



FELIPE FORTES BRAZ

**TRANSFORMAÇÃO DE DECORAÇÃO-INTERAÇÃO
PARA MODELOS QUÂNTICOS DE SPIN
ISING-HEISENBERG**

LAVRAS - MG

2016

FELIPE FORTES BRAZ

**TRANSFORMAÇÃO DE DECORAÇÃO-INTERAÇÃO PARA MODELOS
QUÂNTICOS DE SPIN ISING-HEISENBERG**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, área de concentração em Física da Matéria Condensada, para obtenção do título de Mestre.

Comitê de Orientação

Dr. Sérgio Martins de Souza (Presidente)

Dr. Onofre Rojas Santos

Dr. Luiz Cleber Brito

Dr. José Monserrat Neto

Dr. André Pimenta Freire

LAVRAS - MG

2016

Ficha Catalográfica Elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca Universitária da UFLA, com dados informados pelo próprio(a) autor(a).

Braz, Felipe Fortes

Transformação de decoração-interação para modelos quânticos de spin Ising-Heisenberg / Felipe Fortes Braz. – Lavras: UFLA, 2016.

59 p.: il.

Dissertação (mestrado acadêmico) - Universidade Federal de Lavras, 2016.

Orientador: Sérgio Martins de Souza.

Bibliografia.

1. Transformação decoração quântica. 2. Modelo Heisenberg.
3. Modelo quântico de spins. I. Universidade Federal de Lavras. II.
Título

FELIPE FORTES BRAZ

**TRANSFORMAÇÃO DE DECORAÇÃO-INTERAÇÃO
PARA MODELOS QUÂNTICOS DE SPIN
ISING-HEISENBERG**

Dissertação de mestrado apresentada à
Universidade Federal de Lavras, como
parte das exigências do Programa de Pós-
Graduação em Física, área de concentra-
ção em Física da Matéria Condensada,
para a obtenção do título de Mestre.

APROVADA em 18 de março de 2016.

Dr(a). Maria Tereza Climaco dos Santos Thomaz UFF

Dr. Cleverson Filgueiras UFLA

Dr. Sergio Martins de Souza

Orientador

LAVRAS - MG

2016

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao comitê de orientação: Prof. Sérgio Martins de Souza, Prof. Onofre Rojas Santos, Prof. Luiz Cleber Tavares de Brito, Prof. André Pimenta Freire e Prof. José Monserrat Neto pela orientação da pesquisa;

Agradeço à CAPES, FAPEMIG e CNPq, pelo apoio financeiro durante a realização do trabalho;

Agradeço à Universidade Federal de Lavras, pelo fornecimento da excelente estrutura física e pessoal.

Agradeço ao NAUFLA núcleo de acessibilidade da UFLA pelo apoio pedagógico no fornecimento de monitores para auxiliar pessoas com deficiência; agradeço aos monitores Cezar Augusto Vassalo, Gustavo Henrique Luz, Amanda Mesquita, Alex José Pereira e Rafaela Lares Campagnani pelo apoio dado ao longo de todo o mestrado; agradeço meus colegas Felipe da Cruz Rodrigues e Jordana Torrico pelo auxílio na construção do trabalho. agradeço a família pelo apoio incondicional neste mestrado; agradeço à família da minha noiva pelo acompanhamento mais de perto durante o período do mestrado; agradeço a minha noiva pela compreensão nos momentos mais críticos e por se mostrar presente em todas as fases do mestrado;

RESUMO

A versão clássica da transformação de decoração foi usada para mapear modelos de spins na rede em outros modelos de spins equivalentes. Esta transformação é uma ferramenta muito útil para a identificação de uma classe de modelos de spins na rede, uma vez que, é possível mostrar que um modelo de spins na rede pode ser mapeado em um modelo exatamente solúvel. Aqui apresentamos uma versão quântica da transformação de decoração e mostramos como essa transformação pode ser aplicada a modelos tipo Heisenberg. Esta transformação poderá ser útil para estudar a equivalência entre dois sistemas de spins quânticos, tais como pequenos clusters de modelos de spins quânticos ou ainda modelos de spins quânticos na rede. A transformação de decoração quântica por si só é uma transformação exata, embora a transformação proposta não possa ser usada para mapear exatamente um modelo de spins quânticos na rede em outro modelo de spins quânticos na rede, uma vez que os operadores envolvidos são não comutativos. No entanto, é possível mapeamento no limite "clássico", estabelecendo a equivalência entre os dois modelos de spin quântico na rede. Para estudar a validade deste método para o modelo de spin quântico na rede, usamos a fórmula Zassenhaus, e verificamos como a correção poderia influenciar a transformação de decoração. O termo de correção envolve o acoplamento do segundo vizinho mais próximo, bem como os próximos vizinhos mais próximos, o que leva a uma tarefa complicada para estabelecer a equivalência entre ambos os modelos na rede. Essa correção também nos dará informações valiosas sobre sua contribuição e para a maioria dos modelos tipo Heisenberg ela pode ser irrelevante, pelo menos, até a terceira ordem de fórmula Zassenhaus (β^3). Esta transformação é aplicada a uma cadeia de Heisenberg com tamanho finito, e compara-se como os resultados numéricos exatos e o nossos resultados são consistentes para acoplamento xy-anisotrópico fraco. Também aplicamos a transformação ao modelo de Ising-Heisenberg com ligações alternadas, e obtemos um resultado aproximado para este modelo.

Palavras-chave: Transformação de decoração; Modelos quânticos de spin; Modelo de Heisenberg.

ABSTRACT

The classical version of decoration transformation has been used to map lattice spin models into another equivalent lattice spin models. This transformation is a very useful tool for identifying a class of lattice spin models, since, it is possible to show a class of lattice spin models that can be map into another class of exactly solvable models. Here we present a quantum version of decoration transformation and show how this transformation could be applied to Heisenberg type models. This transformation can be useful to study the equivalence between two quantum spin systems such as a small cluster of quantum spin models or even lattice quantum spin models. The quantum decoration transformation by itself is an exact transformation, although the proposed transformation cannot be used to map exactly a quantum spin lattice model onto another quantum spin lattice model, since, the operators are non-commuting. However, it is possible mapping in the "classical" limit, establishing the equivalence between two quantum lattice spin models. To study the validity of this approach for quantum spin lattice model, we use the Zassenhaus formula, and we verify how the correction could influence the decoration transformation. The correction term involves the second-nearest-neighbor coupling, as well as the next nearest neighbors, which leads into a cumbersome task to establish the equivalence between both lattice models. This correction also gives us valuable information about its contribution, for most of the Heisenberg type models, this correction could be irrelevant at least up to the third order term of Zassenhaus formula. This transformation is applied to a finite size Heisenberg chain, so we compare with exact numerical results, and our result is consistent to weak xy -anisotropy coupling, we also apply to bond-alternating Ising-Heisenberg chain model, obtaining an approximate result.

Keywords: Decoration transformation; quantum spin models; Heisenberg model.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 Transformação de decoração clássica do modelo linear. Do lado esquerdo o modelo linear decorado e do lado direito o modelo linear efetivo. 15
- Figura 2 Representação da transformação estrela-triângulo. Do lado esquerdo temos uma estrela com a decoração em seu centro s . Do lado direito temos um triângulo que representa nesse caso o nosso modelo efetivo. 19
- Figura 3 Representação esquemática da transformação de decoração quântica. s corresponde ao spin decorado, enquanto que σ_1 e σ_2 correspondem aos spins de Heisenberg e H (\tilde{H}) corresponde ao Hamiltoniano decorado (efetivo) respectivamente. . 22
- Figura 4 Representação esquemática da transformação decoração quântica. Onde s corresponde ao spin decorado, enquanto que σ_1 , σ_2 and σ_3 correspondem ao spin de Heisenberg, H (\tilde{H}) corresponde ao Hamiltoniano decorado (efetivo) respectivamente. 33

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO E MOTIVAÇÃO	9
2	OBJETIVOS GERAL E ESPECÍFICO	12
2.1	Objetivos Geral e Específico	12
2.2	Justificativa	12
3	TRANSFORMAÇÃO DE DECORAÇÃO CLÁSSICA	13
3.1	Transformação de decoração de duas pernas	14
3.2	Transformação de decoração estrela-triângulo	19
4	TRANSFORMAÇÃO DE DECORAÇÃO QUÂNTICA	22
4.1	Transformação de decoração quântica para duas pernas	22
4.1.1	Transformação de decoração quântica para o modelo XXZ com spins-$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ XXZ	25
4.1.2	Transformação decoração quântica para o modelo XXZ com spins-$(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	30
4.2	Transformação de decoração quântica triângulo-estrela	32
4.2.1	Transformação de decoração quântica para o modelo XXZ com spins-$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	34
4.2.2	Transformação decoração quântica para o modelo XXZ com spins-$(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	37
5	TRANSFORMAÇÃO DECORAÇÃO QUÂNTICA PARA MO- DELOS DE REDE	39
5.1	Correção na transformação decoração quântica usando a fór- mula de Zassenhaus	39
5.2	Cadeia Heisenberg como uma cadeia decorada de Heisenberg .	40
5.3	Cadeia de Ising-Heisenberg com acoplamento alternado	42
6	CONCLUSÃO	45
	REFERÊNCIAS	46
	APÊNDICE A	49
	APÊNDICE B	54
	APÊNDICE C	57

1 INTRODUÇÃO E MOTIVAÇÃO

O Formalismo de transformação-decoração desenvolvido na década de 50 por Fisher (1959) e Syozi (1972), tem sido amplamente usado para resolver analiticamente vários modelos decorados e recentemente foi generalizado, na ref. Rojas, Valverde e Souza (2009), para o caso de spins arbitrários e qualquer spin mecânico, tal como modelos de spins clássicos-quânticos. Isso nos permite aplicar a transformação-decoração a modelos de spins híbridos (clássicos-quânticos), como os do tipo Ising-Heisenberg. Vários modelos (cadeias) quase unidimensionais, como do tipo-diamante, já foram estudados nas refs. Antonosyan, Bellucci e Ohanyan (2009), Bellucci e Ohanyan (2010), Canova, Strecka e Jascur (2006), Canova, Strecka e Lucivjansky (2009), Rojas et al. (2011), Strecka et al. (2009) e Valverde, Rojas e Souza (2008), assim como modelos em redes bidimensionais foram estudados nas refs. Galisova et al. (2010), Strecka (2006), Strecka e Canova (2006), Strecka, Canova e Minami (2009), Strecka et al. (2009) e Valverde, Rojas e Souza (2009). Entretanto, podemos também aplicar esse formalismo a sistemas decorados tridimensionais (STRECKA; DELY; CANOVA, 2009). Este método também pode ser aplicado combinando a simulação Monte Carlo para sistemas 3D (LI et al., 2007). O formalismo de transformação-decoração pode também ser aplicado a outros tipos de modelos, tal como feito nas refs. Li et al. (2007) e Strecka, Dely e Canova (2009), onde foram estudados modelos (redes) tipo-diamante em que o elétron tinha mobilidade.

Esta transformação poderia ser aplicada para além de modelos de spin. Strecka et al. (2009) estudaram um modelo bidimensional constituído por spins fixos e elétrons móveis. Na ref. Rojas e Souza (2011), a transformação decoração foi também aplicada a sistemas de partículas sem spins interagentes (Hub-

bard sem spin). Devido a esses importantes progressos, Strecka (2010) discutiu a transformação-decoração em aspectos mais detalhados, seguindo o formalismo apresentado na referência Rojas, Valverde e Souza (2009), para o caso de modelos (sistemas) híbridos. Outro interessante formalismo de transformação-decoração foi proposto para os casos em que é necessário aplicar a transformação-decoração mais de uma vez ao mesmo modelo (ANTONOSYAN; BELLUCCI; OHANYAN, 2009; CANOVA; STRECKA; LUCIVJANSKY, 2009; VALVERDE; ROJAS; SOUZA, 2009). Recentemente, uma outra transformação interessante (ROJAS; SOUZA, 2011) foi sugerida para evitar a aplicação de várias etapas de transformações decoração, usando apenas uma única transformação.

Portanto, é bastante relevante a extensão da transformação de decoração para modelos de spin quântico, uma vez que a maioria dos materiais reais podem ser bem descrita por modelos tipo de Heisenberg. Além disso, a decoração transformação quântica pode ser aplicada exatamente para sistemas quânticos pequenos, tais como q-bits, os quais são bem descritos por modelos de Heisenberg (HOU et al., 2012; RIGOLIN, 2004; ZHANG; JIANG; ABLIZ, 2011), assim como em suas referências.

Nesse trabalho propomos uma transformação-decoração quântica com o objetivo de mapear modelos quânticos mistos ou modelos decorados quânticos em modelos quânticos efetivos de spins. A principal diferença entre a transformação-decoração clássica e transformação-decoração quântica está nas propriedades não comutativas, o que conseqüentemente nos leva a fatores de Boltzmann operacionais. Algumas das ideias básicas das transformações de decorações quântica já foram discutidas para modelo de Heisenberg diluído por Dunn e Essam (1972).

Para introduzir uma versão quântica da transformação decoração para modelos de spin Heisenberg em um modelo uniforme spin-1/2 Heisenberg, vamos

seguir a ideia básica usada por Dunn e Essam (1972), bem como por Fisher (1959) e Syozi (1972) para spins clássicos.

Essa dissertação está organizada da seguinte forma, na seção 2 apresentamos uma revisão sobre a transformação de decoração clássica. Na seção 3, apresentamos a transformação de decoração quântica. Na seção 4, discutimos como aplicar o formalismo para um modelo de spins quânticos na rede e mostramos como obter os termos de correções utilizando a fórmula de Zassenhaus. Além disso, aplicamos a transformação ao modelo de Heisenberg em uma rede finita, bem como para o modelo de Ising-Heisenberg com ligações alternadas. Finalmente, na seção 5 apresentamos as conclusões e perspectivas desse trabalho.

2 OBJETIVOS GERAL E ESPECÍFICO

2.1 Objetivos Geral e Específico

- Desenvolver um método para mapeamento de modelos quânticos decorados;
- Aplicar o método em diferentes modelos quânticos decorados, para testar sua eficiência;
- Determinar o regime de validade do método.

2.2 Justificativa

São poucos os modelos exatamente solúveis. Portanto, métodos que nos permitam mostrar a equivalência física entre modelos são fundamentais para definirmos classes de modelos equivalentes.

3 TRANSFORMAÇÃO DE DECORAÇÃO CLÁSSICA

Nessa seção faremos uma breve revisão sobre a transformação de decoração para modelos do tipo Ising. A transformação de decoração é interessante porque pode ser aplicada para diversos modelos em rede com diferentes tipos de estruturas, tais como redes triangulares, favo de mel (honeycomb), Kagome entre outras variantes (BAXTER, 1986; FISHER, 1959). As transformações envolvendo modelos clássicos normalmente estão relacionadas a modelos em que os termos dos spins clássicos são comutativos entre si e, conseqüentemente, não precisamos nos preocupar com a comutação. Existe uma classe de modelos com essa característica e grande parte dos modelos exatamente solúveis pertencem a essa classe. Em última análise, normalmente procuramos mapear o modelo estudado em algum outro modelo equivalente do ponto de vista físico e que, preferencialmente, tenha solução exata.

Nas próximas subseções apresentaremos mais detalhadamente o conceito de transformação de decoração clássica. Primeiro, iremos discutir a transformação de decoração usando um modelo de estrutura linear, onde a decoração será um spin central. Em seguida, vamos apresentar um estudo semelhante para o modelo estrela-triângulo. Certamente esta transformação poderá ser generalizada para uma transformação polígono de n lados para estrela de n pernas conforme discutido na literatura (ROJAS; VALVERDE; SOUZA, 2009).

