

Ingryd Rodrigues dos Passos

Separação espacial de fases no modelo de seis vértices

São Carlos

2020

Universidade Federal de São Carlos – UFSCar
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia – CCET
Programa de Pós-Graduação em Física – PPGF

Separação espacial de fases no modelo de seis vértices

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestra em Física.

Ingyrd Rodrigues dos Passos

Orientador: Prof. Dr. Giuliano Augustus Pavan Ribeiro

São Carlos

2020

Errata

PASSOS, I. R. **Separação espacial de fases no modelo de seis vértices**. 2020. 29 f. Dissertação (Mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2020.

Folha	Linha	Onde se lê	Leia-se
i	12	agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro através do processo 2017/22363-9.	agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro através do processo 2017/22363-9 e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) via código de financiamento 001.



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia
Programa de Pós-Graduação em Física

Folha de Aprovação

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado da candidata Ingrid Rodrigues dos Passos, realizada em 14/01/2020:

Prof. Dr. Giuliano Augustus Pavan Ribeiro
UFSCar

Prof. Dr. Marcio Jose Martins
UFSCar

Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto
IFUSP

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Prof. Giuliano Ribeiro, com quem trabalho desde a iniciação científica. Obrigada pela orientação, que nunca deixou a desejar, pelo constante incentivo ao aprimoramento, e pelas portas que você abriu para mim. Sou grata pela solicitude, compreensão e estímulo desde o início.

Agradeço aos meus pais, Agnaldo e Rosangela, pelo carinho e amparo. Sou principalmente grata à minha mãe, que mesmo sem simpatizar muito com minha escolha de carreira no começo, sempre confiou no meu potencial. Obrigada pelo apoio irrestrito.

Agradeço ao meu marido, Michel, que faz parte desta trajetória desde a graduação. Sou grata por todo o amor, companheirismo e suporte imensuráveis. Obrigada por não sair do meu lado e por tornar tudo mais fácil.

Agradeço aos amigos, que proporcionaram os necessários momentos de descontração.

Finalmente, agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro através do processo 2017/22363-9.

Resumo

Neste trabalho, estudamos o modelo de seis vértices com fronteiras do tipo parede de domínio e com uma extremidade reflexiva, com enfoque na influência da condição de contorno no limite termodinâmico. Com a finalidade de encontrar uma descrição analítica completa para as chamadas curvas árticas, estudamos três tipos de correlação na fronteira. Estas correlações foram empregadas em dois métodos para a obtenção das curvas.

Palavras-chave: modelo de seis vértices. separação espacial de fases. correlações na fronteira. curvas árticas.

Abstract

In this work, we have studied the six-vertex model with domain wall and reflecting end boundary conditions, focusing mainly on the influence of boundary conditions on the thermodynamic limit. In order to find a complete analytical description for the so-called arctic curves, we have investigated three types of boundary correlations. These correlations were later used in two different methods designed to find the curves.

Keywords: six-vertex model. phase separation. boundary correlations. arctic curves.

Lista de ilustrações

Figura 1 – (a) Diamante asteca de ordem 3. (b) Possíveis orientações para os dominós. Fonte: elaborada pela autora.	3
Figura 2 – Cobertura de um diamante asteca de ordem L com dominós, com $L = 16, 128, 1024$	4
Figura 3 – As seis configurações de vértices permitidas, segundo a regra do gelo.	5
Figura 4 – Representação da regra do gelo em termos de linhas.	5
Figura 5 – Convenção adotada para os estados das arestas.	6
Figura 6 – Diagrama de fases.	7
Figura 7 – Vértice destacado da rede.	8
Figura 8 – j -ésima linha destacada da rede.	8
Figura 9 – Exemplos de condições de contorno fixas para o modelo de seis vértices.	11
Figura 10 – Fronteira do tipo parede de domínio (DWBC) para o modelo de seis vértices heterogêneo.	14
Figura 11 – Representação gráfica das correlações $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$	19
Figura 12 – Ilustração do numerador de (2.33).	21
Figura 13 – Probabilidade de formação de domínio ferroelétrico (EFP).	25
Figura 14 – Fronteira do tipo parede de domínio com uma extremidade reflexiva (RE) para o modelo de seis vértices heterogêneo.	38
Figura 15 – Leitura dos pesos.	38
Figura 16 – Representação dos pesos da fronteira reflexiva, em termos de setas e linhas.	41
Figura 17 – Representação gráfica das correlações $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$ no caso da fronteira com uma extremidade reflexiva.	47
Figura 18 – Representação gráfica de $F_N^{(r,s)}$ para o modelo de seis vértices com condição de contorno reflexiva.	47
Figura 19 – As funções $A_N^{(r)}$ e $D_N^{(r)}$	58
Figura 20 – Ilustração da rede com condição de contorno do tipo parede de domínio no regime $ \Delta < 1$, no limite termodinâmico.	63
Figura 21 – Ilustração da rede com uma extremidade reflexiva no regime $ \Delta < 1$, no limite termodinâmico.	64
Figura 22 – Exemplo de configuração permitida na representação de linhas e seu equivalente em termos de setas.	72
Figura 23 – Rede retangular $N \times (N - 1)$ com fronteira DWBC exceto pela linha espessa na borda esquerda.	72

