylor a partir de $\phi(x)$:

$$W_{2c,>} = 2gG^2 dl (1 - 2dl) \int dx \int dr \int_0^{2\pi} d\varphi r J_0(r\Lambda) \times \\ \times \left[\cos \left(\frac{\sqrt{8\pi g}}{2} \nabla \phi(x) \cdot \vec{r} \right) - \cos \left(2\sqrt{8\pi g} (\phi(x)) \right) \right]$$

Finalmente, expandindo o cosseno para $|r| \ll 1$:

$$W_{2c,>} = 2gG^2 dl (1 - 2dl) \int dx \int dr \int_0^\pi d\varphi r J_0(r\Lambda) \times \\ \times \left[1 - 2\pi g (\nabla \phi(x) \cdot \vec{r})^2 - \cos \left(2\sqrt{8\pi g} (\phi(x)) \right) \right]$$

Mantendo apenas os termos de primeira ordem em dl

$$W_{2,>} = 2\pi g G^2 dl \int dx \int dr r J_0(r\Lambda) \left[1 - 2\pi g (\nabla \phi(x) \cdot \vec{r})^2 - \cos \left(2\sqrt{8\pi g} (\phi(x)) \right) \right]$$

Definindo:

$$A = 4\pi^2 \int dr r^3 J_0(r\Lambda) \quad \text{e} \quad B = 2\pi \int dr r J_0(r\Lambda)$$

que são constantes não universais.

$$W_{2c,>} = gG^2 dl \int dx \left[B - Ag(\nabla\phi(x))^2 - B \cos\left(2\sqrt{8\pi g}(\phi(x))\right) \right]$$

Fisicamente os termos soma e diferença geram contribuições bem distintas. O termo da diferença renormaliza a interação:

$$\frac{d \ln g}{dl} = AgG^2,$$

já o termo da soma cria um operador irrelevante (pelo menos enquanto $g > \frac{1}{2}$). Um calculo semelhante para o termo em \tilde{G} nos leva a:

$$\frac{d \ln g}{dl} = -\frac{A}{g}\tilde{G}^2.$$

Vamos finalmente calcular o termo com spin conforme ± 1 .

$$W_{2>} = \left\langle \cos\left(\sqrt{2\pi g}\phi(x)\right) \cos\left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}}\theta(x)\right) \cos\left(\sqrt{2\pi g}\phi(y)\right) \cos\left(\sqrt{\frac{2\pi}{g}}\theta(y)\right) \right\rangle_>$$

É bastante claro que precisamos calcular as seguintes médias gaussianas:

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}\left(g\pm\frac{1}{g}\right)\phi_R(x)} e^{\pm i\sqrt{2\pi}\left(g\pm\frac{1}{g}\right)\phi_R(y)} \right\rangle_> \quad \text{e} \quad \left\langle e^{i\sqrt{2\pi}\left(g\pm\frac{1}{g}\right)\phi_L(x)} e^{\pm i\sqrt{2\pi}\left(g\pm\frac{1}{g}\right)\phi_L(y)} \right\rangle_>$$

$$I_1(e(x), m(x), e(y), m(y)) = \left\langle e^{i\sqrt{2\pi}\left(\sqrt{g}e(x)+\frac{m(x)}{\sqrt{g}}\right)\phi_R(x)} e^{i\sqrt{2\pi}\left(\sqrt{g}e(y)+\frac{m(y)}{\sqrt{g}}\right)\phi_R(y)} \right\rangle_>$$

$$I_2(e(x), m(x), e(y), m(y)) = \left\langle e^{i\sqrt{2\pi}\left(\sqrt{g}e(x)+\frac{m(x)}{\sqrt{g}}\right)\phi_L(x)} e^{i\sqrt{2\pi}\left(\sqrt{g}e(y)+\frac{m(y)}{\sqrt{g}}\right)\phi_L(y)} \right\rangle_>$$

$$\begin{aligned} \ln \frac{I_1 I_2}{I_{1<} I_{2<}} &= -\left(g + \frac{1}{g}\right) \frac{dl}{2} - \frac{1}{2\pi} dl \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta \cos(r\Lambda \sin(\theta + \varphi)) \times \\ &\quad \times \left(\left(ge(x)e(y) + \frac{m(x)m(y)}{g}\right) + i(e(x)m(y) + m(x)e(y)) \cot \theta \right) \end{aligned}$$

Expandindo em dl e subtraindo os diagramas desconexos:

$$I_1 I_2 = -\frac{I_{1<}I_{2<}}{2\pi} dl \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta \cos(r\Lambda \sin(\theta + \varphi)) \times \\ \times \left(\left(ge(x)e(y) + \frac{m(x)m(y)}{g} \right) + i(e(x)m(y) + m(x)e(y)) \cot \theta \right)$$

Consideremos a situação em que $e(x) = -e(y)$ e $m(x) = -m(y)$

$$I_1 I_2 = -\frac{I_{1<}I_{2<}}{2\pi} dl (1 - 2dl) \int_0^\pi d\varphi \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta \cos(r\Lambda \sin(\theta + \varphi)) \left(\left(g + \frac{1}{g} \right) + 2ie(x)m(x) \cot \theta \right) = 0$$

Tratemos agora do caso $e(x)m(y) + m(x)e(y) = 0$ (todos os demais nos levam a operadores irrelevantes):

$$\ln \frac{I_1 I_2}{I_{1<}I_{2<}} = -\frac{1}{2} \left(g(1 + e(x)e(y)J_0(r\rho)) + \frac{(1 + m(x)m(y)J_0(r\Lambda))}{g} \right) dl$$

Expandindo para $dl \ll 1$:

$$I_1 I_2 = I_{1<}I_{2<} \left(1 - \frac{1}{2} \left(g(1 + e(x)e(y)J_0(r\rho)) + \frac{(1 + m(x)m(y)J_0(r\Lambda))}{g} \right) dl \right)$$

Subtraindo os termos desconexos:

$$(I_1 I_2)_c = (I_{1<}I_{2<})_c \left(-\frac{1}{2} \left(ge(x)e(y) + \frac{m(x)m(y)}{g} \right) J_0(r\Lambda) dl \right)$$