A transformação de decoração para o modelo efetivo foi feita de forma semelhante ao desenvolvido no artigo de Fisher (1959), seguindo os seguintes passos:

- definimos a Hamiltoniana H do sistema em função dos parâmetros de acoplamento do modelo decorado e os operadores de spin do sistema;

- obtivemos o operador $W \equiv e^{-\beta H}$;
- realizamos a soma parcial sobre o operador do spin da decoração s em W , encontrando o operador $W_r \equiv \sum_{\{s\}} e^{-\beta H}$;
- definimos a Hamiltoniana \tilde{H} do modelo efetivo em função dos parâmetros efetivos;
- obtivemos o operador $\tilde{W} \equiv e^{-\beta \tilde{H}}$;
- obtivemos um sistema de equações geradas por $W_r \equiv \tilde{W}$;
- resolvemos o sistema para obtermos os parâmetros efetivos de \tilde{H} em função dos parâmetros do modelo decorado de H .

Como consequência de todo este processo, veremos que as informações físicas obtidas a partir dos parâmetros de acoplamento do modelo efetivo \tilde{H} dependem dos parâmetros de acoplamento do modelo decorado H . Assim sendo, informações físicas do sistema não são perdidas.

3.1 Transformação de decoração de duas pernas

O modelo linear ilustrado na Fig.?? representa no lado esquerdo um modelo linear decorado contendo três spins, sendo s o spin decorado, σ_1 e σ_2 os spins localizados. J é o parâmetro de acoplamento de interação entre os spins do sistema, h o campo magnético externo aplicado nos spins σ_1 e σ_2 e h_0 o campo magnético externo aplicado no spin s . O lado direito da figura representa o modelo linear efetivo após ter sido feita a transformação de decoração-iteração.

A energia do sistema que está ilustrado no lado esquerdo da Fig.?? é dada



Figura 1 Transformação de decoração clássica do modelo linear. Do lado esquerdo o modelo linear decorado e do lado direito o modelo linear efetivo.

pela Hamiltoniana H :

$$H = -J(s\sigma_1 + s\sigma_2) - h(\sigma_1 + \sigma_2) - h_0s, \quad (1)$$

onde o primeiro termo representa a interação entre os componentes z dos spins s , σ_1 e σ_2 , o segundo termo é a interação do campo magnético externo com os spins σ_1 e σ_2 e o último termo a interação do campo magnético externo com os spins s . Os spins σ_1 , σ_2 e s são os componentes z dos respectivos spins.

Podemos definir o operador W , como:

$$W = e^{-\beta H}, \quad (2)$$

onde $\beta = 1/(k_B T)$, k_B representando a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta em kelvin (K).

Para calcularmos a soma parcial em W , vamos somar os possíveis valores dos spins $s = \{1, -1\}$, resultando em:

$$W_r(\sigma_1, \sigma_2) \equiv \sum_{s=\pm 1} e^{-\beta(-J(s\sigma_1+s\sigma_2)-h(\sigma_1+s_2)-h_0s)} \equiv \omega_{(\sigma_1, \sigma_2)}, \quad (3)$$

onde $\omega_{\sigma_1, \sigma_2}$ é o peso de Boltzmann reduzido. Onde $s = 2\tilde{s}$, sendo que \tilde{s} representa o spin $-\frac{1}{2}$.

A função de partição associada ao operador W é um traço sobre os auto-

estados dos operadores $2\sigma_1^z$ e σ_2^z , ou seja:

$$2\sigma_1^z|\sigma_1\rangle = +\sigma_1|\sigma_1\rangle, \sigma_1 = \pm 1 \quad (4)$$

e

$$2\sigma_2^z|\sigma_2\rangle = +\sigma_2|\sigma_2\rangle, \sigma_2 = \pm 1 \quad (5)$$

e dos autoestados de s_z ,

$$2s_z|s\rangle = s|s\rangle, s = \pm 1. \quad (6)$$

$$Z = \text{tr}_{(s,\sigma_1,\sigma_2)}[W] = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \sum_{s=\pm 1} \langle \sigma_1 | \langle \sigma_2 | \langle s | W | s \rangle | \sigma_2 \rangle | \sigma_1 \rangle. \quad (7)$$

Onde:

$$W = e^{-\beta H} = e^{-\beta(-J(s\sigma_1^z + s\sigma_2^z) - h(\sigma_1^z + \sigma_2^z) - h_0 s_z)}, \quad (8)$$

sendo σ_1^z , σ_2^z e s_z os operadores associados à componente z dos operadores de spin associados aos spins σ_1 , σ_2 e s . Levando em consideração que os vetores de estado $|s\rangle$, $|\sigma_1\rangle$, $|\sigma_2\rangle$ são autovetores dos operadores s_z , σ_1^z e σ_2^z , respectivamente, então a função de partição é escrita em termos dos autovalores desses operadores,

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \sum_{s=\pm 1} e^{-\beta(-J(s\sigma_1 + s\sigma_2) - h(\sigma_1 + \sigma_2) - h_0 s)}. \quad (9)$$

Note que Z é uma função de β , $Z(\beta)$. Definimos a função $W_r(\sigma_1, \sigma_2)$ como

$$W_r(\sigma_1, \sigma_2) = \sum_{s=\pm 1} e^{-\beta(-J(s\sigma_1 + s\sigma_2) - h(\sigma_1 + \sigma_2) - h_0 s) \equiv \omega(\sigma_1, \sigma_2)}. \quad (10)$$

Explicitamente temos:

$$W_r(\sigma_1, \sigma_2) = e^{-\beta(-J(\sigma_1+\sigma_2)-h(\sigma_1+\sigma_2)-h_0)} + e^{-\beta(-J(-\sigma_1-\sigma_2)-h(\sigma_1+\sigma_2)+h_0)} \quad (11)$$

$$= 2e^{\beta h(\sigma_1+\sigma_2)} \cosh(\beta J(\sigma_1+\sigma_2) + \beta h_0) = \omega_{(\sigma_1, \sigma_2)}. \quad (12)$$

sendo $\sigma_1, \sigma_2 = \pm 1$. Usando a eq.(??), podemos expressar os quatro possíveis valores para $W_r(\sigma_1, \sigma_2)$ como:

$$W_r(1, 1) = 2e^{2\beta h} \cosh(2\beta J + \beta h_0) = \omega_{++}, \quad (13)$$

$$W_r(1, -1) = 2 \cosh(\beta h_0) = \omega_{+-}, \quad (14)$$

$$W_r(-1, 1) = 2 \cosh(\beta h_0) = \omega_{-+}, \quad (15)$$

$$W_r(-1, -1) = 2e^{-2\beta h} \cosh(-2\beta J + \beta h_0) = \omega_{--}, \quad (16)$$

sendo que os elementos (??) e (??) são idênticos.

Agora, podemos definir a Hamiltoniana do modelo efetivo (ID da Fig.??) como:

$$\tilde{H} = -\tilde{J}_0 - \tilde{J}\sigma_1\sigma_2 - \tilde{h}(\sigma_1 + \sigma_2), \quad (17)$$

sendo σ_1 e σ_2 as componentes z dos operadores de spin - $\frac{1}{2}$ associados aos spins σ_1 e σ_2 , implicando que todas as informações físicas contidas no spin s foram transferidas para o modelo efetivo. Semelhantemente ao modelo linear vamos obter o operador \tilde{W} ou o peso de Boltzmann $\tilde{\omega}$. Para isso usaremos $\tilde{\omega}$ como função de (σ_1, σ_2) para o modelo efetivo, assim temos:

$$\tilde{W}(\sigma_1, \sigma_2) = e^{-\beta\tilde{H}} = \tilde{\omega}(\sigma_1, \sigma_2), \quad (18)$$

substituindo a Hamiltoniana da eq.(??) no peso de Boltzmann da eq.(??), obtemos:

$$\tilde{W}(\sigma_1, \sigma_2) = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - \tilde{J}\sigma_1\sigma_2 - \tilde{h}(\sigma_1 + \sigma_2))} = \tilde{\omega}(\sigma_1, \sigma_2). \quad (19)$$

Pela eq.(??) temos que a função $W_r(\sigma_1, \sigma_2)$ é igual a:

$$\tilde{W}_r(\sigma_1, \sigma_2) = e^{-\beta(-J(\sigma_1+\sigma_2)-h(\sigma_1+\sigma_2)-h_0)} + e^{-\beta(-J(-\sigma_1-\sigma_2)-h(\sigma_1+\sigma_2)+h_0)}. \quad (20)$$

A partir da Hamiltoniana \tilde{H} , eq.(??), obtemos a função de partição associada:

$$\begin{aligned}\tilde{Z} &= \text{tr}_{(\sigma_1, \sigma_2)}[\tilde{W}] = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \langle \sigma_1 | \langle \sigma_2 | e^{-\beta \tilde{H}} | \sigma_1 \rangle \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - \tilde{J}\sigma_1\sigma_2 - \tilde{h}(\sigma_1 + \sigma_2))}.\end{aligned}\quad (21)$$

Definimos a função $\tilde{W}_{(\sigma_1, \sigma_2)}$ como:

$$\tilde{W}_{(\sigma_1, \sigma_2)} = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - \tilde{J}\sigma_1\sigma_2 - \tilde{h}(\sigma_1 + \sigma_2))} \equiv \tilde{\omega}_{(\sigma_1, \sigma_2)}, \quad (22)$$

sendo $(\sigma_1, \sigma_2) = \pm 1$. A função anterior $\tilde{\omega}_{(\sigma_1, \sigma_2)}$ tem quatro possíveis valores, que podemos expressar como:

$$\tilde{W}(1, 1) = e^{\beta(\tilde{J}_0 + \tilde{J} + 2\tilde{h})} = \tilde{\omega}_{++}, \quad (23)$$

$$\tilde{W}(1, -1) = \tilde{\omega}(-1, 1) = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 + \tilde{J})} = \tilde{\omega}_{+-} = \tilde{\omega}_{-+}, \quad (24)$$

$$\tilde{W}(-1, -1) = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - \tilde{J} + 2\tilde{h})} = \tilde{\omega}_{--}. \quad (25)$$

Vamos impor que o peso de Boltzmann do sistema decorado dado pela eq. (??) W_r seja igual ao operador do modelo efetivo dada pela eq. (??) \tilde{W} . Assim nosso objetivo é reescrever os parâmetros de acoplamento do modelo efetivo em termos dos elementos da matriz $\tilde{\omega}_{\sigma_1, \sigma_2}$. Para isso devemos resolver o sistema de equações encontrado acima. Aplicando o \ln nas eq.(??), (??) e (??), obtemos:

$$\beta \left(\tilde{J}_0 + \tilde{J} + 2\tilde{h} \right) = \ln(\tilde{\omega}_{++}), \quad (26)$$

$$-\beta \left(-\tilde{J}_0 + \tilde{J} \right) = \ln(\tilde{\omega}_{+-}), \quad (27)$$

$$-\beta \left(-\tilde{J}_0 - \tilde{J} + 2\tilde{h} \right) = \ln(\tilde{\omega}_{--}). \quad (28)$$

Resolvendo o sistema algébrico das equações (??), (??) e (??), manipulando algebricamente e impondo que os elementos das matrizes $\omega(\sigma_1, \sigma_2)$ e $\tilde{\omega}(\sigma_1, \sigma_2)$ sejam iguais, obtemos as seguintes

relações:

$$\tilde{J} = \frac{1}{4\beta} \ln \left(\frac{\omega_{++}\omega_{--}}{\omega_{+-}^2} \right), \quad (29)$$

$$\tilde{J}_0 = \frac{1}{4\beta} \ln (\omega_{++}\omega_{--}\omega_{+-}^2), \quad (30)$$

$$\tilde{h} = \frac{1}{4\beta} \ln \left(\frac{\omega_{++}}{\omega_{--}} \right). \quad (31)$$

Note que ω e $\tilde{\omega}$ devem ser idênticos, pelo fato de termos imposto a condição de que ambos os sistemas, decorado e efetivo, tenham o mesmo peso de Boltzmann. Assim os parâmetros do modelo efetivo podem ser escritos em termos do modelo original (decorado).

3.2 Transformação de decoração estrela-triângulo

Outros tipos de modelos em que podemos usar o método de transformação de decoração-iteração é o modelo estrela e o modelo triângulo esquematizado na Fig.???. Do lado esquerdo (i.e.) temos o modelo decorado com formato de uma estrela, com a decoração no centro da estrela identificada pelo spin s , enquanto que nas 3 pernas temos os spins σ_1 , σ_2 e σ_3 . No lado direito temos o modelo efetivo.

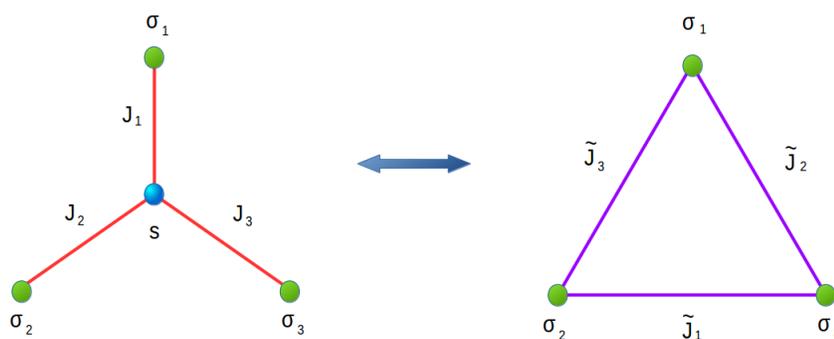


Figura 2 Representação da transformação estrela-triângulo. Do lado esquerdo temos uma estrela com a decoração em seu centro s . Do lado direito temos um triângulo que representa nesse caso o nosso modelo efetivo.

A Hamiltoniana do sistema decorado pode ser escrita como:

$$H = -J\sigma_0(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3), \quad (32)$$

onde J é o parâmetro de acoplamento entre os spins.

Agora vamos definir o peso de Boltzmann como W , dado por:

$$W = e^{-\beta H}, \quad (33)$$

sendo σ_1, σ_2 e σ_3 as componentes z dos operadores de spin - $\frac{1}{2}$ associados aos spins σ_1, σ_2 e σ_3 .

Realizando a soma parcial em s , temos:

$$W_r(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = \sum_{s=\pm 1} e^{-\beta(-J\sigma_0(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3))} \quad (34)$$

$$W_r = 2 \cosh(\beta J(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)), \quad (35)$$

$$W_r = 2 \cosh \beta(-J(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)) \equiv \omega(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3). \quad (36)$$

Parecido com o modelo linear, encontraremos dois spins distintos para $W(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = \omega(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$:

$$W_r(1, 1, 1) = 2 \cosh(-3\beta J) = \omega_{+++}, \quad (37)$$

$$W_r(1, 1, -1) = 2 \cosh(-\beta J) = \omega_{++-}. \quad (38)$$

De modo análogo à subseção anterior, definimos a Hamiltoniana efetiva \tilde{H} , que neste caso será o operador de energia da rede triangular, dada por:

$$\tilde{H} = -\tilde{J}_0 - \tilde{J}(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1). \quad (39)$$

A função $\tilde{W}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ relacionada a Hamiltoniana do sistema efetivo será dada por:

$$\tilde{W}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - \tilde{J}(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1))} \equiv \tilde{\omega}_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3}. \quad (40)$$

Assim como para W , temos dois valores possíveis para \tilde{W} :

$$\tilde{W}(1, 1, 1) = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - 3\tilde{J})} = \tilde{\omega}_{+++}, \quad (41)$$

$$\tilde{W}(1, 1, -1) = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 + \tilde{J})} = \tilde{\omega}_{++-}. \quad (42)$$

Com isso, podemos montar um sistema através de $\omega \equiv \tilde{\omega}$ ou de $W_r \equiv \tilde{W}$, e resolvê-lo para obtermos os parâmetros da Hamiltoniana efetiva H em função dos parâmetros da Hamiltoniana

do sistema decorado \tilde{H} . Assim, obtemos:

$$e^{-\beta(-\tilde{J}_0-3\tilde{J})} = \tilde{\omega}_{+++}, \quad (43)$$

$$e^{-\beta(-\tilde{J}_0+\tilde{J})} = \tilde{\omega}_{++-}. \quad (44)$$

Resolvendo o sistema de equações (43) e (44) obtemos o seguinte resultado para os parâmetros \tilde{J} e \tilde{J}_0 , em função dos ω :

$$\tilde{J} = \frac{1}{4\beta} \ln \left(\frac{\omega_{+++}}{\omega_{++-}} \right), \quad (45)$$

$$\tilde{J}_0 = \frac{1}{4\beta} \ln (\omega_{+++}\omega_{++-}^3). \quad (46)$$

Esse resultado mostra que podemos obter os parâmetros do modelo efetivo em termos dos parâmetros do modelo decorado.