Figura 24 – (a) Rede estendida para aplicação do método da tangente no modelo de seis vértices com condição de contorno parede de domínio. (b) Limite contínuo da rede estendida.	73
Figura 25 – Curvas árticas para o modelo de seis vértices com DWBC no regime desordenado.	77
Figura 26 – Círculo ártico.	78
Figura 27 – Rede estendida para aplicação do método da tangente no caso da fronteira com uma extremidade reflexiva.	79
Figura 28 – Rede estendida no limite termodinâmico (reescalada).	80
Figura 29 – (a) Domínio $\Lambda_k^{(1)}$. (b) Interpretação das linhas da rede $\Lambda_k^{(1)}$ em termos dos elementos das matrizes de monodromia \mathcal{T} e $\check{\mathcal{T}}$	84

Sumário

	Introdução	1
1	O MODELO DE SEIS VÉRTICES	5
1.1	Método do espalhamento inverso quântico	6
1.2	Influência das condições de contorno no limite termodinâmico	11
2	FRONTEIRA DO TIPO PAREDE DE DOMÍNIO	14
2.1	Função de partição e o determinante de Izergin-Korepin	14
2.2	Limite homogêneo de Z_N	17
2.3	Funções de correlação na fronteira	19
2.4	A probabilidade de formação de domínio ferroelétrico	24
2.4.1	Limite homogêneo das correlações	27
2.5	A função geradora $h_N(z)$	30
2.5.1	Representação integral das correlações	30
2.5.2	Limite assintótico da função geradora	35
3	FRONTEIRA COM UMA EXTREMIDADE REFLEXIVA	38
3.1	Álgebra de reflexão	39
3.2	Função de partição e o determinante de Tsuchiya	44
3.3	Funções de correlação	46
3.3.1	Limite homogêneo	54
3.3.2	Comportamento assintótico de $h_N(z)$	57
4	CURVAS ÁRTICAS NO REGIME DESORDENADO	62
4.1	Pontos de contato	65
4.2	Método da EFP	67
4.3	Método da tangente	71
4.3.1	Fronteira parede de domínio	71
4.3.2	Fronteira com uma extremidade reflexiva	78
4.3.2.1	Caso $a = b$	80
4.3.2.2	Caso $a \neq b$	83
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	92

APÊNDICES	96
A POLINÔMIOS ORTOGONAIS E BI-ORTOGONAIS	96
B MÉTODO DO PONTO DE SELA	98
REFERÊNCIAS	100

Introdução

Um dos modelos mais importantes em sistemas integráveis é o modelo de seis vértices. Originalmente, o modelo foi proposto em 1935 por Pauling com o intuito de descrever o problema da entropia residual do gelo. Quando o gelo se forma, os átomos de oxigênio (O) se distribuem em uma estrutura tetraédrica¹, ligados entre si por pontes de hidrogênio (H). Embora a distância O-O seja fixa, Pauling propôs que o átomo de H entre eles se posiciona mais próximo de um destes, uma vez que as concentrações de íons $(\text{OH})^-$ e $(\text{H}_3\text{O})^+$ são insignificantes na água. Assim, a distribuição das posições dos átomos de hidrogênio deveria ocorrer segundo a *regra do gelo*: dado um átomo de oxigênio, há dois átomos de hidrogênio mais próximos e dois mais distantes. Devido a multiplicidade de configurações igualmente acessíveis, no limite de baixas temperaturas a entropia do gelo não tende a zero, fenômeno que recebe o nome de entropia residual [1]. Vale mencionar que o valor estimado por Pauling para a entropia residual foi confirmado experimentalmente com boa precisão [2].

Pouco tempo depois, em 1941, o modelo foi generalizado por Slater com a finalidade de estudar a transição de fase ferroelétrica no cristal KH_2PO_4 (modelo KDP). Neste composto, os fosfatos $(\text{PO}_4)^{-3}$ se distribuem com número de coordenação quatro, conectados por intermédio de um átomo de hidrogênio, que também deve se posicionar de acordo com a regra do gelo a fim de permitir a formação de íons $(\text{H}_2\text{PO}_4)^-$. Contudo, diferente do caso do gelo, nem todas as configurações são equivalentes: aquelas nas quais os dois átomos de H estão dispostos de forma que estes íons sejam dipolos elétricos alinhados com o eixo de anisotropia do cristal são energeticamente mais favoráveis que as demais. Usando uma teoria de campo médio, Slater obteve uma transição de primeira ordem e uma curva para a susceptibilidade elétrica em boa concordância com o observado [3].