Dentro desse caso, podemos criar dois operadores marginais (quando $g = 1$):

$$\frac{I_{12}(1, 1, 1, -1) + I_{12}(-1, 1, -1, -1) + I_{12}(-1, -1, -1, 1) + I_{12}(1, -1, 1, 1)}{4} =$$

$$= -\frac{1}{2} \left(g - \frac{1}{g} \right) y^2 dl (1 - 2dl) C$$

$$\frac{\cos(2\sqrt{2\pi g\phi})}{2} = -\frac{1}{2} \left(g - \frac{1}{g} \right) y^2 dl (1 - 2dl) C$$

$$C = \pi \int dr r J_0(r\Lambda)$$

$$\frac{I_{12}(1, 1, -1, 1) + I_{12}(-1, 1, 1, 1) + I_{12}(-1, -1, 1, -1) + I_{12}(1, -1, -1, -1)}{4} =$$

$$= -\frac{\pi}{2} \left(g - \frac{1}{g} \right) y^2 dl (1 - 2dl) C$$

$$\frac{\cos \left(2\sqrt{\frac{2\pi}{g}}\theta \right)}{2} = \frac{1}{2} \left(g - \frac{1}{g} \right) y^2 dl (1 - 2dl) C$$

O que nos leva as equações de fusão:

$$\frac{dG}{dl} = -C \left(g - \frac{1}{g} \right) y^2$$

$$\frac{d\tilde{G}}{dl} = C \left(g - \frac{1}{g} \right) y^2$$

Juntando todas as equações de renormalização, encontramos:

$$\frac{dy}{dl} = \left(2 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{g} + g \right) \right) y \quad (\text{C.14})$$

$$\frac{d\tilde{G}}{dl} = 2 \left(1 - \frac{\kappa^2}{g} \right) \tilde{G} - C \left(g - \frac{1}{g} \right) y^2 \quad (\text{C.15})$$

$$\frac{dG}{dl} = 2(1 - g)G + C \left(g - \frac{1}{g} \right) y^2 \quad (\text{C.16})$$

$$\frac{1}{A} \frac{d \ln g}{dl} = \frac{1}{g} \tilde{G}^2 - gG^2 \quad (\text{C.17})$$

onde A e C são constantes não universais, dadas por:

$$A = 4\pi^2 \int dr r^3 J_0(r\Lambda)$$

$$C = \pi \int dr r J_0(r\Lambda)$$

O interessante é que a menos dos termos de fusão essas equações são “idênticas” as que obtivemos pela renormalização no gás de Coulomb no espaço real. Essas diferenças decorrem da subtração dos termos tipo média ao quadrado na expansão de cumulantes.

Apêndice D

Ansatz de Bethe na Cadeia de Heisenberg

Por uma questão de completeza, apresentamos agora a derivação do *ansatz* de Bethe funcional para o modelo de Heisenberg na representação de Orbach. Para o modelo fermiônico a derivação é exatamente análoga, contudo deve-se prestar atenção especial para as condições de contorno no instante da quantização dos momentos de Bethe.

D.1 formulação do Ansatz

D.1.1 hipótese de Bethe

Incorporando a constante de acoplamento J ao hamiltoniano 3.2 e escrevendo-o na base de $S^z = \sum_{i=1}^N S_i^z$, ele é quebrado em blocos de mesma componente de momento angular (H comuta com S^z). Nosso problema se reduz a diagonalizar cada um desses blocos.

Um estado, $|\Psi\rangle$, com momento angular $S^z = \frac{N}{2} - m$, tem como função de onda a superposição de exponenciais da forma: $\sum_P A_P \text{Exp}[i \sum_{j=1}^m k_{P_j} x_j]$,

$$|\Psi_m\rangle = \sum_{x_1 < x_2 < \dots < x_m} a(x_1, x_2, \dots, x_m) |x_1, x_2, \dots, x_m\rangle, \quad (\text{D.1})$$

onde k_1, k_2, \dots, k_m é um conjunto de números complexos e P é uma permutação dos m sítios x_j . Ou seja, o ket $|\Psi_m\rangle$ será dado por: com a soma sendo tomada sobre todos os arranjos de m índices sobre N sítios e $a(x)$ é dado por (D.1).¹

Devemos ressaltar que os kets $|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle$ são linearmente independentes (são autokets de S^z) e de número 2^N , que é a dimensão do espaço de Hilbert de H . Por isso formam uma base completa deste espaço. Para esclarecermos exatamente o que implica a hipótese 1, construímos 2 exemplos, $S^z = \frac{2}{2} - 1 = 0$ e $S^z = \frac{4}{2} - 2 = 0$.

¹ $|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle$ denotando que os spins localizados nas posições x_1, x_2, \dots, x_m estão invertidos.

Exemplo 1: N=2, m=1

- $|\Psi_1\rangle = A \exp[ik]|1\rangle + A \exp[2ik]|2\rangle$

Exemplo 2: N=4, m=2

- $|\Psi_2\rangle = \sum_P \{A_1 \exp[i(k_1 x_1 + k_2 x_2)] + A_2 \exp[i(k_1 x_2 + k_2 x_1)]\} |x_1 x_2\rangle$, onde P são todas as combinações de $x_1 \neq x_2$ dentro do conjunto {1,2,3,4}.

Como vemos o número total de kets que podemos construir desta forma depende de quantos conjuntos $\{k_i\}$ independentes podemos formar para dados (N,m).

D.1.2 equações do Ansatz

Antes de prosseguirmos na identificação das amplitudes $a(x_1, x_2, \dots, x_m)$, devemos re-escrever o hamiltoniano em termo dos operadores de levantamento e abaixamento da álgebra.

$$H = -\frac{N}{2} - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2} [\alpha (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z - 1] + h S_i^z \right\} \quad (\text{D.2})$$

Para escrevermos a equação de Schrödinger independente do tempo de nosso problema, vamos aplicar a H um ket arbitrário $|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle^2$.

$$\begin{aligned} H|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle &= -\frac{N}{2}|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle + N_a|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle + h(N - N_a)|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle \\ &\quad -\alpha \sum_{x'_1, \dots, x'_m} |x'_1, x'_2, \dots, x'_m\rangle, \end{aligned}$$

onde N_a é o número de vizinhos antiparalelos e $\{x'_1, x'_2, \dots, x'_m\}$ difere de $\{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ por uma troca de spins entre vizinhos, ou seja:

$$|x_1, \dots, x_i, \dots, x_m\rangle \rightarrow |x_1, \dots, x_{i+1}, \dots, x_m\rangle.$$