O principal objetivo dessas subseções foi mostrar um método geral para mapear modelos clássicos decorados, em outros modelos clássicos efetivos. A seguir, temos como objetivos generalizar e aplicar esse método a vários modelos quânticos na rede, explorar a física envolvida no mapeamento e modelos, além de obter o regime de validade dos mapeamentos.

4 TRANSFORMAÇÃO DE DECORAÇÃO QUÂNTICA

4.1 Transformação de decoração quântica para duas pernas

Para generalizarmos a transformação de decoração, precisamos generalizar os fatores de Boltzmann Fisher (1959), Rojas, Valverde e Souza (2009) e Syozi (1972), considerando-os como operadores, os quais levam todas as informações relacionadas ao Hamiltoniano quântico dos sistemas.



Figura 3 Representação esquemática da transformação de decoração quântica. s corresponde ao spin decorado, enquanto que σ_1 e σ_2 correspondem aos spins de Heisenberg e H (\tilde{H}) corresponde ao Hamiltoniano decorado (efetivo) respectivamente.

Portanto, consideremos o sistema decorado ilustrado na fig.??, composto por operadores quânticos arbitrários σ_1 e σ_2 , enquanto que s é qualquer outro operador chamado de "operador decorado". Definindo o operador \mathbf{W} como $\mathbf{W} = e^{-\beta \mathbf{H}}$, onde \mathbf{H} é a Hamiltoniana do sistema decorado ilustrado no lado esquerdo da fig.??, e $\beta = \frac{1}{k_B T}$, com k_B sendo a constante de Boltzmann e T é a temperatura absoluta em kelvin (K).

Note que, realizando o traço sobre todos os spins do sistema decorado, deve-se obter a função de partição $Z = \text{tr}(\mathbf{W})$, com tr denotando o traço total. O operador \mathbf{W} dividido por Z é o operador densidade $\rho = \frac{\mathbf{W}}{Z}$ do sistema.

Definiremos os autovalores e autovetores ortonormais da Hamiltoniana \mathbf{H} como ε_n e $|\eta_n\rangle$, respectivamente e que formam uma base completa de \mathbf{H} . Assim, o operador \mathbf{W} poder ser expresso por:

$$\mathbf{H}|\eta_n\rangle = \varepsilon_n|\eta_n\rangle, \quad (47)$$

sendo que $\langle \eta_n | \eta_m \rangle = \delta_{nm}$ e $\sum_{n=1}^{\dim(\mathbf{H})} |\eta_n\rangle \langle \eta_n| = \mathbf{1}$, onde $\mathbf{1}$ é o operador identidade. Então temos:

$$\mathbf{W} = e^{-\beta \mathbf{H}} = \sum_{n=1}^{\dim(\mathbf{H})} e^{-\beta \varepsilon_n} |\eta_n\rangle \langle \eta_n|, \quad (48)$$

onde $\dim(\mathbf{H})$ significa a dimensão da base dos autoestados ortonormais da Hamiltoniana \mathbf{H} . Multiplicando ambos os lados do operador \mathbf{W} pelo operador identidade $\mathbf{1} = \sum_{s,\sigma_1,\sigma_2} |s,\sigma_1,\sigma_2\rangle\langle s,\sigma_1,\sigma_2|$, temos:

$$\begin{aligned}
\mathbf{W} &= \sum_{s,\sigma_1,\sigma_2} \sum_{s',\sigma'_1,\sigma'_2} |s,\sigma_1,\sigma_2\rangle\langle s,\sigma_1,\sigma_2| e^{-\beta\mathbf{H}} |s',\sigma'_1,\sigma'_2\rangle\langle s',\sigma'_1,\sigma'_2|, \\
&= \sum_{s,\sigma_1,\sigma_2} \sum_{s',\sigma'_1,\sigma'_2} \langle s,\sigma_1,\sigma_2| e^{-\beta\mathbf{H}} |s',\sigma'_1,\sigma'_2\rangle |s,\sigma_1,\sigma_2\rangle\langle s',\sigma'_1,\sigma'_2|, \\
&= \sum_{n=1}^{\dim(\mathbf{H})} \sum_{s,\sigma_1,\sigma_2} \sum_{s',\sigma'_1,\sigma'_2} e^{-\beta\varepsilon_n} \langle s,\sigma_1,\sigma_2|\eta_n\rangle \langle \eta_n|s',\sigma'_1,\sigma'_2\rangle |s,\sigma_1,\sigma_2\rangle\langle s',\sigma'_1,\sigma'_2|, \\
&= \sum_{n=1}^{\dim(\mathbf{H})} \sum_{s,\sigma_1,\sigma_2} \sum_{s',\sigma'_1,\sigma'_2} e^{-\beta\varepsilon_n} c_{s,\sigma_1,\sigma_2}^{n*} c_{s',\sigma'_1,\sigma'_2}^n |s,\sigma_1,\sigma_2\rangle\langle s',\sigma'_1,\sigma'_2|,
\end{aligned} \tag{49}$$

$$\tag{50}$$

sendo que a base do espaço produto $|s,\sigma_1,\sigma_2\rangle$ é completa, de maneira que $\sum_{s,\sigma_1,\sigma_2} |s,\sigma_1,\sigma_2\rangle\langle s,\sigma_1,\sigma_2| = \mathbf{1}$, sendo $\mathbf{1}$ o operador identidade, como a base $|s,\sigma_1,\sigma_2\rangle$ é completa, escrevemos os autovetores $|\eta_n\rangle$ da Hamiltoniana nesta base produto de $|\eta_n\rangle = \sum_{s,\sigma_1,\sigma_2} c_{s,\sigma_1,\sigma_2}^n |s,\sigma_1,\sigma_2\rangle$ onde os coeficientes são denotados por $c_{s,\sigma_1,\sigma_2}^n = \langle \eta_n|s,\sigma_1,\sigma_2\rangle$ e $c_{s,\sigma_1,\sigma_2}^{n*} = \langle s,\sigma_1,\sigma_2|\eta_n\rangle = \langle \eta_n|s,\sigma_1,\sigma_2\rangle$.

O nosso objetivo é calcular a função de partição associada a Hamiltoniana \mathbf{H} . Para obtermos essa função termodinâmica calcularemos o traço do operador \mathbf{W}_r . Como o traço é independente da base utilizada, podemos usar a base produto $|s,\sigma_1,\sigma_2\rangle$ para calcularmos o $\text{tr}(\mathbf{W}) = \text{tr}_{(s,\sigma_1,\sigma_2)}(\mathbf{W})$. Agora, vamos calcular o traço parcial sobre o operador quântico decorado s , este resultado é ainda um operador que chamamos de operador reduzido \mathbf{W}_r , o qual é expresso como:

$$\mathbf{W}_r = \text{tr}_s \left(e^{-\beta\mathbf{H}} \right) = \sum_s \langle s|\mathbf{W}|s\rangle. \tag{51}$$

Explicitamente, o traço parcial do operador quântico decorado fica:

$$\mathbf{W}_r = \sum_{n=1}^{\dim(\mathbf{H})} \sum_{s,\sigma_1,\sigma_2} \sum_{s',\sigma'_1,\sigma'_2} e^{-\beta\varepsilon_n} c_{s,\sigma_1,\sigma_2}^{n*} c_{s',\sigma'_1,\sigma'_2}^n |s,\sigma_1,\sigma_2\rangle\langle s',\sigma'_1,\sigma'_2|, \tag{52}$$

onde assumimos o seguinte produto escalar parcial em s : $|\sigma_1,\sigma_2\rangle = \langle s|s,\sigma_1,\sigma_2\rangle$ e $\langle \sigma_1,\sigma_2| = \langle s,\sigma_1,\sigma_2|s\rangle$. Usando este resultado, podemos reescrever os coeficientes do operador reduzido \mathbf{W}_r

simplesmente como

$$r_{\sigma_1, \sigma_2; \sigma'_1, \sigma'_2} = \sum_{n=1}^{\dim(\mathbf{H})} \sum_s e^{-\beta \varepsilon_n} c_{s, \sigma_1, \sigma_2}^{n*} c_{s, \sigma'_1, \sigma'_2}^n. \quad (53)$$

Por outro lado, o sistema transformado é esquematicamente representado no lado direito da fig.???. Note que o operador reduzido \mathbf{W}_r somente depende dos operadores quânticos σ_1 e σ_2 . Definimos um outro operador $\tilde{\mathbf{W}} = e^{-\beta \tilde{\mathbf{H}}}$, com $\tilde{\mathbf{H}}$ sendo a Hamiltoniana do sistema transformado ou simplesmente chamado de Hamiltoniano efetivo. Sejam $|\zeta_n\rangle$ os autovalores da Hamiltoniana $\tilde{\mathbf{H}}$, onde $\tilde{\mathbf{H}}|\zeta_n\rangle = \tilde{\varepsilon}_n|\zeta_n\rangle$, sendo $\tilde{\varepsilon}_n$ o autovalor associado ao autovetor $|\zeta_n\rangle$. Por hipótese o conjunto de todos os vetores forma uma base completa, $\sum_{n=1} |\zeta_n\rangle\langle\zeta_n| = \mathbf{1}$.

Mais uma vez, multiplicando ambos os lados do operador $\tilde{\mathbf{W}}$ pela matriz identidade $\mathbf{1} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} |\sigma_1, \sigma_2\rangle\langle\sigma_1, \sigma_2|$, obtemos:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{W}} &= \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_{\sigma'_1, \sigma'_2} |\sigma_1, \sigma_2\rangle\langle\sigma_1, \sigma_2| e^{-\beta \tilde{\mathbf{H}}} |\sigma'_1, \sigma'_2\rangle\langle\sigma'_1, \sigma'_2|, \\ &= \sum_{n=1}^{\dim(\tilde{\mathbf{H}})} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_{\sigma'_1, \sigma'_2} e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_n} \langle\sigma_1, \sigma_2|\zeta_n\rangle\langle\zeta_n|\sigma'_1, \sigma'_2\rangle |\sigma_1, \sigma_2\rangle\langle\sigma'_1, \sigma'_2| \\ &= \sum_{n=1}^{\dim(\tilde{\mathbf{H}})} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sum_{\sigma'_1, \sigma'_2} e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_n} \tilde{c}_{\sigma_1, \sigma_2}^{n*} \tilde{c}_{\sigma'_1, \sigma'_2}^n |\sigma_1, \sigma_2\rangle\langle\sigma'_1, \sigma'_2| \end{aligned} \quad (54)$$

onde $\tilde{c}_{\sigma_1, \sigma_2}^n = \langle\zeta_n|\sigma_1, \sigma_2\rangle$ e $\tilde{c}_{\sigma_1, \sigma_2}^{n*} = \langle\sigma_1, \sigma_2|\zeta_n\rangle$. A completeza da base produto $|\sigma_1, \sigma_2\rangle$ permite decompor os vetores de estado $|\zeta_n\rangle$ nesta base $|\zeta_n\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \tilde{c}_{\sigma_1, \sigma_2}^n |\sigma_1, \sigma_2\rangle$.

A base $|\sigma_1, \sigma_2\rangle$ também é completa para o espaço produto de vetores de estados dos sítios ocupados pelos spins σ_1 e σ_2 , de maneira que o operador deste espaço possa ser escrito como $\mathbf{1}_{\sigma_1 \otimes \sigma_2} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} |\sigma_1, \sigma_2\rangle\langle\sigma_1, \sigma_2|$.

Similarmente, consideramos $\tilde{\varepsilon}_n$ e $|\zeta_n\rangle$ sendo os autovalores e autovetores da Hamiltoniana $\tilde{\mathbf{H}}$. Além disso, os elementos de $\tilde{\mathbf{W}}$ são dados por:

$$\tilde{r}_{\sigma_1, \sigma_2; \sigma'_1, \sigma'_2} = \sum_{n=1}^{\dim(\tilde{\mathbf{H}})} e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_n} \tilde{c}_{\sigma_1, \sigma_2}^{n*} \tilde{c}_{\sigma'_1, \sigma'_2}^n. \quad (55)$$

Quando os sistemas satisfazem a relação $\mathbf{W}_r \propto \tilde{\mathbf{W}}$, o sistema reduzido é equivalente ao sistema efetivo, onde ambos dependem somente dos operadores σ_1 e σ_2 .

Portanto, todos os elementos de \mathbf{W}_r e $\tilde{\mathbf{W}}$ devem ser idênticos, resultando em:

$$r_{\sigma_1, \sigma_2; \sigma'_1, \sigma'_2} = \tilde{r}_{\sigma_1, \sigma_2; \sigma'_1, \sigma'_2}. \quad (56)$$

Sem dúvida, esta é uma generalização natural da transformação de decoração, considerado inicialmente nas referências Fisher (1959), Rojas, Valverde e Souza (2009) e Syozi (1972).

A transformação acima poderia ser aplicada para uma série de modelos de spin Heisenberg, neste sentido, consideramos alguns casos particulares para ilustrar esta transformação.

4.1.1 Transformação de decoração quântica para o modelo XXZ com spins-

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \mathbf{XXZ}$$

Primeiro, vamos considerar um sistema simples, representado esquematicamente pela fig.??, com acoplamento puro de Heisenberg. Então, o Hamiltoniano decorado do modelo de spins- $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ XXZ pode ser escrito como:

$$\mathbf{H} = -J [s^x (\sigma_1^x + \sigma_2^x) + s^y (\sigma_1^y + \sigma_2^y)] - \Delta s^z (\sigma_1^z + \sigma_2^z) - h (\sigma_1^z + \sigma_2^z) - h_1 s^z, \quad (57)$$

onde $\sigma_i^x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, $\sigma_i^y = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$ e $\sigma_i^z = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ são os operadores das componentes de spin-1/2, com $i = \{1, 2\}$, e o operador do spin decorado s^α (com $\alpha = \{x, y, z\}$) também são outros operadores dos componentes do spin-1/2, definidos do mesmo modo para operadores σ_i^α . J é o parâmetro de acoplamento no eixo xy , e Δ representa o acoplamento anisotrópico no eixo z . Aqui $h = gB$ e $h_1 = g_1B$, com B sendo o campo magnético agindo no σ_1^z , σ_2^z e s^z , sendo g_1 (g) o fator-g de Landé para s^z (σ_1^z e σ_2^z), respectivamente.

Para diagonalizarmos o Hamiltoniano \mathbf{H} , expressamos-o na base natural $\{|s, \sigma_1, \sigma_2\rangle\} = \{|\uparrow, +, +\rangle, |\uparrow, +, -\rangle, |\uparrow, -, +\rangle, |\downarrow, +, +\rangle, |\uparrow, -, -\rangle, |\downarrow, +, -\rangle, |\downarrow, -, +\rangle, |\downarrow, -, -\rangle\}$. Para informação mais detalhada veja o Apêndice A (??).