Até hoje, sistemas que obedecem a regra do gelo são amplamente investigados tanto teoricamente como experimentalmente. Dentre estes, um dos exemplos mais proeminentes são os materiais do tipo gelo de spin (“spin ice”), explorados principalmente no estudo de sistemas magnéticos frustrados [4–7]. Gelos de spin são materiais ferromagnéticos nos quais metais terras-raras se distribuem em uma estrutura pirocloro, formada por tetraedros ligados pelos seus vértices. Como estes elementos possuem momento magnético intrínseco elevado, em baixas temperaturas os spins se comportam efetivamente como em um modelo de Ising, apontando para o centro de cada tetraedro ou no sentido oposto, sendo que estas direções são selecionadas pela regra do gelo [8]. É interessante notar que, apesar de serem regidos por mecanismos de natureza completamente diferente, estes materiais têm entropia

¹Na realidade, os átomos de oxigênio se organizam em uma estrutura hexagonal wurtzita quando o gelo se cristaliza; porém, o ponto importante é que cada átomo tem quatro primeiros vizinhos.

residual igual a do gelo [9].

De forma genérica, o modelo de seis vértices é definido ao levarmos a regra do gelo para uma rede bidimensional retangular, cujas arestas podem assumir dois estados – tomando o modelo do gelo como referência, os vértices fazem o papel dos átomos de oxigênio, enquanto as arestas correspondem às ligações químicas, com cada estado representando as duas posições possíveis que um átomo de hidrogênio pode ocupar. A solução exata deste modelo foi obtida por Lieb que, em 1967, calculou a entropia residual do gelo bidimensional, chegando a um valor bastante próximo ao de Pauling [10]. No mesmo ano, Lieb ainda tratou outros sistemas que podem ser investigados através do modelo de seis vértices como casos particulares dos seus pesos estatísticos, reproduzindo os resultados referentes ao modelo KDP [11] e apresentando a solução para o modelo F [12], proposto por Rys para um cristal antiferroelétrico [13]. Generalizações foram investigadas por Sutherland [14] e Yang [15].

Em todos estes casos, foram adotadas condições de contorno periódicas. Com isto, a função de partição do modelo pode ser escrita como o traço da matriz de transferência (a ser introduzida a seguir) e, no limite termodinâmico, determinar o seu maior autovalor é suficiente para o cálculo das propriedades termodinâmicas do sistema. A técnica utilizada para a diagonalização da matriz de transferência é o *ansatz* de Bethe, proposto originalmente em 1931 para a solução do modelo de Heisenberg unidimensional isotrópico (XXX) [16]. Mais do que uma coincidência, foi provado que a matriz de transferência do modelo de seis vértices (tratado por Sutherland [14]) e o Hamiltoniano do modelo XXZ comutam e, portanto, compartilham os mesmos autovetores [17].

Na realidade, isto é apenas um caso especial da observação mais abrangente de que a matriz de transferência do modelo de seis vértices comuta para diferentes parâmetros espectrais², o que é uma consequência da equação de Yang-Baxter [18]. Com isso, cabe à matriz de transferência o papel de geradora de quantidades conservadas, uma vez que se pode obter Hamiltonianos de sistemas quânticos unidimensionais através de sua derivada logarítmica. Esta conexão entre modelos clássicos estatísticos em duas dimensões e modelos quânticos em uma dimensão está no âmago da teoria atual de sistemas integráveis [19].

Além das condições de contorno periódicas, o modelo de seis vértices também foi estudado com fronteiras livres, antiperiódicas e uma série de condições de contorno fixas [20–29]. Via de regra, espera-se que as quantidades termodinâmicas de um sistema físico em equilíbrio sejam independentes da escolha da fronteira – entretanto, o modelo de seis vértices demonstra forte dependência das condições de contorno mesmo no limite termodinâmico. Para fins de comparação, considere as fronteiras periódica e parede de domínio: enquanto que a energia livre no primeiro caso é expressa em termos de uma integral não trivial [18], no segundo é uma simples combinação de funções elementares [30], sendo

²Em termos dos quais se escreve os pesos de Boltzmann do modelo.

que uma não pode ser reduzida na outra e vice-versa. Esta discrepância no valor da energia livre foi interpretada como um indicativo de que o modelo de seis vértices com fronteira parede de domínio poderia apresentar separação espacial de fases no regime desordenado (no qual não ocorre predominância de um tipo de vértice sobre os demais). Como consequência da regra do gelo, as possibilidades de estados na vizinhança de fronteiras fixas podem ser restringidos severamente, de maneira que, mesmo se ajustarmos a temperatura para que o regime seja desordenado, regiões ordenadas de tamanho macroscópico se alastram em direção ao interior da rede.