²Lembrando que:

$$e^+ = () \text{ e } e^- = ()$$

$$|x_1, x_2, \dots, x_m\rangle = e^+ \otimes \dots \otimes e_1^- \otimes \dots \otimes e_m^- \otimes \dots \otimes e^+$$

$$S^\pm e^\pm = 0$$

$$S^\pm e^\mp = 2e^\pm$$

$$S^z e^\pm = \pm e^\pm$$

$$\frac{1}{2}(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \begin{pmatrix} e^\pm \otimes e^\pm \\ e^\pm \otimes e^\mp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ e^\mp \otimes e^\pm \end{pmatrix}$$

$$\left[\frac{1}{2}(S_i^z S_{i+1}^z - I) + h S_i^z \right] \begin{pmatrix} e^\pm \otimes e^\pm \\ e^\pm \otimes e^\mp \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ e^\pm \otimes e^\mp \end{pmatrix} + h \begin{pmatrix} \pm e^\pm \otimes e^\pm \\ \pm e^\pm \otimes e^\mp \end{pmatrix}$$

Usando a hipótese de Bethe temos:

$$H|\Psi_m\rangle = E_m|\Psi_m\rangle$$

$$\sum_{x_1 < \dots < x_m} \left\{ \begin{aligned} & \left[\left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - m \right) \right) + N_a \right] a(x_1 \dots x_m) |x_1 \dots x_m\rangle \\ & - \alpha \sum_{x'_1 < \dots < x'_m} a(x'_1 \dots x'_m) |x'_1 \dots x'_m\rangle \end{aligned} \right\} = \sum_{x_1 < \dots < x_m} E_m a(x_1 \dots x_m) |x_1 \dots x_m\rangle.$$

Se usarmos que $N_a = \sum_{x'_1 < \dots < x'_m} 1$ e que a soma é tomada sobre todos os arranjos possíveis de m elementos, devemos reescrever a última expressão como:

$$\begin{aligned} \sum_{x_1 < \dots < x_m} \left\{ \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1 \dots x_m) + \sum_{x'_1 < \dots < x'_m} [a(x_1 \dots x_m) - \alpha a(x'_1 \dots x'_m)] \right\} \\ = \sum_{x_1 < \dots < x_m} E_m a(x_1 \dots x_m). \end{aligned}$$

Para continuarmos a usar a hipótese de Bethe desenvolveremos casos particulares e posteriormente argumentaremos como estes resultados se generalizam.

- Caso $m=1$

$$|\Psi\rangle = \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle,$$

$$H|\Psi\rangle = H \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle,$$

$$\sum_{x=1}^N \left\{ \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - 1 \right) + N_a \right) a(x)|x\rangle - \alpha \sum_{y=x-1, y \neq x}^{x+1} a(y)|y\rangle \right\} = E \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle.$$

Como o número de vizinhos antiparalelos é sempre igual a dois ($N_a = 2$), obtemos que:

$$\begin{aligned} \sum_{x=1}^N \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) a(x)|x\rangle - \alpha \sum_{x=1}^N a(x) (|x-1\rangle + |x+1\rangle) = \\ = E \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{x=1}^N \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) a(x)|x\rangle - \alpha \sum_{z=1}^N a(z+1)|z\rangle - \alpha \sum_{w=1}^N a(w-1)|w\rangle = \\ = E \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle. \end{aligned}$$

Já que z e w são índices mudos reescrevemos:

$$\begin{aligned} \sum_{x=1}^N \left\{ \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) a(x) - \alpha (a(x+1) + a(x-1)) \right\} |x\rangle = \quad (\text{D.3}) \\ = E \sum_{x=1}^N a(x)|x\rangle. \end{aligned}$$

Isto vale para cada termo da somatória, logo encontramos a equação do *ansatz* para o caso de *um único spin invertido*:

$$\left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) a(x) - \alpha (a(x+1) + a(x-1)) = E a(x).$$

- Usamos agora a forma da solução $a(x) = A e^{ikx}$.

$$\begin{aligned} EA &= \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - 1 \right) + 2 \right) A - \alpha A e^{ik} - \alpha A e^{-ik}, \quad (\text{D.4}) \\ E &= -\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - 1 \right) + 2(1 - \alpha \cos(k)). \end{aligned}$$

- Caso $m=2$

Temos de considerar dois casos distintos, se x_1 e x_2 são vizinhos ou não.

- Se $x_2 \neq x_1 + 1$

O número de spins vizinhos antiparalelos (N_a) é igual a 4 e $\binom{x_i}{2}$ denota a combinação dos x_i 2 a 2, assim:

$$E \sum_{\binom{x_i}{2}} a(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle = \sum_{\binom{x_i}{2}} \left\{ \begin{aligned} & \left(-\frac{N}{2} + 4 + 2h \left(\frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle \\ & - \alpha (a(x_1, x_2) |x_1 \pm 1, x_2\rangle + a(x_1, x_2) |x_1, x_2 \pm 1\rangle) \end{aligned} \right\}.$$

Reordenando o somatório, obtemos:

$$E \sum_{(x_i)} a(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle = \sum_{(x_i)} \left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{N}{2} + 4 + 2h \left(\frac{N}{2} - m\right)\right) a(x_1, x_2) \\ -\alpha (a(x_1 \pm 1, x_2) - a(x_1, x_2 \pm 1)) \end{array} \right\} |x_1, x_2\rangle.$$

Com isso encontramos a equação do Ansatz para 2 spins invertidos:

$$Ea(x_1, x_2) = \left(-\frac{N}{2} + 4 + 2h \left(\frac{N}{2} - m\right)\right) a(x_1, x_2) - \alpha (a(x_1 \pm 1, x_2) + a(x_1, x_2 \pm 1)). \quad (\text{D.5})$$