A seguir diagonalizamos o Hamiltoniano H (??), obtendo os seguintes autovalores:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1 &= -\frac{\Delta}{2} - \frac{h_1}{2} - h, \\
\varepsilon_2 &= -\frac{h_1}{2}, \\
\varepsilon_3 &= \frac{\Delta}{4} - \frac{h}{2} + \frac{\vartheta}{4}, \\
\varepsilon_4 &= \frac{\Delta}{4} - \frac{h}{2} - \frac{\vartheta}{4}, \\
\varepsilon_5 &= \frac{h_1}{2}, \\
\varepsilon_6 &= \frac{\Delta}{4} + \frac{h}{2} + \frac{\vartheta}{4}, \\
\varepsilon_7 &= \frac{\Delta}{4} + \frac{h}{2} - \frac{\vartheta}{4}, \\
\varepsilon_8 &= -\frac{\Delta}{2} + \frac{h_1}{2} + h,
\end{aligned} \tag{58}$$

$$\text{com } \theta = \sqrt{(\Delta + 2h - 2h_1)^2 + 8J^2} \text{ e } \vartheta = \sqrt{(\Delta - 2h + 2h_1)^2 + 8J^2}.$$

Os autovetores correspondentes são:

$$\begin{aligned}
|\eta_1\rangle &= |\uparrow, +, +\rangle, \\
|\eta_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, +, -\rangle - |\uparrow, -, +\rangle), \\
|\eta_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\phi) |\uparrow, +, -\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\phi) |\uparrow, -, +\rangle + \cos(\phi) |\downarrow, +, +\rangle, \\
|\eta_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\phi) |\uparrow, +, -\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\phi) |\uparrow, -, +\rangle - \sin(\phi) |\downarrow, +, +\rangle, \\
|\eta_5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, +, -\rangle - |\downarrow, -, +\rangle), \\
|\eta_6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\varphi) |\downarrow, +, -\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin(\varphi) |\downarrow, -, +\rangle - \cos(\varphi) |\uparrow, -, -\rangle, \\
|\eta_7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\varphi) |\downarrow, +, -\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \cos(\varphi) |\downarrow, -, +\rangle + \sin(\varphi) |\uparrow, -, -\rangle, \\
|\eta_8\rangle &= |\downarrow, -, -\rangle,
\end{aligned} \tag{59}$$

com:

$$\phi = \tan^{-1} \left(\frac{\theta - (\Delta + 2h - 2h_1)}{2\sqrt{2}J} \right), \quad \text{e} \quad -\frac{\pi}{2} \leq \phi \leq \frac{\pi}{2}, \tag{60}$$

$$\varphi = \tan^{-1} \left(\frac{\vartheta - (\Delta - 2h + 2h_1)}{2\sqrt{2}J} \right), \quad \text{e} \quad -\frac{\pi}{2} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}. \tag{61}$$

Portanto, realizando o traço parcial em s usando a eq.??, obtemos o operador reduzido \mathbf{W}_r em termos da base natural $\{|\sigma_1, \sigma_2\rangle\} = \{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\}$. Assim, a representação

matricial do operador \mathbf{W}_r nesta base torna-se

$$\mathbf{W}_r = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{w_2+w_3}{2} & \frac{w_2-w_3}{2} & 0 \\ 0 & \frac{w_2-w_3}{2} & \frac{w_2+w_3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w_4 \end{bmatrix}, \quad (62)$$

onde os elementos de \mathbf{W}_r são obtidos a partir da eq. (??) e dados por

$$w_1 = r_{1,1} = \sum_{n=1}^{\dim(\tilde{H})} \sum_{s=\uparrow,\downarrow} e^{-\beta\varepsilon_n} |c_{s,+}^n|^2, \quad (63)$$

$$\frac{w_2+w_3}{2} = r_{2,2} = \sum_{n=1}^{\dim(\tilde{H})} \sum_{s=\uparrow,\downarrow} e^{-\beta\varepsilon_n} |c_{s,+,-}^n|^2, \quad (64)$$

$$\frac{w_2-w_3}{2} = r_{2,3} = \sum_{n=1}^{\dim(\tilde{H})} \sum_{s=\uparrow,\downarrow} e^{-\beta\varepsilon_n} c_{s,+,-}^{n*} c_{s,-,+}^n, \quad (65)$$

$$w_4 = r_{4,4} = \sum_{n=1}^{\dim(\tilde{H})} \sum_{s=\uparrow,\downarrow} e^{-\beta\varepsilon_n} |c_{s,-,-}^n|^2. \quad (66)$$

Usando um programa que permite a manipulação algébrica, expressamos os coeficientes de \mathbf{W}_r na base natural, como uma função de w_1, \dots, w_4 , os quais são dados explicitamente por

$$w_1 = e^{-\frac{\beta(\Delta-2h+\vartheta)}{4}} \cos^2(\phi) + e^{-\frac{\beta(\Delta-2h-\vartheta)}{4}} \sin^2(\phi) + e^{\frac{\beta(\Delta+h_1+2h)}{2}}, \quad (67)$$

$$w_2 = \left(e^{\frac{\beta\vartheta}{4}} \cos^2(\phi) + e^{-\frac{\beta\vartheta}{4}} \sin^2(\phi) \right) e^{-\frac{\beta(\Delta-2h)}{4}} + \left(e^{-\frac{\beta\vartheta}{4}} \sin^2(\phi) + e^{\frac{\beta\vartheta}{4}} \cos^2(\phi) \right) e^{-\frac{\beta(\Delta+2h)}{4}}, \quad (68)$$

$$w_3 = 2 \cosh\left(\frac{\beta h_1}{2}\right), \quad (69)$$

$$w_4 = e^{-\frac{\beta(\Delta+2h+\vartheta)}{4}} \cos^2(\varphi) + e^{-\frac{\beta(\Delta+2h-\vartheta)}{4}} \sin^2(\varphi) + e^{\frac{\beta(\Delta-h_1-2h)}{2}}. \quad (70)$$

Alternativamente, pode-se expressar \mathbf{W}_r como a soma de operadores de projeção dos autovetores $|\eta_n\rangle$ da Hamiltoniana (??):

$$\mathbf{W}_r = \sum_{k=1}^4 w_k |\zeta_k\rangle \langle \zeta_k|, \quad (71)$$

onde:

$$|\varsigma_1\rangle = |++\rangle, \quad |\varsigma_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \quad |\varsigma_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle), \quad |\varsigma_4\rangle = |++\rangle. \quad (72)$$

Uma notação similar foi usada na referência Dunn e Essam (1972), para modelo diluído de Heisenberg.

Escrevendo na base natural $\{|\sigma_1, \sigma_2\rangle\}$, a Hamiltoniana \tilde{H} se torna

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} -\tilde{J}_0 - \frac{\tilde{\Delta}}{4} - \tilde{h} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} & -\frac{\tilde{J}}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\tilde{J}_0 - \frac{\tilde{\Delta}}{4} + \tilde{h} \end{bmatrix}. \quad (73)$$

Usando a Hamiltoniana (??), podemos escrever a representação matricial do operador $\tilde{W} = e^{-\beta\tilde{H}}$, na base natural $\{|\sigma_1, \sigma_2\rangle\}$. Então, a matriz \tilde{W} é dada explicitamente como:

$$\tilde{W} = \begin{bmatrix} \tilde{w}_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\tilde{w}_2 + \tilde{w}_3}{2} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{2} & \frac{\tilde{w}_2 + \tilde{w}_3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{w}_4 \end{bmatrix}, \quad (74)$$

onde os elementos de \tilde{W} podem ser expressados em termos do parâmetros da Hamiltoniana efetiva

$$\tilde{w}_1 = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - \frac{\tilde{\Delta}}{4} - \tilde{h})}, \quad (75)$$

$$\tilde{w}_2 = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} - \frac{\tilde{J}}{2})}, \quad (76)$$

$$\tilde{w}_3 = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} + \frac{\tilde{J}}{2})}, \quad (77)$$

$$\tilde{w}_4 = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - \frac{\tilde{\Delta}}{4} + \tilde{h})}. \quad (78)$$

Alternativamente, usando o operador projeção, análogo ao operador (??), também temos:

$$\tilde{W} = \sum_{k=1}^4 \tilde{w}_k |\varsigma_k\rangle \langle \varsigma_k|, \quad (79)$$

onde $|\varsigma_k\rangle$ são os autovetores de \tilde{H} , o mesmo dado pela eq. (??), e obviamente satisfaz $[\mathbf{W}_r, \tilde{W}] =$

0. Por outro lado, consideremos que a Hamiltoniana transformada poderia ser expressa como:

$$\tilde{\mathbf{H}} = -\tilde{J}_0 - \tilde{J}(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y) - \tilde{\Delta} \sigma_1^z \sigma_2^z - \tilde{h}(\sigma_1^z + \sigma_2^z), \quad (80)$$

onde \tilde{J}_0 é uma “constante” de energia, \tilde{J} é o parâmetro de acoplamento entre σ_1 e σ_2 no eixo xy , $\tilde{\Delta}$ representa o parâmetro de acoplamento no eixo z . enquanto que $\tilde{h} = g\tilde{B}$, \tilde{B} representa o campo magnético externo em ambos os operadores σ_1^z e σ_2^z , com g sendo o factor-g de Landé.

Uma vez que conhecemos a representação matricial dos operadores \mathbf{W}_r e $\tilde{\mathbf{W}}$, observe que ambas as matrizes têm a mesma estrutura, isto significa que, as matrizes são proporcionais (cada elemento é proporcional pela mesma constante de proporcionalidade). Então, podemos impor que os elementos correspondentes devem ser idênticos, o que implica em $\tilde{w}_1 = w_1$, $\tilde{w}_2 = w_2$, $\tilde{w}_3 = w_3$ e $\tilde{w}_4 = w_4$. Além disso, esta condição estabelece um sistema de equações algébricas, com 4 parâmetros desconhecidos \tilde{J}_0 , \tilde{J} , $\tilde{\Delta}$ e \tilde{h} , os quais podem ser obtidos em função dos parâmetros do Hamiltoniano decorado J , Δ , h e h_1 . Por exemplo, podemos escrever apenas como função de w_1 , w_2 , w_3 e w_4 , os quais são explicitamente determinados pela eqs.(??-??). Em seguida, resolvendo o sistema algébrico temos:

$$\tilde{J}_0 = \frac{1}{4\beta} \ln(w_1 w_2 w_3 w_4), \quad (81)$$

$$\tilde{\Delta} = \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{w_1 w_4}{w_2 w_3}\right), \quad (82)$$

$$\tilde{h} = \frac{1}{2\beta} \ln\left(\frac{w_1}{w_4}\right), \quad (83)$$

$$\tilde{J} = \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{w_2}{w_3}\right). \quad (84)$$

Finalmente, pode-se ver que o resultado para \tilde{J}_0 , $\tilde{\Delta}$ e \tilde{h} em termos de w_1 , w_2 , w_3 e w_4 são bastante semelhantes à transformação de decoração clássica (FISHER, 1959; ROJAS; VALVERDE; SOUZA, 2009; SYOZI, 1972). É fácil ver que \tilde{J} se anula quando $w_2 = w_3$ seguindo a eq.??, e também porque $J = 0$ na Hamiltoniana original.

4.1.2 Transformação de coração quântica para o modelo XXZ com spins-

$$\left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

No que segue, consideramos o spin \mathbf{s} como o operador decorado quântico com spin-1. Assim, o modelo decorado XXZ com spins- $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ tem Hamiltoniana dado por

$$\mathbf{H} = -J [s^x (\sigma_1^x + \sigma_2^x) + s^y (\sigma_1^y + \sigma_2^y)] - \Delta s^z (\sigma_1^z + \sigma_2^z). \quad (85)$$

A definição do modelo é bastante semelhante ao caso anterior; a única diferença é que s^α agora torna-se $s^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$, $s^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$, $s^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$. No entanto σ_1^α e σ_2^α , (com $\alpha = \{x, y, z\}$) são operadores de spin-1/2 como definido na seção anterior. A Hamiltoniana na base natural $\{|s, \sigma_1, \sigma_2\rangle\}$ torna-se uma matriz 12×12 . A representação da matricial da Hamiltoniana \mathbf{H} é mostrada no Apêndice A (??).

Depois de diagonalizar a representação matricial da Hamiltoniana (??), obtemos os seguintes autovalores:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_{12} = -\Delta, \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon_9 = J, \\ \varepsilon_3 &= \varepsilon_{10} = -J, \\ \varepsilon_4 &= \varepsilon_8 = \varepsilon_{11} = 0, \\ \varepsilon_5 &= \frac{\Delta}{2} + \frac{\Delta}{2 \cos(\phi)}, \\ \varepsilon_6 &= \frac{\Delta}{2} - \frac{\Delta}{2 \cos(\phi)}, \\ \varepsilon_7 &= \Delta, \end{aligned} \quad (86)$$

onde $\phi = \tan^{-1} \left(\frac{4J}{\sqrt{2}\Delta} \right)$, com $-\frac{\pi}{2} \leq \phi \leq \frac{\pi}{2}$. Os correspondentes autovetores são descritos na eq. (??) do Apêndice A. O autovalor $\varepsilon = 0$ tem degenerescência igual a 3.

Depois de calcular o traço parcial sobre \mathbf{s} usamos a eq.(??) e obtemos o operador reduzido \mathbf{W}_r , o qual tem a mesma estrutura do operador obtido na eq.(??), em termos da base natural

$\{|\sigma_1, \sigma_2\rangle\}$. Já os w_1 , w_2 e w_3 são expressos por:

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{1}{2} e^{-\frac{\beta\Delta}{2}} \cosh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) - \frac{1}{2} e^{-\frac{\beta\Delta}{2}} \sinh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) \cos(\phi) + \\ &\quad + \cosh(\beta J) + e^{\beta\Delta} + \frac{1}{2} e^{-\beta\Delta}, \\ w_2 &= e^{-\frac{\beta\Delta}{2}} \cosh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) + e^{-\frac{\beta\Delta}{2}} \sinh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) \cos(\phi) + 2 \cosh(\beta J), \\ w_3 &= 3, \\ w_4 &= \frac{1}{2} e^{-\frac{\beta\Delta}{2}} \cosh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) - \frac{1}{2} e^{-\frac{\beta\Delta}{2}} \sinh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) \cos(\phi) + \\ &\quad + \cosh(\beta J) + e^{\beta\Delta} + \frac{1}{2} e^{-\beta\Delta}. \end{aligned}$$

onde é fácil ver que, para campo magnético nulo, temos a simetria $w_4 = w_1$.

Por outro lado, os elementos (autovalores) da representação matricial do operador \tilde{W} são dados pela eq.(??):

$$\tilde{w}_1 = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 - \frac{\tilde{\Delta}}{4})}, \quad (87)$$

$$\tilde{w}_2 = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} - \frac{\tilde{J}}{2})}, \quad (88)$$

$$\tilde{w}_3 = e^{-\beta(-\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} + \frac{\tilde{J}}{2})}, \quad (89)$$

e no caso limite de campo magnético nulo, temos $\tilde{w}_4 = \tilde{w}_1$.