Na realidade, separação espacial de fases não é um fenômeno exclusivo do modelo de seis vértices, tendo sido investigado em vários outros contextos ([31–33] são apenas algumas referências). Talvez o exemplo mais proeminente seja o problema da cobertura de um diamante asteca com dominós. Diamante asteca é o nome dado a geometria que limita uma região de uma rede quadriculada da forma ilustrada na Figura 1(a), e os dominós são retângulos (ocupando dois quadrados) que devem preencher completamente o tabuleiro sem se sobrepor. Os dominós são distinguidos em quatro orientações, como ilustrado na Figura 1(b). Ao distribuir dominós aleatoriamente a fim de revestir todo o

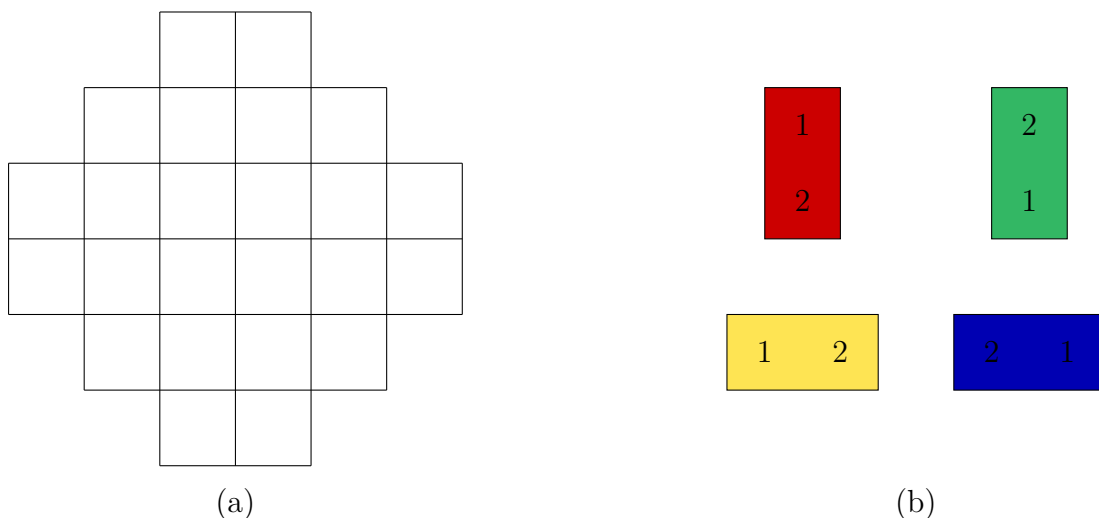


Figura 1 – (a) Diamante asteca de ordem 3. (b) Possíveis orientações para os dominós.
Fonte: elaborada pela autora.

tabuleiro, distingue-se quatro regiões congeladas (i.e. preenchidas com dominós de mesma orientação) partindo das pontas do losango, e um miolo “embaralhado”. Veja a Figura 2. Quanto maior o número de dominós, mais nítida é a separação entre as regiões e, no limite em que tende a infinito, estas fases são separadas por um círculo – resultado que ficou conhecido como teorema do círculo ártico [34]. Cabe mencionar que este problema pode ser mapeado no modelo de seis vértices com condição de contorno parede de domínio no ponto de férmions livres [35].

Vários dos modelos nos quais se observa separação espacial de fases podem ser

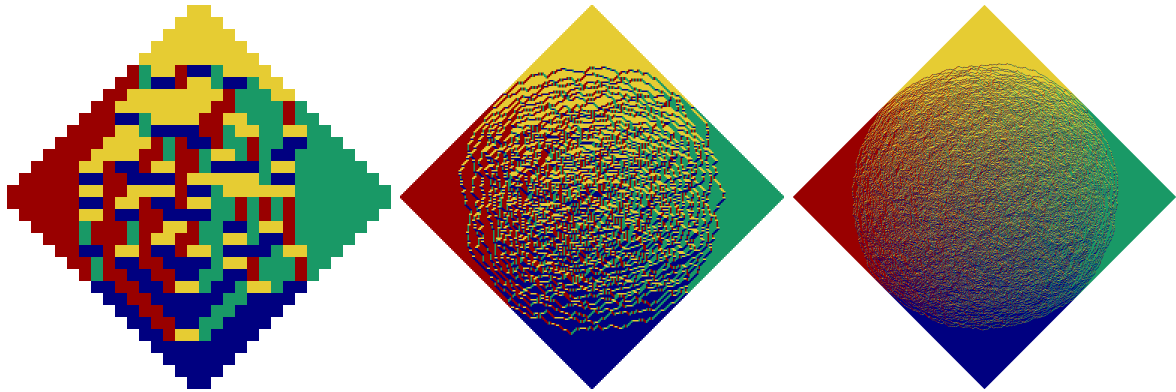


Figura 2 – Cobertura de um diamante asteca de ordem L com dominós, em que $L = 16, 128, 1024$ da esquerda para a direita. Fonte: J.-M. Stéphan (2019) [36].

formulados em termos de dímeros ou férmions livres, o que torna o problema de encontrar as curvas de separação de fases – que ficaram conhecidas como *curvas árticas* – mais tratável [37–41]. Entretanto, as técnicas desenvolvidas para estes modelos não são aplicáveis ao modelo de seis vértices, de modo que, em grande parte, a questão da determinação das curvas árticas no modelo de seis vértices no regime desordenado, para qualquer tipo de fronteira e valores arbitrários dos parâmetros espectrais, está em aberto. Nesta direção, resultados promissores têm sido obtidos para a versão estocástica do modelo [42, 43], ou para o modelo de seis vértices com condição de contorno do tipo parede de domínio [44–46] (e algumas variações desta [47, 48]). Além do interesse em encontrar expressões analíticas para as curvas árticas, uma relação entre estas curvas para o modelo de seis vértices e “quenches” quânticos em cadeias de spin unidimensionais tem sido explorada recentemente [49, 50].