Escolhendo que $a(x_1, x_2) = \gamma e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + \eta e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1)}$, escrevemos a energia E como:

$$E = -\frac{N}{2} + 4 + 2h \left(\frac{N}{2} - m\right) - 2\alpha \cos(k_1) - 2\alpha \cos(k_2).$$

b) Se $x_2 = x_1 + 1$

O número de spins vizinhos antiparalelos neste caso é 2, assim:

$$\begin{aligned} E \sum_{(x_i)} a(x_1, x_1 + 1) |x_1, x_1 + 1\rangle &= \\ &= \sum_{(x_i)} \left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{N}{2} + 2 + 2h \left(\frac{N}{2} - m\right)\right) a(x_1, x_1 + 1) |x_1, x_1 + 1\rangle \\ -\alpha (a(x_1, x_1 + 1) |x_1 - 1, x_1 + 1\rangle + a(x_1, x_1 + 1) |x_1, x_1 + 2\rangle) \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Reordenando a somatória, encontramos a equação do Ansatz:

$$E \sum_{()} a(x, x + 1) |x, x + 1\rangle = \sum_{()} \left\{ \begin{array}{l} \left(-\frac{N}{2} + 2 + 2h \left(\frac{N}{2} - m\right)\right) a(x, x + 1) |x, x + 1\rangle \\ -\alpha (a(x, x + 2) |x, x + 1\rangle + a(x - 1, x + 1) |x, x + 1\rangle) \end{array} \right\},$$

$$Ea(x, x + 1) = \left(-\frac{N}{2} + 2 + 2h \left(\frac{N}{2} - m\right)\right) a(x, x + 1) - \alpha (a(x, x + 2) + a(x - 1, x + 1)). \quad (\text{D.6})$$

Para que as equações ?? e ?? sejam compatíveis impomos a condição extra de que:

$$2a(x, x + 1) - \alpha (a(x + 1, x + 1) + a(x, x)) = 0.$$

Se procurarmos soluções do tipo $a(x_1, x_2) = \gamma e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + \eta e^{i(k_1 x_2 + k_2 x_1)}$, obtemos a relação fundamental para encontrarmos os momentos k:

$$2(\gamma e^{i(k_1 x + k_2 (x+1))} + \eta e^{i(k_1 (x+1) + k_2 x)}) - \alpha (\gamma e^{i(k_1 (x+1) + k_2 (x+1))} + \eta e^{i(k_1 (x+1) + k_2 (x+1))})$$

$$-\alpha (\gamma e^{i(k_1 x + k_2 x)} + \eta e^{i(k_1 x + k_2 x)}) = 0,$$

$$\gamma (2e^{ik_2} - \alpha e^{i(k_1 + k_2)} - \alpha) = -\eta (2e^{ik_1} - \alpha e^{i(k_1 + k_2)} - \alpha),$$

$$\frac{\gamma}{\eta} = -\frac{(2e^{ik_1} - \alpha (e^{i(k_1 + k_2)} + 1))}{(2e^{ik_2} - \alpha (e^{i(k_1 + k_2)} + 1))}.$$

Por conveniência escolhemos escrever $\frac{\gamma}{\eta}$ como $e^{i\theta}$,

$$\begin{aligned} e^{i\theta} &= \frac{\gamma}{\eta}, \\ \theta &= i \ln\left[\frac{\gamma}{\eta}\right], \\ \cot\left[\frac{\theta}{2}\right] &= i \frac{e^{i\frac{\theta}{2}} + e^{-i\frac{\theta}{2}}}{e^{i\frac{\theta}{2}} - e^{-i\frac{\theta}{2}}}, \\ \cot\left[\frac{\theta}{2}\right] &= i \frac{-\frac{\gamma}{\eta} + 1}{-\frac{\gamma}{\eta} - 1}, \\ \cot\left[\frac{\theta}{2}\right] &= i \frac{\gamma - \eta}{\gamma + \eta}, \\ \cot\left[\frac{\theta}{2}\right] &= \frac{\sin\left[\frac{k_1 - k_2}{2}\right]}{\alpha \cos\left[\frac{k_1 + k_2}{2}\right] - \cos\left[\frac{k_1 - k_2}{2}\right]}, \\ \theta &= 2 * \arctan^{-1}\left[\frac{\sin\left[\frac{k_1 - k_2}{2}\right]}{\alpha \cos\left[\frac{k_1 + k_2}{2}\right] - \cos\left[\frac{k_1 - k_2}{2}\right]}\right]. \end{aligned}$$

- caso m=3

O estudo do caso m=3 possibilita generalizarmos para m arbitrário. Existem agora quatro possibilidades:

- a) $x_2 \neq x_1 + 1$ e $x_3 \neq x_2 + 1$
- b) $x_2 = x_1 + 1$ e $x_3 \neq x_2 + 1$
- c) $x_2 \neq x_1 + 1$ e $x_3 = x_2 + 1$
- d) $x_2 = x_1 + 1$ e $x_3 = x_2 + 1$

As equações de (a) ficam da forma:

$$\begin{aligned} E a(x_1, x_2, x_3) &= \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - m\right)\right) a(x_1, x_2, x_3) + 6a(x_1, x_2, x_3) \\ &\quad - \alpha (a(x_1 - 1, x_2, x_3) + a(x_1 + 1, x_2, x_3) + \dots + a(x_1, x_2, x_3 + 1)). \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Pelo *ansatz* a solução será:

$$a(x_1, x_2, x_3) = A_{123} \exp [i (k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3)] + A_{132} \exp [i (k_1 x_1 + k_2 x_3 + k_3 x_2)] + \dots \\ \dots + A_{321} \exp [i (k_1 x_3 + k_2 x_2 + k_3 x_1)]$$

As amplitudes, até aqui, são arbitrárias e as energias correspondem a:

$$E = -\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - m \right) + 2(1 - \alpha \cos[k_1]) + 2(1 - \alpha \cos[k_2]) + 2(1 - \alpha \cos[k_3]).$$

Por outro lado, em (b) x_1 e x_2 são vizinhos, logo as equações ficam da forma:

$$Ea(x_1, x_2, x_3) = \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2, x_3) + 4a(x_1, x_2, x_3) \quad (\text{D.8}) \\ -\alpha (a(x_1 - 1, x_2, x_3) + a(x_1 + 1, x_2, x_3) + \dots + a(x_1, x_2, x_3 + 1)).$$

Já que as amplitudes do caso (a) são arbitrárias, podemos pedir para que as equações D.7 e D.8 sejam equivalentes. Para tanto deve valer a condição:

$$2a(x_1, x_1 + 1, x_3) = \alpha (a(x_1 + 1, x_2, x_3) + a(x_1, x_1, x_3)) \quad (\text{D.9})$$

O que gera sobre as amplitudes as condições:

$$\frac{A_{123}}{A_{213}} = e^{i\theta(k_1, k_2)}, \quad \frac{A_{132}}{A_{312}} = e^{i\theta(k_1, k_2)}, \quad \frac{A_{231}}{A_{321}} = e^{i\theta(k_2, k_3)}.$$