Consequentemente, as matrizes \mathcal{W}_r e \tilde{W} , têm a mesma estrutura. Isto significa que as matrizes são proporcionais (todos os elementos correspondentes são proporcionais e com a mesma constante de proporcionalidade). A seguir, podemos impor que os elementos devem ser idênticos para as representações matriciais de ambos os operadores. Como no caso anterior, temos três parâmetros \tilde{J}_0 , \tilde{J} , e $\tilde{\Delta}$ a serem determinados e três equações algébricas. Então, podemos obter todos os parâmetros desconhecidos \tilde{J}_0 , \tilde{J} e $\tilde{\Delta}$ do sistema efetivo como uma função dos parâmetros do Hamiltoniano decorado J e Δ . Resolvendo o sistema algébrico temos:

$$\tilde{J}_0 = \frac{1}{4\beta} \ln [w_1^2 w_2 w_3], \quad (90)$$

$$\tilde{\Delta} = \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{w_1^2}{w_2 w_3} \right), \quad (91)$$

$$\tilde{J} = \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{w_2}{w_3} \right). \quad (92)$$

Note que este resultado também pode ser obtido diretamente das eqs. (??) e (??) assumindo $w_1 = w_4$. Para o caso de $w_2 = w_3$, temos $\tilde{J} = 0$, o qual corresponde à transformação de decoração clássica.

Muitas variantes de modelos de tipo Heisenberg podem ser mapeados em outro modelo efetivo tipo Heisenberg. Do nosso resultado anterior dado por (??) e (??), podemos verificar esta relação. No entanto, para transformar o modelo isotrópico de Heisenberg em outro modelo efetivo isotrópico de Heisenberg, precisamos impor a seguinte relação:

$$w_1 w_4 = w_2^2. \quad (93)$$

O modelo de Heisenberg Isotrópico ($\Delta = J$) na ausência de campo magnético pode ser mapeado em outro modelo efetivo isotrópico ($\tilde{\Delta} = \tilde{J}$), embora esta simetria seja quebrada quando o modelo está sob a ação de campo magnético. Assim, o modelo de Heisenberg isotrópico ($\Delta = J$) será mapeado num outro modelo efetivo de Heisenberg anisotrópico ($\tilde{\Delta} \neq \tilde{J}$).

Nem todos os modelos podem ser mapeados num outro modelo com a sua simetria original. Um comportamento semelhante pode ser encontrado para o modelo XY, pois a transformação nos leva a um modelo efetivo XYZ, não discutido nesse trabalho (Uma discussão detalhada será considerada mais tarde, em outra revista).

4.2 Transformação de decoração quântica triângulo-estrela

Agora vamos considerar um outro sistema quântico muito interessante tipo estrela com 3-pernas. O operador de spin decorado está localizado no centro da estrela denotado por operador de spin s chamado de "operador decorado", e em cada perna estão distribuídos os operadores σ_1 , σ_2 e σ_3 .

Definimos o operador $\mathbf{W} = e^{-\beta \mathbf{H}}$, onde \mathbf{H} é a Hamiltoniana do sistema decorado como ilustrado no lado esquerdo de fig.???. Assumindo os autovalores e autovetores da Hamiltoniana \mathbf{H} como ε_n , e $|\eta_n\rangle$, respectivamente, com $n = \{1, \dots, \dim(\mathbf{H})\}$, sendo $\dim(\mathbf{H})$ a dimensão do espaço de Hilbert associado a esta Hamiltoniana, ou seja, $\mathbf{H}|\eta_n\rangle$. Por hipótese os autovetores da Hamiltoniana formam uma base completa. Por ser uma base completa temos que $\sum_{n=1}^{\dim(\mathbf{H})} |\eta_n\rangle\langle\eta_n| = \mathbf{1}$, sendo $\mathbf{1}$ o operador identidade sobre o espaço de Hilbert associado a

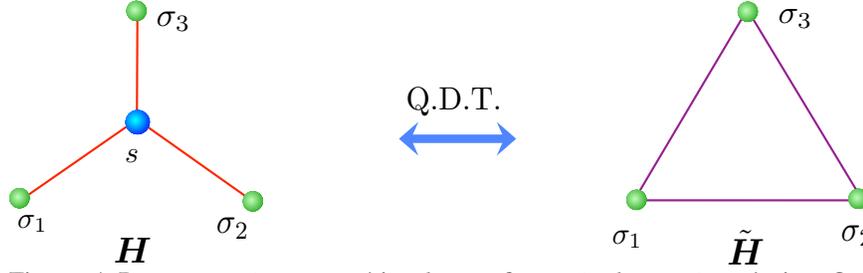


Figura 4 Representação esquemática da transformação de decoração quântica. Onde s corresponde ao spin decorado, enquanto que σ_1 , σ_2 and σ_3 correspondem ao spin de Heisenberg, H (\tilde{H}) corresponde ao Hamiltoniano decorado (efetivo) respectivamente.

Hamiltoniana H . Portanto, o operador \mathbf{W} pode ser expresso por:

$$\mathbf{W} = e^{-\beta H} = \sum_{n=1}^{\dim(H)} e^{-\beta \varepsilon_n} |\eta_n\rangle \langle \eta_n|. \quad (94)$$

Multiplicando ambos os lados do operador \mathbf{W} pelo operador identidade $\mathbf{1} = \sum_{s, \{\sigma_i\}} |s, \{\sigma_i\}\rangle \langle s, \{\sigma_i\}|$, e usando por conveniência a seguinte notação $\{\sigma_i\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$, podemos reescrever o operador \mathbf{W} como:

$$\mathbf{W} = \sum_{n=1}^{\dim(H)} \sum_{s, \{\sigma_i\}} \sum_{s', \{\sigma'_i\}} e^{-\beta \varepsilon_n} c_{s, \{\sigma_i\}}^{n*} c_{s', \{\sigma'_i\}}^n |s, \{\sigma_i\}\rangle \langle s', \{\sigma'_i\}|, \quad (95)$$

onde o produto escalar é $c_{s, \{\sigma_i\}}^n = \langle \eta_n | s, \{\sigma_i\} \rangle$ e $c_{s', \{\sigma'_i\}}^{n*} = \langle s', \{\sigma'_i\} | \eta_n \rangle$. Realizando o traço parcial sobre s dado pela eq. (??), o operador reduzido resulta em:

$$\mathbf{W}_r = \sum_{n=1}^{\dim(H)} \sum_{s, \{\sigma_i\}} \sum_{\{\sigma'_i\}} e^{-\beta \varepsilon_n} c_{s, \{\sigma_i\}}^{n*} c_{s', \{\sigma'_i\}}^n |s, \{\sigma_i\}\rangle \langle \{\sigma'_i\}|, \quad (96)$$

onde o vetor de estado $|s, \{\sigma_i\}\rangle$ é calculado a partir do produto escalar $|s, \{\sigma_i\}\rangle = \langle s | s, \{\sigma_i\} \rangle$ e seu dual $\langle \{\sigma'_i\}| = \langle s, \{\sigma_i\} | s \rangle$. Usando esta representação, podemos reescrever os elementos do operador reduzido \mathbf{W}_r convenientemente como

$$r_{\{\sigma_i\}; \{\sigma'_i\}} = \sum_{n=1}^{\dim(H)} \sum_s e^{-\beta \varepsilon_n} c_{s, \{\sigma_i\}}^{n*} c_{s, \{\sigma'_i\}}^n. \quad (97)$$

Por outro lado, o sistema transformado é representado esquematicamente no lado direito da fig.???. Portanto, definimos analogamente um outro operador $\tilde{\mathbf{W}}$, como $\tilde{\mathbf{W}} = e^{-\beta \tilde{H}}$, onde \tilde{H} é

a Hamiltoniana do sistema transformado chamado como Hamiltoniano efetivo.

Mais uma vez, multiplicando o operador identidade $\mathbf{1} = \sum_{\sigma_1, \sigma_2} |\{\sigma_i\}\rangle\langle\{\sigma_i\}|$ ao operador \tilde{W} , temos

$$\tilde{W} = \sum_{n=1}^4 \sum_{\{\sigma_i\}} \sum_{\{\sigma'_i\}} e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_n} \tilde{c}_{\{\sigma_i\}}^{n*} \tilde{c}_{\{\sigma'_i\}}^n |\{\sigma_i\}\rangle\langle\{\sigma'_i\}|, \quad (98)$$

onde o produto escalar é $\tilde{c}_{\{\sigma_i\}}^n = \langle \zeta_n | \{\sigma_i\} \rangle$ e $\tilde{c}_{\{\sigma_i\}}^{n*} = \langle \{\sigma_i\} | \zeta_n \rangle$. Assim, os elementos de \tilde{W} são dados por:

$$\tilde{r}_{\{\sigma_i\};\{\sigma'_i\}} = \sum_{n=1}^4 e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_n} \tilde{c}_{\{\sigma_i\}}^{n*} \tilde{c}_{\{\sigma'_i\}}^n. \quad (99)$$

Os operadores \mathbf{W}_r e \tilde{W} devem ser proporcionais. Isto significa que o sistema decorado composto por σ_1 , σ_2 , σ_3 e s , depois de realizado o traço parcial, os elementos de \tilde{W} devem ser equivalentes aos do \mathbf{W}_r compostos unicamente por σ_1 , σ_2 and σ_3 . Certamente, isto é uma generalização natural da transformação decoração clássica triângulo-estrela (FISHER, 1959). Isto significa que, todos os elementos das representações matriciais dos operadores \mathbf{W}_r e \tilde{W} devem satisfazer a seguinte relação:

$$r_{\{\sigma_i\};\{\sigma'_i\}} = \tilde{r}_{\{\sigma_i\};\{\sigma'_i\}}. \quad (100)$$

Sem dúvida, este resultado pode ser rapidamente generalizado para a transformação estrela-polígono com n -pernas, sendo suficiente estender nossa notação de spin para $\{\sigma_i\} = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\}$. É importante ressaltar que nesse caso a transformação envolverá acoplamento de segundos vizinhos e terceiros vizinhos, semelhante ao discutido na referência (ROJAS; VALVERDE; SOUZA, 2009).

Na subseção seguinte, discutiremos dois exemplos para mostrar como esta transformação funciona.

4.2.1 Transformação de decoração quântica para o modelo XXZ com spins-

$$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

Nessa subseção vamos trabalhar a transformação (mapeamento) de um sistema típico com forma de estrela, composto pelo modelo de Heisenberg com spins-1/2. A Hamiltoniana do modelo XXZ na estrela pode ser considerada como sistema decorado com spins- $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, com o primeiro

onde os elementos da matriz anterior podem ser escritos das funções:

$$w_1 = e^{-\frac{\beta\Delta}{4}} \cosh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) - e^{-\frac{\beta\Delta}{4}} \sinh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) \cos(\phi) + e^{\frac{3\beta\Delta}{4}}, \quad (104)$$

$$w_2 = e^{-\frac{\beta\Delta}{4}} \cosh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) + e^{-\frac{\beta\Delta}{4}} \sinh\left(\frac{\beta\Delta}{2\cos(\phi)}\right) \cos(\phi) + e^{-\frac{\beta\Delta}{4}} \cosh(\beta J), \quad (105)$$

$$w_3 = e^{-\frac{\beta\Delta}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right) + e^{\frac{\beta\Delta}{4}}. \quad (106)$$

Por outro lado, o modelo efetivo de Heisenberg spin-1/2 no triângulo pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & -\tilde{J}_0 - \tilde{J}(\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_2^x \sigma_3^x + \sigma_2^y \sigma_3^y + \sigma_3^x \sigma_1^x + \sigma_3^y \sigma_1^y) + \\ & -\tilde{\Delta}(\sigma_1^z \sigma_2^z + \sigma_2^z \sigma_3^z + \sigma_3^z \sigma_1^z), \end{aligned} \quad (107)$$

onde \tilde{J}_0 é uma “constante” de energia, \tilde{J} é o parâmetro de acoplamento σ_1 , σ_2 e σ_3 no eixo xy , $\tilde{\Delta}$ representa o parâmetro de acoplamento no eixo z .

Assim, os elementos da matriz \tilde{W} podem ser escritos como funções de:

$$\tilde{w}_1 = e^{\beta(\tilde{J}_0 + \frac{3\tilde{\Delta}}{4})}, \quad (108)$$

$$\tilde{w}_2 = e^{\beta(\tilde{J}_0 + \tilde{J} - \frac{\tilde{\Delta}}{4})}, \quad (109)$$

$$\tilde{w}_3 = e^{\beta(\tilde{J}_0 - \frac{\tilde{J}}{2} - \frac{\tilde{\Delta}}{4})}. \quad (110)$$

Analogamente ao caso anterior, impondo a condição $\tilde{w}_1 = w_1$, $\tilde{w}_2 = w_2$, $\tilde{w}_3 = w_3$, encontramos um sistema de equações algébricas. Resolvendo o sistema de equações, temos:

$$\tilde{J}_0 = \frac{1}{4\beta} \ln [w_1 w_2 w_3^2], \quad (111)$$

$$\tilde{\Delta} = \frac{1}{3\beta} \ln \left(\frac{w_1^3}{w_2 w_3^2} \right), \quad (112)$$

$$\tilde{J} = \frac{2}{3\beta} \ln \left(\frac{w_2}{w_3} \right). \quad (113)$$

Verificamos a transformação para o caso de $w_2 = w_3$, implica $\tilde{J} = 0$, e conseqüentemente a matriz (??) torna-se uma matriz diagonal.

4.2.2 Transformação de coração quântica para o modelo XXZ com spins-

$$(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$$

Aqui, estudamos uma estrutura de estrela típica com spin-1 central e os outros spins são spin-1/2. Assim, a Hamiltoniana que descreve este sistema poderá ser de um modelo decorado XXZ com spins- $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, como a seguir:

$$\mathbf{H} = - [J s^x (\sigma_1^x + \sigma_2^x + \sigma_3^x) + J s^y (\sigma_1^y + \sigma_2^y + \sigma_3^y) + \Delta s^z (\sigma_1^z + \sigma_2^z + \sigma_3^z)], \quad (114)$$

escrevendo a representação matricial da Hamiltoniana (??) na base natural $\{|s, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\rangle\}$, temos uma matriz com dimensão 24×24 , esta matriz é muito grande para ser escrita explicitamente e tem muitos elementos nulos.

Para o caso anisotrópico ($\Delta \neq J$), os autovalores da Hamiltoniana (??) envolvem equações algébricas cúbicas, embora estas equações possam ser resolvidas analiticamente, aqui somente focamos o caso isotrópico ($\Delta = J$), e suas soluções somente envolvem equações algébricas quadráticas.

Convenientemente, a Hamiltoniana (??) pode ser expressa usando uma representação baseada no momento (magnético), resultando em matrizes bloco como segue:

$$\mathbf{H} = H_{\frac{5}{2}} \oplus H_{\frac{3}{2}} \oplus H_{\frac{1}{2}} \oplus H_{-\frac{1}{2}} \oplus H_{-\frac{3}{2}} \oplus H_{-\frac{5}{2}}, \quad (115)$$

e cada bloco da Hamiltoniana é dado também no Apêndice B. Um processo detalhado da diagonalização da matriz associada a Hamiltoniana (??) é dado no Apêndice B.

Além disso, usando a eq.(??), podemos obter o operador reduzido \mathbf{W}_r , o qual tem exatamente a mesma estrutura para a eq.(??). Então, w_1 , w_2 e w_3 são definidos pela seguinte expressão:

$$w_1 = \frac{1}{2} e^{-\frac{\beta 5\Delta}{2}} + \frac{3}{2} e^{\frac{\beta 3\Delta}{2}} + e^{-\beta\Delta}, \quad (116)$$

$$w_2 = \frac{1}{6} e^{-\frac{\beta 5\Delta}{2}} + \frac{1}{2} e^{\frac{\beta 3\Delta}{2}} + \frac{1}{2} e^{-\beta\Delta} + \frac{1}{3} e^{\frac{\beta\Delta}{2}}, \quad (117)$$

$$w_3 = \frac{1}{2} e^{-\beta\Delta} + e^{\frac{\beta\Delta}{2}}. \quad (118)$$

Por outro lado, a Hamiltoniana do modelo efetivo de Heisenberg com spin-1/2 no sistema triângulo é dada por (??), porque o modelo efetivo é exatamente o mesmo da seção anterior.