Este trabalho propõe o estudo da separação de fases no modelo de seis vértices, com enfoque na determinação das curvas árticas no regime desordenado com fronteira parede de domínio [45, 46] e na sua generalização com uma extremidade reflexiva [51, 52], que introduziremos a seguir. No Capítulo 1, apresentaremos o modelo de seis vértices e o espalhamento inverso quântico [19]. Os Capítulos 2 e 3 são destinados ao estudo da função de partição e de correlações na fronteira para o modelo com condição de contorno parede de domínio e reflexiva, respectivamente. No Capítulo 4, usaremos as ferramentas obtidas nos capítulos anteriores para determinar as curvas no modelo de seis vértices. Em seguida, apresentamos as considerações finais.

1 O modelo de seis vértices

O modelo de seis vértices é definido em uma rede bidimensional retangular cujas arestas podem assumir dois estados, usualmente representados por setas horizontais e verticais. A distribuição dos sentidos das setas deve obedecer à regra do gelo: com respeito a cada vértice, duas setas apontam em sua direção e as outras duas na direção oposta, levando a um total de seis configurações possíveis [18]. Esta descrição está ilustrada na Figura 3.

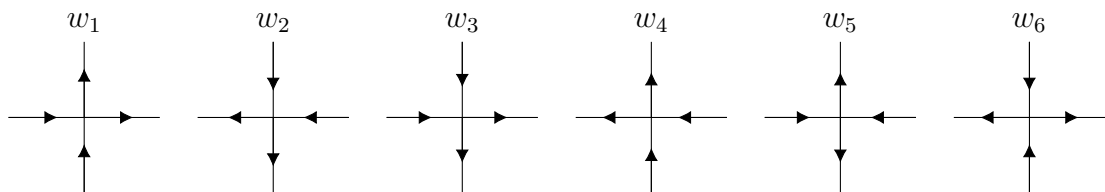


Figura 3 – As seis configurações de vértices permitidas, segundo a regra do gelo. Fonte: elaborada pela autora.

Uma representação equivalente do modelo pode ser formulada em termos de linhas – trocamos setas para a esquerda ou para baixo por linhas espessas, enquanto setas para a direita ou para cima correspondem a linhas finas. Com isto, os estados permitidos passam a ser representados como na Figura 4.

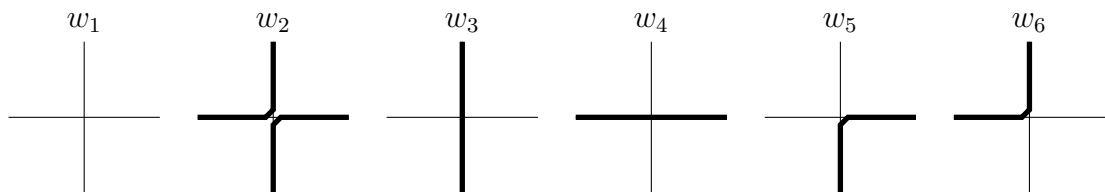


Figura 4 – Representação equivalente a da Figura 3, em termos de linhas. Fonte: elaborada pela autora.

Neste Capítulo, descreveremos o modelo de seis vértices sob o formalismo do método do espalhamento inverso quântico [19], introduzindo a notação que será usada no restante do texto. Em seguida, discutiremos a influência das condições de contorno no cálculo das propriedades termodinâmicas do modelo comparando os resultados para três fronteiras diferentes – periódica [18], parede de domínio [30] e parede de domínio com uma extremidade reflexiva [28]. Discutiremos também, qualitativamente, o fenômeno da separação espacial de fases neste modelo.

1.1 Método do espalhamento inverso quântico

A construção da função de partição do modelo de seis vértices, bem como das funções de correlação no caso das fronteiras parede de domínio e reflexiva estudadas neste trabalho é feita através do formalismo do método do espalhamento inverso quântico [19].