Condição análoga aparece no caso (c):

$$2a(x_1, x_2, x_2 + 1) = \alpha (a(x_1, x_2 + 1, x_2 + 1) + a(x_1, x_2, x_2)). \quad (\text{D.10})$$

que gera sobre as amplitudes:

$$\frac{A_{123}}{A_{132}} = e^{i\theta(k_2, k_3)}, \quad \frac{A_{213}}{A_{231}} = e^{i\theta(k_1, k_3)}, \quad \frac{A_{312}}{A_{321}} = e^{i\theta(k_1, k_2)}.$$

Em (d) temos uma pequena modificação:

$$Ea(x_1, x_2, x_3) = \left(-\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - m \right) \right) a(x_1, x_2, x_3) + 2a(x_1, x_2, x_3) \quad (\text{D.11}) \\ -\alpha (a(x_1 - 1, x_2, x_3) + a(x_1 + 1, x_2, x_3) + \dots + a(x_1, x_2, x_3 + 1)).$$

Contudo se D.9 e D.10 forem satisfeitas, automaticamente D.11 se reduz a D.7.

Podemos agora exprimir todas as amplitudes em termos de uma, digamos A_{123} .

$$\begin{aligned} A_{213} &= e^{i\theta(k_1, k_2)} A_{123}, \\ A_{132} &= e^{i\theta(k_3, k_2)} A_{123}, \\ A_{312} &= e^{i\theta(k_2, k_1)} A_{132} = e^{i\theta(k_2, k_1)} e^{i\theta(k_3, k_2)} A_{123}, \\ A_{231} &= e^{i\theta(k_3, k_1)} A_{213} = e^{i\theta(k_3, k_1)} e^{i\theta(k_2, k_1)} A_{123}, \\ A_{321} &= e^{i\theta(k_2, k_1)} A_{312} = e^{i\theta(k_2, k_1)} e^{i\theta(k_2, k_1)} e^{i\theta(k_3, k_2)} A_{123}. \end{aligned}$$

- caso m arbitrário

Com base no caso anterior podemos agora intuir que para o caso geral temos:

$$a(x_1, \dots, x_m) = \sum_P A_P \exp \left[i \left(\sum_{j=1}^m k_{P_j} x_j \right) \right],$$

onde P denota as permutações de m índices. As amplitudes A_p se conectam com $A_{12\dots m}$ através de :

$$\frac{A_p}{A_{12\dots m}} = \exp \left[i \sum \theta(k_i, k_j) \right],$$

sendo a soma em θ sobre todos os arranjos de 2 índices e o sinal determinado pela paridade de P. A energia é dada por:

$$E = -\frac{N}{2} + 2h \left(\frac{N}{2} - m \right) + \sum_{i=1}^m 2(1 - \alpha \cos[k_i]), \quad (\text{D.12})$$

$$\epsilon = \frac{E}{N} = -\frac{1}{2} + 2h \left(\frac{1}{2} - \frac{m}{N} \right) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^m 2(1 - \alpha \cos[k_i]) \text{ (energiaporspin)}.$$

D.1.3 quantização dos momentos de Bethe

Devemos agora impor as condições de contorno para quantizar os momentos. No caso que estudamos, nos restringimos às condições periódicas de contorno, pois elas, não apresentando termo de superfície, são mais adequadas para o estudo dos efeitos de tamanho.

- Para m=1:

$$\begin{aligned}
a(x) &= a(x + N), \\
Ae^{-ikx} &= Ae^{-ikx}e^{-ikN}, \\
e^{ikN} &= 1, \\
kN &= 2\pi I, \text{ onde } I \text{ é um inteiro.}
\end{aligned} \tag{D.13}$$

- Para $m=2$:

$$\begin{aligned}
a(x_1, x_2) &= a(x_2, x_1 + N), \\
A_{12} \exp[-i(k_1 x_1 + k_2 x_2)] &= A_{21} e^{-ik_1 N} \exp[-i(k_1 x_1 + k_2 x_2)], \\
e^{-ik_1 N} &= e^{i\theta(k_1, k_2)}, \\
Nk_1 &= 2\pi I_1 + \theta(k_1, k_2), \text{ onde } I_1 \text{ é um inteiro.}
\end{aligned}$$

De forma análoga encontramos:

$$Nk_2 = 2\pi I_2 + \theta(k_2, k_1), \text{ onde } I_2 \text{ é um inteiro}$$

- Para $m=3$ temos condições do tipo $a(x_1, x_2, x_3) = a(x_2, x_3, x_1 + N)$, que nos leva às equações da forma:

$$\begin{aligned}
Nk_1 &= 2\pi I_1 + \theta(k_1, k_2) + \theta(k_1, k_3), \\
Nk_2 &= 2\pi I_2 + \theta(k_2, k_1) + \theta(k_2, k_3), \\
Nk_3 &= 2\pi I_3 + \theta(k_3, k_1) + \theta(k_3, k_2), \text{ com } I_1, I_2, I_3 \text{ inteiros.}
\end{aligned}$$

- Para o caso geral obtemos as equações:

$$Nk_j = 2\pi I_j + \sum_{l=1}^m \theta(k_j, k_l), j=1, \dots, m (m \leq N), \tag{D.14}$$

visto que $\theta(k_i, k_i) = 0$ e que I_j é inteiro.

Referências Bibliográficas

- [1] P. ANDERSON AND G. YUVAL, *Exact results in the Kondo problem - equivalence to a classical one-dimensional coulomb gas*, Physical Review Letters, 23 (1969), p. 89.
- [2] P. ANDERSON, G. YUVAL, AND D. HAMMAN, *Exact Results in the Kondo Problem. II. Scaling Theory. Qualitatively Correct Solution, and Some New Results on One-Dimensional Classical Statistical Models*, Physical Review B, 1 (1970), pp. 4464–4473.
- [3] N. ANDREI, K. FURUYA, AND J. H. LOWENSTEIN, *Solution of the kondo problem*, Reviews of Modern Physics, 55 (1983), pp. 331–400.
- [4] M. ARMSTRONG, *Basic Topology*, Undergraduate texts in mathematics, Springer-Verlag, third ed., 1983.
- [5] N. W. ASHCROFT AND D. MERMIN, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing, international edition ed., 1976.
- [6] A. AUERBACH, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Graduate Texts in Contemporary Physics, Springer-Verlag, 1994.
- [7] V. BARZYKIN AND I. AFFLECK, *Impurity correlations in dilute kondo alloys*, Physical Review B, 61 (2000), pp. 6170–6175.
- [8] R. J. BAXTER, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.
- [9] G. BERIM AND G. CABRERA, *Long time tails in the dynamics of the spatially inhomogeneous magnetization of dimerized isotropic XY chains for spin $s=1/2$* , Physica A, 238 (1997), pp. 211–224.
- [10] H. BETHE, Z. Phys., 71 (1931), p. 205.
- [11] H. CASTELLA, X. ZOTOS, AND P. PRELOVSEK, *Integrability and ideal conductance at finite temperature*, Physical Review Letters, 74 (1995), pp. 972–975.