Note que, $\tilde{\mathbf{W}}$ também tem exatamente a mesma estrutura da eq.(??) e as eqs. (??) e (??) são idênticas. Portanto, as eqs.(??-??) também têm a mesma estrutura e somente as expressões

explícitas de w_1 , w_2 e w_3 são dadas pelas eqs.(??), (??) e (??), respectivamente.

É importante ressaltar a importância da transformação decoração para modelos de spins quânticos, já que a maioria dos materiais reais podem ser bem descritos por modelos tipo Heisenberg. Além disso, a transformação decoração quântica poder ser exatamente aplicada para pequenos sistemas quânticos, tais como pares de sistemas de spins (HOU et al., 2012; RIGOLIN, 2004; ZHANG; JIANG; ABLIZ, 2011), entre outros modelos.

Em resumo, a transformação decoração pode ser aplicada, para vários outros modelos. Mas devemos aplicar com cuidado este método, porque nem todas as Hamiltonianas satisfazem a simetria do correspondente modelo original.

Vale a pena mencionar também que esta transformação não pode ser aplicada ingenuamente para modelos de rede, devido ao fato de que podemos ter operadores não comutativos . Na próxima seção, iremos discutir este ponto com mais cuidado.

5 TRANSFORMAÇÃO DECORAÇÃO QUÂNTICA PARA MODELOS DE REDE

Obviamente, a transformação decoração discutida anteriormente não pode ser aplicada ingenuamente para modelos na rede com spins quânticos. Ao contrário da transformação decoração clássica, a qual pode ser aplicada exatamente para modelos de spins na rede, para a transformação decoração quântica os operadores não comutam. Podemos tentar aplicar a transformação decoração quântica para modelos na rede, entretanto, surgem imediatamente acoplamentos de segundos vizinhos, assim como termos de acoplamento de ordem superior, levando a uma Hamiltoniana muito complicada, ficando assim o espírito simplificador da transformação perdido.

5.1 Correção na transformação decoração quântica usando a fórmula de Zassenhaus

Sem perder a generalidade, vamos considerar convenientemente um modelo de cadeia quântica dada pela Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{2N} \mathbf{H}_{i,i+1} = \mathbf{H}_{1,2} + \mathbf{H}_{2,3} + \mathbf{H}_{3,4} \cdots . \quad (119)$$

Vamos considerar uma cadeia aberta com $2N + 1$ sítios, assumindo que em todos os sítios pares da cadeia temos spins decorados. Portanto, nós podemos reescrever convenientemente a Hamiltoniana como:

$$\mathcal{H} = (\mathbf{H}_{1,2} + \mathbf{H}_{2,3}) + (\mathbf{H}_{3,4} + \mathbf{H}_{4,5}) + (\mathbf{H}_{5,6} + \mathbf{H}_{6,7}) + \cdots , \quad (120)$$

$$= \mathbf{H}_{1,3} + \mathbf{H}_{3,5} + \mathbf{H}_{5,7} + \cdots , \quad (121)$$

denotando $\mathbf{H}_{2i-1,2i+1} = \mathbf{H}_{2i-1,2i} + \mathbf{H}_{2i,2i+1}$. Nessa notação todos os sítios pares são considerados como spins decorados os quais são implicitamente definidos e formalmente a Hamiltoniana do sistema pode ser reescrita como:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathbf{H}_{2i-1,2i+1}. \quad (122)$$

Agora precisamos definir o seguinte operador $\mathbb{W} = e^{-\beta \mathcal{H}}$. Usando a formula de Zasse-

nhaus até segunda ordem, como descrito no Apêndice C, obtemos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \mathbb{W}_r = & e^{-\beta(\sum_{i=1}^N \tilde{\mathbf{H}}_{2i-1,2i+1})} + \\ & + \frac{\beta^2}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \left([\tilde{\mathbf{H}}_{2j-1,2j+1}, \tilde{\mathbf{H}}_{2j+1,2j+3}] - [\mathbf{H}'_{2j-1,2j+1}, \mathbf{H}''_{2j+1,2j+3}] \right) + \mathcal{O}(\beta^3), \end{aligned} \quad (123)$$

onde o segundo termo da eq. (??) corresponde à correção de ordem β^2 . Entretanto, para muitos dos modelos tipo Heisenberg, esse termo é nulo, porque ele envolve termos de ordem bilinear na potência dos operadores. Para operadores não bilineares o coeficiente de segunda ordem (β^2) poderia ser relevante.

À primeira vista, poderíamos pensar em incluir este termo para corrigir os nossos resultados da transformação de decoração. No entanto, estamos diante de um problema grave, porque este termo inclui efeitos da interação entre os três vizinhos próximos. Consequentemente, o espírito da transformação decoração falha, e não podemos mapeá-lo em um modelo que envolve interações somente entre primeiros vizinhos (uma estrutura simples). Entretanto, podemos usar o termo de correção para quantificar a região de validade do nosso resultado.

Da mesma forma, para o modelo de Heisenberg padrão, o termo de correção de terceira ordem (β^3) será nulo, pois o traço de operadores de spin elevado à potência ímpar é nulo. Assim, este termo também não contribui, a não ser para o caso em que a Hamiltoniana tenha termos não bilineares. Pode-se encontrar uma expressão similar a eq. (??), mas o resultado seria inútil para a transformação decoração.

Outra forma interessante de obter as correções é através da expansão em cumulantes[?], ou mesmo, alternativamente, usando a expansão em séries desenvolvida na referência (ROJAS; SOUZA, 2002), particularmente para termos de ordem superior.

Note que para dimensões maiores, os modelos de spins podem ser mapeados de modo semelhante, entretanto os termos de acoplamentos poderiam ser um pouco mais complicados.

5.2 Cadeia Heisenberg como uma cadeia decorada de Heisenberg

Aqui, para mostrar como a transformação de decoração funciona, vamos fazer uma aplicação simples em uma cadeia de Heisenberg com spin- $\frac{1}{2}$, com $N' = 2N$ sítios e com condição de

T	$(N=4) \tilde{f}^{(4)}$	$(N'=8) f^{(8)}$	$f^{(8)} - \tilde{f}^{(4)}$	$(N=8) \tilde{f}^{(8)}$	$(N'=16) f^{(16)}$	$f^{(16)} - \tilde{f}^{(8)}$
0.1	-0.2586958	-0.2611776	2.4819×10^{-3}	-0.2543836	-0.2568705	2.4870×10^{-3}
0.2	-0.2718840	-0.2742885	2.4045×10^{-3}	-0.2669289	-0.2693436	2.4147×10^{-3}
0.3	-0.3040827	-0.3059479	1.8652×10^{-3}	-0.3024891	-0.3043023	1.8133×10^{-3}
0.4	-0.3518063	-0.3531251	1.3189×10^{-3}	-0.3513949	-0.3526862	1.2913×10^{-3}
0.5	-0.4073722	-0.4083200	0.9479×10^{-3}	-0.4072546	-0.4081909	0.9364×10^{-3}

TABELA 1 Energia Livre como função da temperatura para os parâmetros fixos $J = 0.1$ e $\Delta = 1.0$.

contorno periódica, dada pela seguinte Hamiltoniana:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \left\{ J (\sigma_{2i-1}^x s_{2i}^x + \sigma_{2i-1}^y s_{2i}^y + s_{2i}^x \sigma_{2i+1}^x + s_{2i}^y \sigma_{2i+1}^y) \right\} +$$

$$- \sum_{i=1}^N \left\{ \Delta \sigma_{2i-1}^z s_{2i}^z + \Delta s_{2i}^z \sigma_{2i+1}^z \right\}, \quad (124)$$

onde $s_{2i} = \{s_{2i}^x, s_{2i}^y, s_{2i}^z\}$ e $\sigma_{2i+1} = \{\sigma_{2i+1}^x, \sigma_{2i+1}^y, \sigma_{2i+1}^z\}$ são ambos operadores de spin- $\frac{1}{2}$. Entretanto, vamos definir o spin s_{2i} como spin decorado (todos os sítios pares na cadeia de spins com interação tipo - Heisenberg). Seguindo a transformação de decoração apresentada na seção anterior, a Hamiltoniana efetiva será dada por:

$$\tilde{\mathcal{H}} = -N\tilde{J}_0 - \sum_{j=1}^N \left\{ \tilde{J} (\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y) + \tilde{\Delta} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x \right\}, \quad (125)$$

$$= -N\tilde{J}_0 + \tilde{\mathcal{H}}_{ex}. \quad (126)$$

onde \tilde{J}_0 , \tilde{J} e $\tilde{\Delta}$ são dados pelas eqs. (??), (??) e (??) respectivamente.

Esse modelo pode ser resolvido numericamente para uma rede finita, através de uma diagonalização numérica exata. Nós escolhemos essa abordagem a fim de demonstrar como a transformação decoração quântica pode ser útil para estudar os modelos tipo Heisenberg.

Portanto, uma vez encontrados numericamente todas os autovalores para a energia, nós podemos encontrar a energia livre por sítio ($N' = 2N$):

$$f_{2N} = -\frac{1}{2N\beta} \ln(Z_{2N}), \quad \text{and} \quad \tilde{f}_N = -\frac{\tilde{J}_0}{2} - \frac{1}{2N\beta} \ln(\tilde{Z}_{ex,N}), \quad (127)$$

onde $Z_{2N} = \text{tr}(e^{-\beta\mathcal{H}})$, e $\tilde{Z}_{ex,N} = \text{tr}(e^{-\beta\tilde{\mathcal{H}}_{ex}})$.

Na tabela ?? temos na primeira coluna um conjunto de temperaturas. Na segunda coluna temos a energia livre para o modelo efetivo com $N = 4$ e na terceira coluna temos a energia livre do modelo original para $N' = 8$ e na quarta coluna temos a diferença entre essas duas energias

livres. Podemos observar que a diferença é da ordem de 10^{-3} . Na quinta coluna temos a energia livre do modelo efetivo com $N = 8$, na sexta coluna temos a energia livre para o modelo original com $N' = 2N = 16$, e na sétima coluna temos a diferença entre as duas últimas energias livres. Podemos observar que os resultados estão em acordo (até a terceira casa), e a energia livre do modelo efetivo está bem próxima da energia do modelo de Heisenberg original e a diferença entre os resultados é mais significativa à medida que diminuimos a temperatura. Note que a Hamiltoniana do modelo de Heisenberg efetivo só precisa de metade dos sítios do sistema original. Nós só comparamos os resultados em regiões de temperaturas relativamente baixas e na região de altas temperaturas os resultados devem ser obviamente muito mais próximos. Certamente, o formalismo de mapeamento desenvolvido aqui pode ser combinado com formalismos numéricos, gerando resultados mais interessantes.

Análises mais detalhadas usando esses métodos combinados de investigação poderiam ser interessantes, entretanto essas análises estão fora dos objetivos desse trabalho.

5.3 Cadeia de Ising-Heisenberg com acoplamento alternado

Como uma segunda aplicação, vamos considerar uma cadeia alternada Ising-Heisenberg como proposta por Lieb-Shultz-Mattis (LIED; SCHULTZ; MATTIS, 1961). Certamente, esse modelo não pode ser mapeado em um modelo efetivo exatamente solúvel através de uma transformação decoração clássica. Embora a transformação de decoração quântica não possa ser aplicada exatamente para essa rede, vamos obter uma solução aproximada para esse modelo.

A Hamiltoniana que descreve o modelo Ising-Heisenberg pode ser escrita de maneira similar à Hamiltoniana (??). Portanto teremos:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathbf{H}_{2i-1,2i+1}, \quad (128)$$

onde

$$\mathbf{H}_{2i-1,2i+1} = -\Delta \sigma_{2i-1}^z s_{2i}^z - J (s_{2i}^x \sigma_{2i+1}^x + s_{2i}^y \sigma_{2i+1}^y) - J_z s_{2i}^z \sigma_{2i+1}^z. \quad (129)$$

Os autovalores da Hamiltoniana (??) são dados por:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1(2)} &= \frac{-\Delta}{4} - \frac{J_z}{4}, & \varepsilon_{3(4)} &= \frac{\Delta}{4} - \frac{J_z}{4}, \\ \varepsilon_{5(6)} &= \frac{J_z}{4} - \frac{\Delta}{4 \cos \phi}, & \varepsilon_{7(8)} &= \frac{J_z}{4} + \frac{\Delta}{4 \cos \phi},\end{aligned}\quad (130)$$

onde $\phi = \arctan\left(\frac{2J}{\Delta}\right)$. Enquanto que os correspondentes autovetores são:

$$\begin{aligned}|u_{1(2)}\rangle &= |\pm, \pm, \pm\rangle, \\ |u_{3(4)}\rangle &= |\mp, \pm, \mp\rangle, \\ |u_{5(6)}\rangle &= \frac{\mp 1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 \pm \cos \phi} |+, -, -\rangle + |-, -, +\rangle \right), \\ |u_{7(8)}\rangle &= \frac{\mp 1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{1 \mp \cos \phi} |+, -, -\rangle + |-, -, +\rangle \right).\end{aligned}\quad (131)$$

Seguindo passos semelhantes aos das seções anteriores, nós podemos obter o operador reduzido \mathbf{W}_r . A representação matricial do operador reduzido é diagonal na base natural:

$$\mathbf{W}_r = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w_4 \end{bmatrix}, \quad (132)$$

onde $w_1 = w_4$ e $w_2 = w_3$, e os elementos de \mathbf{W}_r são dados por:

$$\begin{aligned}w_1 &= e^{\beta\left(\frac{J_z+\Delta}{4}\right)} + e^{-\beta\frac{J_z}{4}} \left[\cosh\left(\frac{\beta\Delta}{4\cos(\phi)}\right) + \cosh\left(\frac{\beta\Delta}{4\cos(\phi)}\right) \cos(\phi) \right], \\ w_2 &= e^{\beta\left(\frac{J_z-\Delta}{4}\right)} + e^{-\beta\frac{J_z}{4}} \left[\cosh\left(\frac{\beta\Delta}{4\cos(\phi)}\right) - \cosh\left(\frac{\beta\Delta}{4\cos(\phi)}\right) \cos(\phi) \right].\end{aligned}$$

Portanto, o modelo pode ser mapeado em um modelo efetivo de Ising com spin-1/2 dado por:

$$\tilde{\mathcal{H}} = -N\tilde{J}_0 - \tilde{\Delta} \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}. \quad (133)$$

Os autovalores e autovetores da Hamiltoniana acima são dados por:

$$\tilde{\epsilon}_{1(2)} = -\tilde{J}_0 - \frac{\tilde{\Delta}}{4} \longrightarrow |v_{1(2)}\rangle = |\pm\pm\rangle, \quad (134)$$

$$\tilde{\epsilon}_{3(4)} = -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} \longrightarrow |v_{3(4)}\rangle = |\pm\mp\rangle. \quad (135)$$

Obviamente, o correspondente operador $\tilde{\mathbf{W}}$ é também diagonal, e cada elemento pode ser comparado ao de \mathbf{W}_r , de forma que $w_i = \tilde{w}_i$. Portanto, os parâmetros de $\tilde{\mathcal{H}}$ são dados:

$$\tilde{J}_0 = \frac{1}{2\beta} \ln(w_1 w_2), \quad (136)$$

$$\tilde{\Delta} = \frac{2}{\beta} \ln\left(\frac{w_1}{w_2}\right). \quad (137)$$

O modelo de Ising spin-1/2 é bem conhecido, e pode ser resolvido exatamente via matriz transferência. Aqui não entraremos nos detalhes e somente apresentaremos a solução. A matriz transferência 2×2 e dada por $\mathbf{V} = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 \\ w_2 & w_1 \end{bmatrix}$, cujos autovalores são dados por $\Lambda_{\pm} = e^{\beta\tilde{J}_0} (e^{\beta\tilde{\Delta}/4} \pm e^{-\beta\tilde{\Delta}/4})$. A função de partição para o modelo de Ising efetivo com spin- $\frac{1}{2}$ na rede, é:

$$Z_N = \Lambda_+^N + \Lambda_-^N. \quad (138)$$

No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, a energia livre é dada por:

$$f = -\frac{\tilde{J}_0}{2} - \frac{1}{2\beta} \ln(e^{\beta\tilde{\Delta}/4} + e^{-\beta\tilde{\Delta}/4}) = -\frac{1}{2\beta} \ln(w_1 + w_2). \quad (139)$$

A energia livre dada por (??) é um resultado aproximado para a Hamiltoniana do modelo decorado (??). Para J pequeno os dois resultados estão muito próximos. Uma análise mais detalhada poderá ser feita em outro trabalho.