Considere uma rede bidimensional retangular com N linhas e M colunas. Dado que cada aresta da rede pode assumir dois estados, associamos a cada uma delas um espaço vetorial de dimensão 2. Denotaremos por $\{\mathcal{H}_j\}_{j=1}^N$ e $\{\mathcal{V}_k\}_{k=1}^M$ os espaços vetoriais das linhas e colunas, respectivamente, com estados de base $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$. Adotaremos a convenção de que as setas que apontam para direita ou para cima (esquerda ou para baixo) correspondem ao estado $|\uparrow\rangle$ ($|\downarrow\rangle$). Veja a Figura 5. Matricialmente, estes estados são representados por

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (1.1)$$

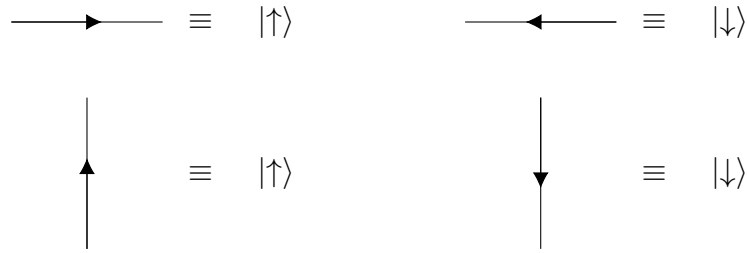


Figura 5 – Convenção adotada para os estados das arestas. Fonte: elaborada pela autora.

Em um modelo heterogêneo, os pesos de Boltzmann dependem do sítio da rede, e esta dependência é trazida através dos parâmetros λ_j , referente a j -ésima linha, e μ_k , referente a k -ésima coluna. Se assumirmos que os pesos são invariantes pela inversão simultânea de todas as setas, haverão apenas três pesos distintos,

$$w_1 = w_2 \equiv a(\lambda_j, \mu_k), \quad w_3 = w_4 \equiv b(\lambda_j, \mu_k), \quad w_5 = w_6 \equiv c(\lambda_j, \mu_k). \quad (1.2)$$

Neste caso, dizemos que o modelo é simétrico. Estes pesos satisfazem a equação do invariante [18],

$$\Delta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab}, \quad (1.3)$$

em que Δ é uma constante cujo valor define o tipo de ordenamento da rede. Se $\Delta > 1$, temos que $a > b, c$ ($b > a, c$), o que significa que há predominância de vértices w_1 ou w_2 (w_3 ou w_4). Nestes casos, dizemos que o regime é ferroelétrico. Se $-1 < \Delta < 1$, deve haver uma distribuição aproximadamente homogênea dos seis tipos de vértices e, portanto, o regime é dito desordenado. Finalmente, se $\Delta < -1$, vértices dos tipos w_5, w_6 são

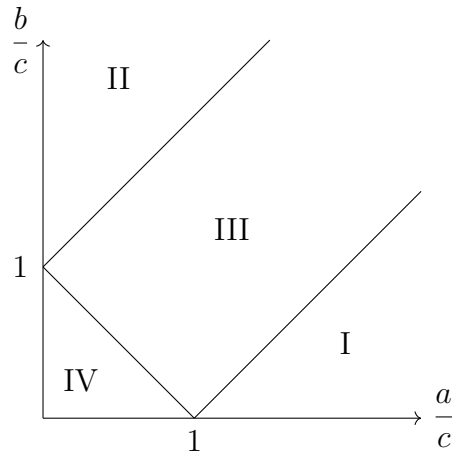


Figura 6 – Diagrama de fases. As regiões I e II correspondem a $\Delta > 1$, sendo que $a > b, c$ em I e $b > a, c$ em II. Regiões III e IV correspondem a $-1 < \Delta < 1$ e $\Delta < -1$, respectivamente. Fonte: elaborada pela autora.

favorecidos, o que caracteriza o regime antiferroelétrico. Veja a Figura 6 para um diagrama de fases.

Se $|\Delta| < 1$, por exemplo, estes pesos podem ser parametrizados da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} a(\lambda_j, \mu_k) &= \sin(\lambda_j - \mu_k + \eta), \\ b(\lambda_j, \mu_k) &= \sin(\lambda_j - \mu_k - \eta), \\ c(\lambda_j, \mu_k) &= \sin(2\eta), \end{aligned} \tag{1.4}$$

com $0 < \eta < \pi/2$, $\eta < \lambda_j < \pi - \eta$, $-\lambda_j < \mu_k < \lambda_j$, $j = 1, \dots, N$, $k = 1, \dots, M$ para garantir que os pesos de Boltzmann sejam reais e positivos. No decorrer do texto, omitiremos os argumentos de $c(\lambda, \mu) \equiv c$, por ser constante.

Ao vértice da posição (j, k) , associamos um operador $\mathcal{L}_{jk}(\lambda_j, \mu_k)$ que leva em suas entradas os pesos estatísticos associados a cada configuração. Este operador atua no espaço $\mathcal{H}_j \otimes \mathcal{V}_k$ e, para o modelo de seis vértices simétrico, é dado por

$$\mathcal{L}_{jk}(\lambda_j, \mu_k) = \begin{bmatrix} a(\lambda_j, \mu_k) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\lambda_j, \mu_k) & c(\lambda_j, \mu_k) & 0 \\ 0 & c(\lambda_j, \mu_k) & b(\lambda_j, \mu_k) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(\lambda_j, \mu_k) \end{bmatrix} \tag{1.5}$$

$$\equiv \mathcal{L}_{jk}(\lambda_j - \mu_k), \tag{1.6}$$

Graficamente, podemos representar os elementos do operador \mathcal{L} como na Figura 7, na qual ω e ς assinalam, respectivamente, os estados das arestas horizontais e verticais.