- [12] A. H. CASTRO NETO, *A few topics in bosonization, brownian motion and transport*, in Dynamic correlations in Interacting Electron Systems, July 1997. Summer School, Vila Nova de Cerveira, Portugal.
- [13] —, *Non-fermi liquid behavior in u and ce intermetallics*, in VI International Summer School Nicolás Cabrera, Sept. 1999. cond-mat/9911092.
- [14] —, *Solid State Physics*, 1999. notas de aula do curso de estado sólido da UCR.
- [15] A. H. CASTRO NETO AND B. A. JONES, *Non-Fermi-liquid behavior in U and Ce alloys: Criticality, disorder, dissipation, and Griffiths-McCoy singularities*, Physical Review B, 62 (2000), pp. 14975–15011.
- [16] Z. CHANG, *Quantum group and quantum symmetry*, Physics Reports - Review section of Physics Letters, 262 (1995), pp. 137–225.
- [17] R. CHITRA, S. PATI, H. KRISHNAMURTHY, D. SEN, AND S. RAMASESHA, *Density-matrix renormalization-group studies of the spin-1/2 Heisenberg systems with dimerization and frustration*, Physical Review B, 52 (1995), pp. 6581–6587.
- [18] R. COWLEY, D. TENNANT, S. NAGLER, AND T. PERRING, *Spinons and spin-waves in one-dimensional Heisenberg antiferromagnets*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 140 (1995), pp. 1651–1652.
- [19] E. DAGOTTO, S. YUNOKI, A. MALVEZZI, A. MORCO, J. HU, S. CAPPONI, AND D. POILBLANC, *Ferromagnetic Kondo model for manganites: Phase diagram, charge segregation, and influence of quantum localized spins*, Physical Review B, 58 (1998), pp. 6414–6427.
- [20] S. DONIACH, *The kondo lattice and weak antiferromagnetism*, Physica B, 91B (1977), p. 231.
- [21] R. EGGER AND H. SCHOELLER, *RKKY interaction and kondo screening cloud for strongly correlated electrons*, (1996). cond-mat/9608104.
- [22] V. J. EMERY, *Theory of the one-dimensional electron gas*, in Highly Conducting in One-dimensional Solids, J. T. Devreese, R. P. Evrard, and V. E. V. Doren, eds., Plenum, 1979, ch. 6, pp. 247–303.
- [23] L. FADDEEV AND L. TAKHTADZHIAN, Journal of Soviet Mathematics, 24 (1984), p. 241.
- [24] L. FADDEEV AND L. TAKHTAJAN, *What is the spin of a spin-wave*, Physics Letters A, 85 (1981), pp. 375–377.

- [25] A. FETTER AND J. D. WALECKA, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, International series in pure and applied physics, McGraw-Hill book company, 1971.
- [26] R. FEYNMAN, *Statistical Mechanics: a Set of Lectures*, Frontiers in Physics: lecture Notes Series, Addison Wesley, 13 ed., 1990.
- [27] E. FRADKIN, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, The Advanced Book Program, Addison Wesley Publishing Company, 1991.
- [28] S. FUJIMOTO AND N. KAWAKAMI, *Bosonization Approach to the One-Dimensional Kondo Lattice Model at Half Filling: Reexamination*, Journal of the physical Society of Japan, 66, pp. 2157–2162.
- [29] G. GEHRING AND K. GEHRING, *Co-operative Jahn-Teller effects*, Reports in Progress on Physics, 38 (1975), pp. 1–89.
- [30] A. O. GOGOLIN, A. A. NERSESYAN, AND A. M. TSVELIK, *Bosonization and Strongly Correlated System*, Cambridge University Press, 1998.
- [31] S. GOULD, *Vida Maravilhosa: o acaso na evolução e a natureza da história*, Companhia das Letras, 1990. tradução de Paulo César de Oliveira.
- [32] I. S. GRADSHTEYN AND I. M. RYZHIK, *Table of Integral Series and Products*, Academic Press Inc., 4 ed., 1980.
- [33] R. GRIFFITHS, Physical Review, 133 (1964), p. 768.
- [34] HALBERG, HORSH, AND MARTÍNEZ, Physical Review B, 78 (1995), p. 1213.
- [35] A. HERMANDO, J. M. BARANDIRAN, J. M. ROJO, AND J. C. GOMEZ-SAL, *About the effect of pressure and volume expansion on the transition from antiferromagnetic to ferromagnetic state in some metal alloys*, Jour. Mag. Mat., 174 (1997), p. 181.
- [36] G. HONNER AND M. GULÁCSI, *Onde-dimensional kondo lattice at partial band filling*, Physical Review Letters, 78 (1997), pp. 2180–2183.
- [37] G. HONNER AND M. GULÁCSI, *Ordering of localized moments in kondo lattice models*, Physical Review B, 58 (1998), pp. 2662–2677.
- [38] J. INOUE AND S. MAEKAWA, *Spiral State and Giant Magnetoresistance in Perovskite Mn Oxides*, Physical Review Letters, 74 (1995), pp. 3407–3410.