A energia do estado fundamental e a análise espectral do modelo dado pela Hamiltoniana (??) foram discutidas na referência Yao, Li e Gong (2002). Entretanto, não existe solução analítica descrita na literatura.

6 CONCLUSÃO

Nessa tese apresentamos um formalismo para a versão quântica das transformações de decorações e mostramos como essas transformações podem ser aplicadas para modelos tipo Heisenberg. Essa transformação representa um mapeamento exato quando o sistema (finito) é composto por somente uma única decoração, por isso ela poderia ser usada para demonstrar a equivalência entre dois sistemas formados por dois spins quânticos, por exemplo. Nesse trabalho, nós apresentamos alguns exemplos, tal como o Modelo de Heisenberg de $\text{spin}-\frac{1}{2}$ e o modelo de Heisenberg misto com $\text{spin}-(1, \frac{1}{2})$. Entretanto, a transformação de decoração quântica não pode ser usada, ingenuamente, para mapear exatamente um modelo de spins quânticos na rede em outro, por causa da não comutatividade dos operadores.

Entretanto, no limite "clássico" pode ser possível realizar o mapeamento e estabelecer uma equivalência entre dois modelos quânticos de spins na rede. Para estudar a validade desse formalismo para modelos quânticos de spins na rede, nós usamos a fórmula de Zassenhaus, e obtemos a correção para a transformação decoração quântica, quando aplicada a um modelo de spins na rede. Essa correção envolve acoplamento de primeiros vizinhos e termos de longo alcance, levando-nos a uma situação trabalhosa para estabelecermos a equivalência das redes. Entretanto, ela nos fornece informações importantes sobre sua contribuição, e pelo menos para muitos dos modelos tipo Heisenberg ela é irrelevante até terceira ordem em β .

Em um outro caminho para testar os resultados gerados pela transformação, nós a aplicamos a uma rede finita de Heisenberg e comparamos nosso resultado como o resultado numérico, mostrando que os resultados obtidos a partir da transformação são promissores. Vale a pena ressaltar que o número de sítios interferiu pouco na diferença entre os resultados.

Também aplicamos a transformação a uma rede Ising-Heisenberg alternada, e obtivemos um resultado aproximado. Essa aproximação é muito boa para uma anisotropia xy fraca para as redes de Heisenberg.

Como futuros trabalhos, pretendemos aplicar o formalismo ao modelo de Heisenberg puro em $1D$, $2D$ e $3D$, concomitantemente como análise numérica do modelo. Acreditamos que os resultados serão melhores para altas temperaturas e/ou acoplamento anisotrópico xy fraco.

REFERÊNCIAS

- ANTONOSYAN, D.; BELLUCCI, S.; OHANYAN, V. Exactly solvable Ising-Heisenberg chain with triangular XXZ-Heisenberg plaquettes. **Physical Review B**, Amsterdam, v. 79, n. 1, p. 14432, Jan. 2009.
- BAXTER, R. J. q colourings of the triangular lattice. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, Bristol, v. 19, n. 14, p. 2821, Oct. 1986.
- BELLUCCI, S.; OHANYAN, V. Lattice distortions in a sawtooth chain with Heisenberg and Ising bonds. **The European Physical Journal B**, Orebro, v. 75, n. 4, p. 531-541, June 2010.
- CANOVA, A. L.; STRECKA, J.; LUCIVJANSKY, T. Exact solution of the mixed spin-1/2 and spin-S Ising-Heisenberg diamond chain. **Condensed Matter physical**, Kosice, v. 12, n. 3, p. 353-368, Mar. 2009.
- DUNN, A. G.; ESSAM, J. W. Decoration transformations and the dilute anisotropic Heisenberg model. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, London, v. 5, n. 24, p. 3521-3530, Dec. 1972.
- FISHER, M. E. Transformations of Ising models. **Physical Review**, New York, v. 113, n. 4, p. 969-981, Feb. 1959.
- GALISOVA, L. et al. Effect of on-site coulomb repulsion on phase transitions in exactly solved spin-electron model. **Acta Physica Polonica A**, Kosice, v. 118, n. 5, p. 942-944, July 2010.
- HOU, Y. et al. Preservation of entanglement in a two-qubit-spin coupled system. **Annals of Physics**, New York, v. 327, p. 292-296, Feb. 2012.
- LI, S. et al. Triangular arbitrage as an interaction among foreign exchange rates. **Physica A**, Amsterdam, v. 310, n. 3/4, p. 467-479, 2007.
- LIEB, E.; SCHULTZ, T.; MATTIS, D. C. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. **Annals of Physics**, Yorktown, v. 16, n. 3, p. 407-466, Dec. 1961.
- PEREIRA, M. S. S.; MOURA, F. A. B. F. de; LYRA, M. L. Magnetocaloric effect in kinetically frustrated diamond chains. **Physical Review B**, New York, v. 79, n. 5, p. 54427-54434, Feb. 2009.
- RIGOLIN, G. Thermal entanglement in the two-qubit Heisenberg XYZ model. **International Journal of Quantum Information**, Singapore, v. 2, n. 1, p. 393-405, Mar. 2004.
- ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de. Direct algebraic mapping transformation for decorated spin models. **Journal of Physical A: Mathematical and Theoretical**, Bristol, v. 44, n. 24, p. 245001, May 2011.

ROJAS, O. et al. Exactly solvable mixed-spin Ising-Heisenberg diamond chain with biquadratic interactions and single-ion anisotropy. **Physical Review B**, New York, v. 83, n. 9, p. 94430-94439, Mar. 2011.

ROJAS, O.; VALVERDE, J. S.; SOUZA, S. M. Generalized transformation for decorated spin models. **Physical A**, Amsterdam, v. 388, n. 8, p. 1419-1430, Apr. 2009.

ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de. Geometric frustration in Ising diamond chains. **Physical Review A**, Amsterdam, v. 387, n. 8/9, p. 1947-1956, Mar. 2011.

STRECKA, J. et al. Multiple frustration-induced plateaus in a magnetization process of the mixed spin-1/2 and spin-3/2 Ising-Heisenberg diamond chain. **Journal of Physics: Conference Series**, Bristol, v. 145, n. 1, p. 12058, Jan. 2009a.

STRECKA, J. et al. Spontaneous antiferromagnetic long-range order in the two-dimensional hybrid model of localized Ising spins and itinerant electrons. **Physical Review B**, New York, v. 80, p. 174410, Nov. 2009b.

STRECKA, J.; CANOVA, A. L.; MINAMI, K. Spin-1/2 Ising-Heisenberg model with the pair XYZ Heisenberg interaction and quartic Ising interactions as the exactly soluble zero-field eight-vertex model. **Physical Review E**, New York, v. 79, n. 5, p. 51103, May 2009.

STRECKA, J.; CANOVA, A. L., Non-universal critical behaviour of a mixed-spin Ising model on the extended Kagom' lattice **Condensed Matter Physical**, Kosice, v. 9, n.1, p. 179-186, Jan 2006.

STRECKA, J.; CANOVA, A. L. Geometric frustration in the class of exactly solvable Ising-Heisenberg diamond chains. **Condensed Matter Physical**, Bristol, v. 9, n. 20, p. 4967-4984, May 2006.

STRECKA, J.; DELY, J.; CANOVA, A. L. Phase transitions of the mixed spin-1/2 and spin-S Ising model on a three-dimensional decorated lattice with a layered structure. **Physica A**, Amsterdam, v. 388, n. 12, p. 2394-2402, June 2009.

STRECKA, J. Exact results of a mixed spin-1/2 and spin-S Ising model on a bathroom tile (4 x 8) lattice: Effect of uniaxial single-ion anisotropy. **Physica A**, Amsterdam, v. 360, n. 2, p. 379-390, Feb. 2006. 2006.

STRECKA, J. Generalized algebraic transformations and exactly solvable classical-quantum models. **Physical Review A**, Amsterdam, v. 374, n. 36, p. 3718-3722, Aug. 2010.

SYOZI, I. Phase transitions and critical phenomena. Cambridge: Academic, 1972. v. 1, 201 p.

VALVERDE, J. S.; ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de J. Phase diagram of the asymmetric tetrahedral Ising-Heisenberg chain. **Journal Physical: Condensed Matter**, Bristol, v. 20, n. 34, p. 345208, Aug. 2008.

VALVERDE, J. S.; ROJAS, O.; SOUZA, S. M. de J. Two dimensional XXZ-Ising model on

square-hexagon lattice. **Physical Review E**, New York, v. 79, p. 41101, Apr. 2009.

YAO, H.; LI, J.; GONG, C. Exact solution of anisotropic antiferromagnetic alternating Heisenberg-Ising spin chain. **Solid State Communications**, Amsterdam, v. 121, n. 12, p. 687-700, Mar. 2002.

ZHANG, G.; JIANG, Z.; ALBLIZ, A. Measurement-induced disturbance and thermal entanglement in spin models. **Annals of Physics**, Amsterdam, v. 326, n. 4, p. 867-875, Apr. 2011.

ou equivalentemente, podemos expressar como uma composição de matrizes bloco:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{-2} &= -\Delta, \\ \mathcal{H}_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & \Delta \end{bmatrix}, \quad \mathcal{H}_{-1} = \begin{bmatrix} \Delta & -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ \mathcal{H}_0 &= \begin{bmatrix} 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Portanto, escrevemos como segue

$$\mathbf{H} = \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_0 \oplus \mathcal{H}_{-1} \oplus \mathcal{H}_{-2}. \quad (142)$$

Os autovetores da Hamiltoniana (??) são dados por

$$\begin{aligned} |\eta_1\rangle &= |1,+,+\rangle, \\ |\eta_2\rangle &= \frac{1}{2} \left(|1,+,-\rangle + |1,-,+\rangle - \sqrt{2}|0,+,+\rangle \right), \\ |\eta_3\rangle &= \frac{1}{2} \left(|1,+,-\rangle + |1,-,+\rangle + \sqrt{2}|0,+,+\rangle \right), \\ |\eta_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,-,+\rangle - |1,+,-\rangle \right), \\ |\eta_5\rangle &= \frac{1}{2} \left[\sqrt{1 - \cos(\phi)} \left(|0,+,-\rangle + |0,-,+\rangle \right) - \sqrt{1 + \cos(\phi)} \left(|1,-,-\rangle + |-1,+,+\rangle \right) \right], \\ |\eta_6\rangle &= \frac{1}{2} \left[\sqrt{1 + \cos(\phi)} \left(|0,+,-\rangle + |0,-,+\rangle \right) + \sqrt{1 - \cos(\phi)} \left(|1,-,-\rangle + |-1,+,+\rangle \right) \right], \end{aligned} \quad (143)$$

(144)

$$\begin{aligned}
|\eta_7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1,-,-\rangle - |-1,+,\rangle), \\
|\eta_8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,-,+\rangle - |0,+,-\rangle), \\
|\eta_9\rangle &= \frac{1}{2} (|-1,+,-\rangle + |-1,-,+\rangle - \sqrt{2}|0,-,-\rangle), \\
|\eta_{10}\rangle &= \frac{1}{2} (|-1,+,-\rangle + |-1,-,+\rangle + \sqrt{2}|0,-,-\rangle), \\
|\eta_{11}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1,-,+\rangle - |-1,+,-\rangle), \\
|\eta_{12}\rangle &= |-1,-,-\rangle.
\end{aligned} \tag{145}$$

3. Hamiltoniana do modelo XXZ com spins- $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ na base natural $\{|s, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\rangle\}$:

$$H = \begin{bmatrix}
\frac{3\Delta}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{\Delta}{4} & 0 & \frac{J}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \frac{\Delta}{4} & \frac{J}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & \frac{J}{2} & \frac{J}{2} & -\frac{3\Delta}{4} & \frac{J}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & \frac{J}{2} & \frac{\Delta}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\Delta}{4} & 0 & \frac{J}{2} & 0 & \frac{J}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\Delta}{4} & \frac{J}{2} & 0 & 0 & \frac{J}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2} & \frac{J}{2} & -\frac{\Delta}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\Delta}{4} & \frac{J}{2} & \frac{J}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2} & 0 & 0 & \frac{J}{2} & -\frac{\Delta}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2} & 0 & \frac{J}{2} & 0 & -\frac{\Delta}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\Delta}{4} & \frac{J}{2} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2} & -\frac{3\Delta}{4} & \frac{J}{2} & \frac{J}{2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2} & \frac{\Delta}{4} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{J}{2} & 0 & \frac{\Delta}{4} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{3\Delta}{4}
\end{bmatrix}, \tag{146}$$

Os autovalores da Hamiltoniana são dados em (??), e os correspondentes autovetores são dados por

$$\begin{aligned}
|\eta_1\rangle &= |\downarrow, -, -, -\rangle, \\
|\eta_2\rangle &= |\uparrow, +, +, +\rangle, \\
|\eta_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, +, -, +\rangle - |\uparrow, +, +, -\rangle), \\
|\eta_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow, -, -, +\rangle - |\downarrow, +, -, -\rangle), \\
|\eta_5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|\uparrow, +, +, -\rangle + |\uparrow, +, -, +\rangle - 2|\uparrow, -, +, +\rangle), \\
|\eta_6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|\downarrow, +, -, -\rangle + |\downarrow, -, +, -\rangle - 2|\downarrow, -, -, +\rangle), \\
|\eta_7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (-|\uparrow, +, -, -\rangle - |\uparrow, -, +, -\rangle - |\uparrow, -, -, +\rangle + |\downarrow, +, +, -\rangle + |\downarrow, +, -, +\rangle + |\downarrow, -, +, +\rangle), \\
|\eta_8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} (|\uparrow, +, -, -\rangle + |\uparrow, -, +, -\rangle + |\uparrow, -, -, +\rangle + |\downarrow, +, +, -\rangle + |\downarrow, +, -, +\rangle + |\downarrow, -, +, +\rangle), \\
|\eta_9\rangle &= \frac{1}{2} (|\uparrow, +, -, -\rangle - |\uparrow, -, -, +\rangle - |\downarrow, +, +, -\rangle + |\downarrow, -, +, +\rangle), \\
|\eta_{10}\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (|\uparrow, +, -, -\rangle - 2|\uparrow, -, +, -\rangle + |\uparrow, -, -, +\rangle + |\downarrow, +, +, -\rangle - 2|\downarrow, +, -, +\rangle + |\downarrow, -, +, +\rangle), \\
|\eta_{11}\rangle &= \frac{1}{2} (|\uparrow, +, -, -\rangle - |\uparrow, -, -, +\rangle + |\downarrow, +, +, -\rangle - |\downarrow, -, +, +\rangle), \\
|\eta_{12}\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (|\uparrow, +, -, -\rangle - 2|\uparrow, -, +, -\rangle + |\uparrow, -, -, +\rangle - |\downarrow, +, +, -\rangle + 2|\downarrow, +, -, +\rangle - |\downarrow, -, +, +\rangle), \\
|\eta_{13}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\sqrt{3(1 + \cos(\phi))} |\uparrow, -, -, -\rangle - \sqrt{1 - \cos(\phi)} (|\downarrow, -, +, -\rangle + |\downarrow, +, -, -\rangle + |\downarrow, -, -, +\rangle) \right], \\
|\eta_{14}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\sqrt{3(1 + \cos(\phi))} |\downarrow, +, +, +\rangle - \sqrt{1 - \cos(\phi)} (|\uparrow, +, -, +\rangle + |\uparrow, +, +, -\rangle + |\uparrow, -, +, +\rangle) \right], \\
|\eta_{15}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\sqrt{3(1 - \cos(\phi))} |\uparrow, -, -, -\rangle + \sqrt{1 + \cos(\phi)} (|\downarrow, -, +, -\rangle + |\downarrow, +, -, -\rangle + |\downarrow, -, -, +\rangle) \right], \\
|\eta_{16}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\sqrt{3(1 - \cos(\phi))} |\downarrow, +, +, +\rangle + \sqrt{1 + \cos(\phi)} (|\uparrow, +, -, +\rangle + |\uparrow, +, +, -\rangle + |\uparrow, -, +, +\rangle) \right].
\end{aligned}
\tag{147}$$