O produto ordenado de operadores \mathcal{L} sobre as colunas¹ define a matriz de mono-

¹As matrizes de monodromia também podem ser definidas pelo produto ordenado dos pesos de Boltzmann ao longo de cada linha.

de uma família de matrizes de transferência comutantes são ditos integráveis. No regime $|\Delta| < 1$, as funções $f(\lambda, \mu)$ e $g(\lambda, \mu)$ são dadas por

$$f(\lambda, \mu) = \frac{\sin(\lambda - \mu + 2\eta)}{\sin(\lambda - \mu)}, \quad g(\lambda, \mu) = \frac{\sin(2\eta)}{\sin(\lambda - \mu)}. \quad (1.11)$$

No espaço \mathcal{H}_j , a matriz de monodromia (1.7) pode ser escrita como uma matriz 2×2 ,

$$\mathcal{T}_j(\lambda_j) = \begin{bmatrix} A(\lambda_j) & B(\lambda_j) \\ C(\lambda_j) & D(\lambda_j) \end{bmatrix}, \quad (1.12)$$

em que $A(\lambda)$, $B(\lambda)$, $C(\lambda)$ e $D(\lambda)$ são operadores que atuam no espaço $\mathcal{V} = \otimes_{k=1}^M \mathcal{V}_k$. Sejam $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ estados de base deste espaço, dados por

$$|\uparrow\rangle = \otimes_{k=1}^M |\uparrow\rangle_k, \quad |\downarrow\rangle = \otimes_{k=1}^M |\downarrow\rangle_k. \quad (1.13)$$

Usando a definição (1.7) para a matriz de monodromia, juntamente com (1.6), vemos que $|\uparrow\rangle$ é autoestado dos operadores $A(\lambda)$ e $D(\lambda)$, satisfazendo

$$A(\lambda) |\uparrow\rangle = \alpha(\lambda) |\uparrow\rangle, \quad D(\lambda) |\uparrow\rangle = \delta(\lambda) |\uparrow\rangle, \quad (1.14)$$

em que

$$\alpha(\lambda) = \prod_{k=1}^M a(\lambda, \mu_k), \quad \delta(\lambda) = \prod_{k=1}^M b(\lambda, \mu_k), \quad (1.15)$$

e é aniquilado pelo operador $C(\lambda)$, isto é, $C(\lambda) |\uparrow\rangle = 0$. Analogamente,

$$A(\lambda) |\downarrow\rangle = \delta(\lambda) |\downarrow\rangle, \quad D(\lambda) |\downarrow\rangle = \alpha(\lambda) |\downarrow\rangle, \quad B(\lambda) |\downarrow\rangle = 0. \quad (1.16)$$

Por outro lado, o operador $B(\lambda)$ produz uma combinação linear de estados ao atuar em $|\uparrow\rangle$. Por isso, podemos usá-lo para produzir novos estados através de sua ação sucessiva no estado de referência, como por exemplo

$$B(\lambda_r) \dots B(\lambda_1) |\uparrow\rangle, \quad r \leq N. \quad (1.17)$$

Agora, para saber como $A(\lambda)$ e $D(\lambda)$ atuam sobre (1.17), precisamos de relações de comutação entre estes operadores e $B(\lambda)$.

Ao substituirmos a forma (1.12) da matriz de monodromia na equação (1.8), obtemos dezesseis relações de comutação envolvendo os operadores $A(\lambda)$, $B(\lambda)$, $C(\lambda)$ e $D(\lambda)$. Dentre estas, destacamos as que serão utilizadas adiante:

$$[B(\lambda), B(\mu)] = [C(\lambda), C(\mu)] = 0, \quad (1.18)$$

$$A(\lambda)B(\mu) = f(\mu, \lambda)B(\mu)A(\lambda) - g(\mu, \lambda)B(\lambda)A(\mu), \quad (1.19)$$

$$D(\lambda)B(\mu) = f(\lambda, \mu)B(\mu)D(\lambda) - g(\lambda, \mu)B(\lambda)D(\mu). \quad (1.20)$$