- [39] C. ITZYKSON AND J.-M. DROUFFE, *Statistical field theory*, vol. From Brownian motion to renormalization and lattice gauge theory of Cambridge Monographs on Mathematical Physics, Cambridge University Press.
- [40] Y. IZYUMOV AND Y. SKRYABIN, *Statistical Mechanics of Magneticallty Ordered Systems*, Consultants Bureau, a division of Plenum Publishing Corporation, New York, 1988. translated from russian by Roger Cooke.
- [41] C. KANE AND M. FISHER, *Transmission though barriers and resonant tunneling in an interacting one-dimensional electron gas*, Physical Review B, 46 (1992), pp. 15233–15262.
- [42] A. N. KIRILLOV, Journal of Soviet Mathematics, 30 (1985), p. 2298.
- [43] —, Journal of Soviet Mathematics, 36 (1987), p. 115.
- [44] J. KOGUT, *An introduction to lattice gauge theory and spin systems*, Reviews of Modern Physics, 51 (1979), pp. 659–713.
- [45] KOMA, Progress of Theoretical Physics, 78 (1987), p. 1213.
- [46] J. KONDO, *Resistance minimum in dilute magnetic alloys*, Progress in Theoretical Physics, 32 (1964), p. 37.
- [47] F. KURMARTSEV, A. LUTHER, AND A. NERSESYAM, *Theory os a 2D Luttinger liquid*, JETP Letters, 55 (1992), pp. 724–728.
- [48] K. LE HUR, *Metal-insulator transition in the one-dimensional kondo lattice model*, Physical Review B, 58 (1998), pp. 10261–10275.
- [49] D.-H. LEE AND J. TONER, *Kondo Effect in a Luttinger Liquid*, Physical Review Letters, 69 (1992), pp. 3378–3381.
- [50] O. LEGEZA AND G. FÁTH, *Accuracy of the density-matrix renormalization-group method*, Physical Review B, 53 (1996), pp. 14349–14358.
- [51] A. J. LEGGETT, S. CHAKRAVARTY, A. T. DORSEY, M. P. A. FISHER, A. GARG, AND W. ZWERGER, *Dynamics of the dissipative two-state system*, Review of Modern Physics, 59 (1987), pp. 1–85.
- [52] B. M. MCCOY, (1997). cond-mat/9706194.
- [53] H. MIZUTA, T. NAGAO, AND M. WADATI, *Correlation length for the XXZ spin chain at finite-temperature*, Journal of Physical Society of Japan, 63 (1994), pp. 3951–3961.

- [54] F. NAEF, ZOTOS X., AND P. PREVOSSEK, *Transport and conservation laws*, Physical Review B, 55 (1997), pp. 11029–11032.
- [55] J. W. NEGELE AND H. ORLAND, *Quantum Many-Particle Systems*, Advanced Book Classics, Perseus Books, 1998.
- [56] A. NERSESYAN, A. LUTHER, AND F. KUSMARTSEV, *Scaling Theory of the two-chain model*, Physics Letters A, 176 (1993), pp. 363–370.
- [57] B. NIENHUIS, *Phase Transition and Critical Phenomena*, vol. 11, Academic Press, 1987, ch. Coulomb Gas Formulation of Two-dimensional Phase Transitions, pp. 1–53.
- [58] P. NOZIÈRES AND A. BLADIN, *Kondo effect in real metals*, Journal of Physics, 41 (1980), pp. 193–211.
- [59] L. ONSAGER, Physical Review, 65 (1944), pp. 117–249.
- [60] R. ORBACH, *Linear antiferromagnetic chain with anisotropic coupling*, Physical Review, 112 (1958), pp. 309–316.
- [61] T. PROSEN, *Time evolution of a quantum many-body system: Transition from integrability to ergodicity in the thermodynamic limit*, Physical Review Letters, 80 (1998), pp. 1808–1811.
- [62] H. J. SCHULZ, *Interacting electrons in one-dimensional luttinger liquids*, Physica C, 235 (1994), pp. 217–220. extended version cond-mat 9503150 v2.
- [63] D. SÉNÉCHAL, *An introduction to bosonization*, Tech. Rep. CRPS-99-09, Université de Sherbrooke, Aug. 1999. cond-mat/9908262.
- [64] R. SHANKAR, *Renormalization Group Approach to Interacting Fermions*, Review in Modern Physics, 66 (1994), pp. 129–192.
- [65] N. SHIBATA, A. TSVELIK, AND K. UEDA, *One-dimensional Kondo- lattice model as a Tomonaga-Luttinger liquid*, cond-mat/9702124.
- [66] R. SIDDHARTHAN. cond-mat/9804210.
- [67] A. SIKKEMA, W. BUYERS, I. AFFLECK, AND J. GAN, *Ising-Kondo lattice with transverse field: A possible f-moment Hamiltonian for URu_2Si_2* .
- [68] S. SÜLOW, M. C. ARONSON, B. D. RAINFORD, AND P. HAEN, *Doniach phase diagram, revisited: from ferromagnet to fermi liquid in pressurized $CeRu_2Ge_2$* , Phys. Rev. Lett., 82 (1999), pp. 2963–2966.

- [69] TAKAHASHI, *One-dimensional Heisenberg model at finite temperature*, Progress of Theoretical Physics, 46 (1971), p. 401.
- [70] TAKAHASHI AND SUSUKI, Progress of theoretical physics, 48 (1972), p. 2187.
- [71] M. TAKAHASHI. cond-mat/9708087.
- [72] L. TAKHTAJAN, Lecture Notes in Physics, 242 (1985), p. 175.
- [73] D. THOULESS, *Long-Range Order in One-Dimensional Ising Systems*, Physical review, 187 (1969), pp. 732–733.
- [74] H. TSUNETSUGU, M. SIGRIST, AND K. UEDA, *The ground-state phase diagram of the one-dimensional kondo lattice model*, Reviews of Modern Physics, 69 (1997), pp. 809–863.
- [75] A. M. TSVELIK, *Semiclassical solution of the one dimensional model of Kondo insulator*, Physical Review Letters, 72 (1994), pp. 1048–1051.
- [76] A. A. VLADIMIROV, Physics Letters, 105A (1984), p. 8.
- [77] J. VOIT, *One-dimensional fermi liquids*, Reports on Progress in Physics, 58 (1995), pp. 977–1116. last revision and update cond-mat/9510014.
- [78] J. VON DELFT AND H. SCHOELLER, *Bosonization for beginners - refermionization for experts*, Annalen der Physik, 4 (1998), pp. 225–305. cond-mat/9805275v3.
- [79] S. WHITE, *Density-matrix formulation for quantum renormalization-groups*, Physical Review Letters, 69 (1992), pp. 2863–2866.
- [80] P. WIEGMANN, *One-dimensional Fermi system and plane xy model*, Journal of Physics C: Solid State Physics, 11 (1978), pp. 1583–1598.
- [81] WILSON, *Renormalization group - critical phenomena and Kondo problem*, Review of Modern Physics, 47 (1975), pp. 773–840.
- [82] WILSON AND KOGUT, *Physics Reports*, 12C (1975).
- [83] E. WITTEN, *Gauge theories and integrabel models*, Nuclear Physics B, 322 (1989), pp. 629–697.
- [84] E. WITTEN, *Duality, spacetime and quantum mechanics*, Physics Today, (1997), pp. 28–33.
- [85] V. YAKOVENKO, *Once again about interchain hopping*, JETP Letters, 56 (1992), pp. 510–513.
- [86] C. N. YANG AND C. P. YANG, Physical Review, 147 (1966), p. 303.