Expressando na base natural $\{|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\rangle\}$, a Hamiltoniana \tilde{H} será

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} -\tilde{J}_0 - \frac{3\tilde{\Delta}}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\frac{\tilde{J}}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} & -\frac{\tilde{J}}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\frac{\tilde{J}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} & -\frac{\tilde{J}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\frac{\tilde{J}}{2} & -\tilde{J}_0 + \frac{\tilde{\Delta}}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\tilde{J}_0 - \frac{3\tilde{\Delta}}{4} \end{bmatrix}, \quad (148)$$

Usando o resultado anterior, podemos escrever o operador $\tilde{W} = e^{-\beta\tilde{H}}$ na base natural $\{|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\rangle\}$. Portanto, os elementos são dados por

$$\tilde{W} = \begin{bmatrix} \tilde{w}_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\tilde{w}_2 + 2\tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 + 2\tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 + 2\tilde{w}_3}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{w}_2 + 2\tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 + 2\tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 - \tilde{w}_3}{3} & \frac{\tilde{w}_2 + 2\tilde{w}_3}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{w}_1 \end{bmatrix}, \quad (149)$$

APÊNDICE B- Diagonalização da Hamiltoniana do modelo XXZ com spins- $(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

Podemos escrever convenientemente em forma de matrizes bloco , os quais podem ser divididos pelo seu momento magnético em blocos de matrizes, como segue.

1. Para momento magnético $m = \frac{5}{2}$, temos apenas uma configuração $|_{+1,+ ,+ ,+}\rangle$ para este momento magnético,

$$H_{\frac{5}{2}} = -\frac{3\Delta}{2}. \quad (150)$$

Obviamente, os correspondentes autovalores e autovetores são,

$$\varepsilon_1 = -\frac{3\Delta}{2}, \quad |v_1\rangle = |_{+1,+ ,+ ,+}\rangle. \quad (151)$$

2. Para momento magnético $m = \frac{3}{2}$, temos quatro estados dado por $\{|_{+1,+ ,+ ,-}\rangle, |_{+1,+ ,- ,+}\rangle, |_{+1,- ,+ ,+}\rangle, |_{0,+ ,+ ,+}\rangle\}$, nesta base o bloco da Hamiltoniana pode ser expresso como

$$H_{\frac{3}{2}} = \begin{bmatrix} -\frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{\Delta}{2} & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & -\frac{\Delta}{2} & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}. \quad (152)$$

Para o caso isotrópico $J = \Delta$, obtemos os seguinte autovalores e autovetores são dados por

$$\begin{aligned} \varepsilon_2 &= -\frac{3\Delta}{2}, \quad \rightarrow |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(|_{+1,+ ,+ ,-}\rangle + |_{+1,+ ,- ,+}\rangle + |_{+1,- ,+ ,+}\rangle + \sqrt{2}|_{0,+ ,+ ,+}\rangle \right), \\ \varepsilon_3 &= \Delta, \quad \rightarrow |v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{15}} \\ &\quad \left(\sqrt{2}|_{+1,+ ,+ ,-}\rangle + \sqrt{2}|_{+1,+ ,- ,+}\rangle + \sqrt{2}|_{+1,- ,+ ,+}\rangle - 3|_{0,+ ,+ ,+}\rangle \right), \\ \varepsilon_4 &= -\frac{\Delta}{2} \quad \rightarrow |v_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|_{+1,+ ,+ ,-}\rangle - |_{+1,+ ,- ,+}\rangle \right), \\ \varepsilon_5 &= -\frac{\Delta}{2} \quad \rightarrow |v_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|_{+1,+ ,+ ,-}\rangle - |_{+1,- ,+ ,+}\rangle \right). \end{aligned}$$

3. Para o momento magnético sendo $m = \frac{1}{2}$, teremos sete estados representados pela base $\{|_{+1,+ ,- ,-}\rangle, |_{+1,- ,+ ,-}\rangle, |_{+1,- ,- ,+}\rangle, |_{0,+ ,+ ,-}\rangle, |_{0,+ ,- ,+}\rangle, |_{0,- ,+ ,+}\rangle, |_{-1,+ ,+ ,+}\rangle\}$, então o bloco

de Hamiltoniano será:

$$H_{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\Delta}{2} & 0 & \frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta}{2} & 0 & \frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & -\frac{J}{\sqrt{2}} & \frac{3\Delta}{2} \end{bmatrix}, \quad (153)$$

Assumindo $J = \Delta$, os correspondentes autovalores e autovetores são dados por

$$\varepsilon_6 = -\frac{3\Delta}{2}, \rightarrow |v_6\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \{ |_{+1,+,-,-}\rangle + |_{+1,-,+,-}\rangle + |_{+1,-,-,+}\rangle + \sqrt{2}(|_{0,+,+,-}\rangle + |_{0,+,-,+}\rangle + |_{0,-,+,+}\rangle) + |_{-1,+,+,+}\rangle \}, \quad (154)$$

$$\varepsilon_7 = -\frac{\Delta}{2}, \rightarrow |v_7\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(|_{+1,+,-,-}\rangle - |_{+1,-,-,+}\rangle + \sqrt{2}(|_{0,+,+,-}\rangle - |_{0,-,+,+}\rangle) \right), \quad (155)$$

$$\varepsilon_8 = -\frac{\Delta}{2}, \rightarrow |v_8\rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}} \{ |_{+1,+,-,-}\rangle - 2|_{+1,-,+,-}\rangle + |_{+1,-,-,+}\rangle + \sqrt{2}(-|_{0,+,+,-}\rangle + 2|_{0,+,-,+}\rangle - |_{0,-,+,+}\rangle) \}, \quad (156)$$

$$\varepsilon_9 = \Delta, \rightarrow |v_9\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\sqrt{2}(|_{+1,+,-,-}\rangle - |_{+1,-,-,+}\rangle) - (|_{0,+,+,-}\rangle - |_{0,-,+,+}\rangle) \right), \quad (157)$$

$$\varepsilon_{10} = \Delta, \rightarrow |v_{10}\rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}} \left\{ \sqrt{2}(|_{+1,+,-,-}\rangle - 2|_{+1,-,+,-}\rangle + |_{+1,-,-,+}\rangle) + |_{0,+,+,-}\rangle - 2|_{0,+,-,+}\rangle + |_{0,-,+,+}\rangle \right\}, \quad (158)$$

$$\varepsilon_{11} = \Delta, \rightarrow |v_{11}\rangle = \frac{1}{3\sqrt{10}} \{ -4(|_{+1,+,-,-}\rangle + |_{+1,-,+,-}\rangle + |_{+1,-,-,+}\rangle) + \sqrt{2}(|_{0,+,+,-}\rangle + |_{0,+,-,+}\rangle + |_{0,-,+,+}\rangle) + 6|_{-1,+,+,+}\rangle \}, \quad (159)$$

$$\varepsilon_{12} = \frac{5\Delta}{2}, \rightarrow |v_{12}\rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}} \{ |_{+1,+,-,-}\rangle + |_{+1,-,+,-}\rangle + |_{+1,-,-,+}\rangle - \sqrt{2}(|_{0,+,+,-}\rangle + |_{0,+,-,+}\rangle + |_{0,-,+,+}\rangle) + 3|_{-1,+,+,+}\rangle \}. \quad (160)$$

4. Para o momento magnético $m = -\frac{1}{2}$, observemos que também temos sete estados, e

a Hamiltoniana $H_{-\frac{1}{2}}$ é idêntica a $H_{\frac{1}{2}}$, mas a base que representa esses estado é diferente e são representadas pela base $\{|-1,+,+,-\rangle, |-1,+,-,+\rangle, |-1,-,+,+\rangle, |0,-,-,+\rangle, |0,-,+, -\rangle, |0,+,+,-\rangle, |+1,-,-,-\rangle\}$. Portanto, os autovalores são idênticos aqueles dados por $\varepsilon_6 \cdots \varepsilon_{12}$, e os correspondentes autovetores também tem as mesmas estruturas e usando a simetria $+ \rightarrow -$ e $- \rightarrow +$, podemos gerar todos correspondentes autovetores.

5. Para $m = -\frac{3}{2}$, temos uma matriz equivalente a matriz com momento magnético a $m = \frac{3}{2}$. Assim, os autovalores são idênticos para o caso 2. Usando a simetria $+ \rightarrow -$ e $- \rightarrow +$, podemos construir o seus autovetores correspondentes.
6. Enquanto que para $m = -\frac{5}{2}$, temos uma matriz equivalente para o caso $m = \frac{5}{2}$,

$$H_{-\frac{5}{2}} = -\frac{3\Delta}{2}, \quad (161)$$

asim o correspondente autovalor e autovetor são

$$\varepsilon_1 = -\frac{3\Delta}{2}, \quad |v_{24}\rangle = |-1,-,-,-\rangle. \quad (162)$$

APÊNDICE C- Correção da transformação decoração quântica

A formula de Zassenhaus é dada por

$$e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}} \cdot e^{\mathbf{B}} \cdot e^{\frac{1}{2}[\mathbf{A},\mathbf{B}]} + \dots, \quad (163)$$

onde \mathbf{A} e \mathbf{B} são operadores. Usando a formula de Zassenhaus até segunda ordem, temos

$$\begin{aligned} \mathbb{W} &= e^{-\beta \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{H}_{2i-1,2i+1} \right)} = e^{-\beta \mathbf{H}_{1,3}} e^{-\beta (\mathbf{H}_{3,5} + \mathbf{H}_{5,7} + \dots)} e^{-\beta^2 [\mathbf{H}_{1,3}, \mathbf{H}_{3,5}]}, \dots, \\ &= e^{-\beta \mathbf{H}_{1,3}} e^{-\beta \mathbf{H}_{3,5}} e^{-\beta (\mathbf{H}_{5,7} + \mathbf{H}_{7,9} + \dots)} \\ &\quad e^{-\beta^2 [\mathbf{H}_{3,5}, \mathbf{H}_{5,7}]} e^{-\beta^2 [\mathbf{H}_{1,3}, \mathbf{H}_{3,5}]}, \dots, \\ &\quad \vdots \end{aligned} \quad (164)$$

Depois de aplicar N vezes temos a seguinte expressão

$$\mathbb{W} = \prod_{i=1}^N e^{-\beta \mathbf{H}_{2i-1,2i+1}} \prod_{j=N-1}^1 e^{-\beta^2 [\mathbf{H}_{2j-1,2j+1}, \mathbf{H}_{2j+1,2j+3}]}, \dots, \quad (165)$$

Portanto, o operador \mathbb{W} é válido pelo menos até $\mathcal{O}(\beta^2)$, então, simplificando eq.(?) temos

$$\mathbb{W} = \left(\prod_{i=1}^N e^{-\beta \mathbf{H}_{2i-1,2i+1}} \right) \left(1 - \frac{\beta^2}{2} \sum_{j=1}^{N-1} [\mathbf{H}_{2j-1,2j+1}, \mathbf{H}_{2j+1,2j+3}] \right) + \mathcal{O}(\beta^3), \quad (166)$$

alternativamente, ainda podemos escrever

$$\mathbb{W} = \prod_{i=1}^N e^{-\beta \mathbf{H}_{2i-1,2i+1}} - \frac{\beta^2}{2} \sum_{j=1}^{N-1} [\mathbf{H}_{2j-1,2j+1}, \mathbf{H}_{2j+1,2j+3}] + \mathcal{O}(\beta^3). \quad (167)$$

Realizando o traço parcial sobre o spin decorado (sítios pares), temos

$$\begin{aligned} \mathbb{W}_r &= \text{tr}_e \left(e^{-\beta \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{H}_{2i-1,2i+1} \right)} \right) \\ &= \text{tr}_e \left(\prod_{i=1}^N e^{-\beta \mathbf{H}_{2i-1,2i+1}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \text{tr}_e \left(\sum_{j=1}^{N-1} [\mathbf{H}_{2j-1,2j+1}, \mathbf{H}_{2j+1,2j+3}] \right) + \mathcal{O}(\beta^3), \end{aligned} \quad (168)$$

com tr_e denotamos como sendo o traço parcial sobre sítios pares. Depois de realizar o traço parcial sobre os spins decorados, cada elemento do produto contem apenas um sítio par. Então, o traço

parcial sobre sítios pares podem ser distribuídos através da produtória,

$$\mathbb{W}_r = \prod_{i=1}^N \text{tr}_{2i} \left(e^{-\beta \mathbf{H}_{2i-1,2i+1}} \right) - \frac{\beta^2}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \text{tr}_e \left([\mathbf{H}_{2j-1,2j+1}, \mathbf{H}_{2j+1,2j+3}] \right) + \mathcal{O}(\beta^3). \quad (169)$$

Portanto, usando a transformação de decoração quântica dado por eq. (??) e substituindo o traço parcial trace em eq. (??), temos

$$\mathbb{W}_r = \prod_{i=1}^N e^{-\beta \tilde{\mathbf{H}}_{2i-1,2i+1}} - \frac{\beta^2}{2} \sum_{j=1}^{N-1} ([\mathbf{H}'_{2j-1,2j+1}, \mathbf{H}''_{2j+1,2j+3}]) + \mathcal{O}(\beta^3), \quad (170)$$

onde denotamos $\mathbf{H}'_{2j-1,2j+1} = \text{tr}_{2j}(\mathbf{H}_{2j-1,2j+1})$ and $\mathbf{H}''_{2j+1,2j+3} = \text{tr}_{2j+2}(\mathbf{H}_{2j+1,2j+3})$.

A relação abaixo pode ser obtido de um modo similar ao obtido em (??). Então, temos

$$\begin{aligned} \prod_{i=1}^N e^{-\beta \tilde{\mathbf{H}}_{2i-1,2i+1}} &= e^{-\beta \left(\sum_{i=1}^N \tilde{\mathbf{H}}_{2i-1,2i+1} \right)} \prod_{j=1}^{N-1} e^{-\beta^2 [\tilde{\mathbf{H}}_{2j-1,2j+1}, \tilde{\mathbf{H}}_{2j+1,2j+3}]}, \\ &= e^{-\beta \left(\sum_{i=1}^N \tilde{\mathbf{H}}_{2i-1,2i+1} \right)} + \frac{\beta^2}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \left([\tilde{\mathbf{H}}_{2j-1,2j+1}, \tilde{\mathbf{H}}_{2j+1,2j+3}] \right) + \mathcal{O}(\beta^3). \end{aligned} \quad (171)$$

Finalmente, substituindo a relação (??) em (??), o operador reduzido \mathbb{W}_r é expressado pela eq.(??).