- [87] —, *1-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions .2. properties of ground-state energy per lattice site for an infinite System*, Physical Review, 150 (1966), p. 327.
- [88] —, *1-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions .I. proof of Bethes hypothesis for ground state in a finite system*, Physical Review, 150 (1966), p. 321.
- [89] G. YUVAL AND P. ANDERSON, *Exact results for Kondo problem - one-body theory and extension to finite temperature*, Physical Review B, 1 (1970), p. 1522.
- [90] O. ZACHAR, *Models of One Dimensional Eletron Gas in an Active Envionment: Kondo Lattice and Stripe Phase*, PhD thesis, UCLA - USA, 1998.
- [91] O. ZACHAR, S. A. KIVELSON, AND V. J. EMERY, *Exact results for a 1d kondo lattice*, Physical Review Letters, 7 (1996), pp. 1342–1345.
- [92] O. ZACHAR AND A. TSVELIK, *Onde-dimensional electron gas interacting with a Heisenberg spin-1/2 chain*, cond-mat/99-09296.
- [93] J. ZINN-JUSTIN, *Quantum Field Theories and Critical Phenomenas*, The international series of monographs on physics n.77, Oxford University Press, 1990.
- [94] X. ZOTOS AND P. PRELOVSEK, *Evidence for ideal insulating or conducting state in a one-dimensional integrable system*, Physical Review B, 53 (1996), pp. 983–986.

Índice Remissivo

- Anderson
 - modelo de, 7
- aniquilação de par, 70
- ansatz de Bethe
 - algébrico, 95
 - analítico, 95
 - diagrama comutativo, 96
 - equações do, 102, 106
 - função de onda, 102
 - funcional, 95
- back-scattering, *veja* interações
- blindagem, 89
- campo
 - bosônico, 22
 - de carga, 22
 - de momentos, 22
 - de spin, 22
 - dual, 22
 - fermiônico, 15
- campos
 - canonicamente conjugados, 22
- Clifford, álgebra de, 18
- condições de neutralidade forte, 59
- cross-over dimensional, 75
- cut-off, 20
- DMRG, 118
- double exchange, 10, 87
- espécies fermiônicas, 15
- espalhamento
 - matriz de, 102
- férmions
 - de Dirac, 14
 - pesados, 5
 - sem spin, 97
- fase coerente, *veja* limite denso
- fase incoerente, *veja* limite diluído
- Fermi
 - superfície de, 14
 - velocidade de, 15
- foward-scattering, *veja* interações
- frequências de Matsubara, 49, 51
- função de partição, 48
- fusão de par, 70
- g-ologia, 24
- gás de Coulomb, 29
 - energia eletro-magnética estática, 55
 - fugacidade, 49
 - vácuo, 55
- grupo de renormalização, 67
 - equações, 82
- hamiltoniana
 - bosônica livre, 23
 - de Tomonaga-Luttinger, 24
 - livre de Dirac, 15
- Heisenberg
 - modelo antiferromagnético de, 94

- representação de Orbach, 94
- representação de Yang, 94
- Heisenberg-Ising
 - modelo de, 93
- hopping correlacionado, 76
- identidades bosônicas, 13, 19
- interação RKKY, 36
- interações
 - de correntes, 15
 - tipo back-scattering, 16
 - tipo back-scattering bosonizadas, 25
 - tipo forward-scattering, 16
 - tipo forward-scattering bosonizadas, 24
 - tipo umklapp, 16
 - tipo umklapp bosonizadas, 26
- inversão correlacionada, 76
- Ising-Kondo, 83
- Jahn-Teller cooperativo, 42, 83
- Klein
 - fatores de, 18
- Kondo
 - hamiltoniana, 5
 - hamiltoniana bosonizada, 28
 - hamiltoniana unidimensional, 27
 - regime, 7
 - temperatura, 5
- líquido
 - de Fermi, 95
 - de Luttinger, 24, 96
 - duas impurezas em, 64
 - uma impureza em, 64
 - quântico, 95
- limite denso, 73
- limite diluído, 73
- Luttinger
 - modelo de, 24
- magnon, 106
- Mandelstam
 - fórmula de, *veja* identidades bosônicas
- matriz
 - de monodromia, 105
 - de transferência, 105
 - de transferência local, 104
- MEIQ, 102
- modelo de níveis ressonantes, 31
- nós
 - teoria de, 104
- não-líquido de Fermi, 33
- NFL, 27, *veja* não-líquido de Fermi
- onda de spin, 106
- operador de deslocamento, 45
- operadores
 - bosônicos, 17
 - de campo bosônico, 20
 - partícula-buraco, 16
- ordem normal, 16
- par-próximo, 70
- parâmetro
 - de rede, 14
 - espectral, 104
- Pauli
 - matrizes de, 18
- peso conforme, 130
- point-splitting, 22
- ponto de Toulouse, 32, 41
- pseudopartículas, 16
- QTA, 114

- rede de Kondo
 - ação efetiva, 53
 - hamiltoniana, 7
- refermionizar, 30
- regra de gelo, 115
- Reidemeister
 - movimentos de, 104
- relação de dispersão linear, 14
- relações
 - de dualidade, 57
 - triangulares, 103
- relações de comutação
 - bosônicas, 17
 - fermiônicas, 15
- renormalização no espaço real, 117
- RG, *veja* grupo de renormalização
- RLV, *veja* modelo de níveis ressonantes³¹

- simetria de cruzamento, 115
- spin conforme, 58, 130
- spin wave class, 97
- spinon, 107
- superfície de Riemann, 58
- SWC, *veja* spin wave class

- TBA, 114
- temperatura renormalizada, 48
- tight-binding, 14
- time-kink, 50
- transição Kosterlitz-Thouless, 29

- umklapp, *veja* interações

- vácuo
 - bosônico, 23
 - fermiônico, 16

- Wess-Zumino-Witten, 37

- XXZ, 93
- XY clássico, 29
- XYZ, 90

- Yang-Baxter
 - equação local, 105
 - equação de, 103