Com as relações de comutação (1.18) e (1.19), podemos calcular a ação de $A(\lambda)$ sobre (1.17), que será dada por

$$A(\lambda) \prod_{j=1}^r B(\lambda_j) |\uparrow\rangle = \Lambda_\alpha \prod_{j=1}^r B(\lambda_j) |\uparrow\rangle + \sum_{i=1}^r \Lambda_\alpha^{(i)} B(\lambda) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r B(\lambda_j) |\uparrow\rangle, \quad (1.21)$$

sendo

$$\Lambda_\alpha = \alpha(\lambda) \prod_{j=1}^r f(\lambda_j, \lambda), \quad \Lambda_\alpha^{(i)} = -\alpha(\lambda_i) g(\lambda_i, \lambda) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f(\lambda_j, \lambda_i), \quad i = 1, \dots, r. \quad (1.22)$$

A expressão da esquerda em (1.22), para Λ_α , vem de coletar o primeiro termo de (1.19) ao passar $A(\lambda)$ por cada $B(\lambda_j)$. Quando, finalmente, $A(\lambda)$ chega ao estado $|\uparrow\rangle$, usa-se a equação de autovalor (1.14). Já a expressão da direita é obtida usando ambos os termos de (1.19). Para vermos isto, vamos calcular $\Lambda_\alpha^{(1)}$, que é o coeficiente de $B(\lambda)B(\lambda_2) \dots B(\lambda_r) |\uparrow\rangle$. Temos

$$[A(\lambda)B(\lambda_1)] \prod_{j=2}^r B(\lambda_j) |\uparrow\rangle = [f(\lambda_1, \lambda)B(\lambda_1)A(\lambda) - g(\lambda_1, \lambda)B(\lambda)A(\lambda_1)] \prod_{j=2}^r B(\lambda_j) |\uparrow\rangle. \quad (1.23)$$

O primeiro destes termos entra para Λ_α , pois somente este pode incluir todos os operadores $B(\lambda_j)$, com $j = 1, \dots, r$; por outro lado, o segundo termo é o único que não contém $B(\lambda_1)$. A única possibilidade de que continue com todos os demais $B(\lambda_j)$, com $j \neq 1$, é se considerarmos novamente apenas o primeiro termo de (1.19) ao passar $A(\lambda)$ para a frente, uma vez que o segundo termo troca os argumentos dos operadores. No final, obtemos

$$\Lambda_\alpha^{(1)} = -g(\lambda_1, \lambda) \alpha(\lambda_1) \prod_{j=2}^r f(\lambda_j, \lambda_1). \quad (1.24)$$

Note que, para $\Lambda_\alpha^{(i)}$, $i \neq 1$, as expressões devem ser completamente análogas pois, como os $B(\lambda_j)$ comutam, poderíamos ter repetido a análise acima começando a passar $A(\lambda)$ por qualquer deles. Assim, obtém-se a expressão da equação (1.22). Analogamente, ao usarmos as relações de comutação (1.18) e (1.20), obtemos

$$D(\lambda) \prod_{j=1}^r B(\lambda_j) |\uparrow\rangle = \Lambda_\delta \prod_{j=1}^r B(\lambda_j) |\uparrow\rangle + \sum_{i=1}^r \Lambda_\delta^{(i)} B(\lambda) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r B(\lambda_j) |\uparrow\rangle, \quad (1.25)$$

em que

$$\Lambda_\delta = \delta(\lambda) \prod_{j=1}^r f(\lambda, \lambda_j), \quad \Lambda_\delta^{(i)} = -\delta(\lambda_i) g(\lambda, \lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f(\lambda_i, \lambda_j), \quad i = 1, \dots, r. \quad (1.26)$$

1.2 Influência das condições de contorno no limite termodinâmico

Como mencionado na Introdução, o modelo de seis vértices foi estudado, do ponto de vista teórico, sob uma vasta gama de condições de contorno, sendo que os primeiros resultados foram obtidos para condições periódicas. Para o modelo de seis vértices simétrico, com pesos de Boltzmann dados por

$$w_1 = w_2 = \sin(\eta - \lambda), \quad w_3 = w_4 = \sin(\eta + \lambda), \quad w_5 = w_6 = \sin(2\eta), \quad -\eta < \lambda < \eta, \quad (1.27)$$

a energia livre por sítio é dada pela integral [18]

$$F_{\text{PBC}} = \varepsilon_{1,3} - k_B T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh[(2\eta \pm 2\lambda)x] \sinh[(\pi - 2\eta)x]}{2x \sinh(\pi x) \cosh(2\eta x)} dx, \quad (1.28)$$

em que $w_i = e^{-\varepsilon_i/k_B T}$, e ε_1 (ε_3) acompanha o sinal positivo (negativo) no integrando, adotado quando $\lambda < 0$ ($\lambda > 0$). Sob condições de contorno livre, antiperiódica ou uma mistura de condições toroidais, a energia livre por vértice é a mesma que (1.28) [20, 21, 29].

A situação muda ao considerarmos condições de contorno fixas. Um exemplo bem claro disto é a chamada condição de contorno ferroelétrica, em que todas as arestas da fronteira tem setas que apontam para dentro (ou fora) da rede (cf. Figura 9(a)). Pela regra do gelo, apenas uma configuração é admissível e, com isto, a entropia é zero independentemente do regime.

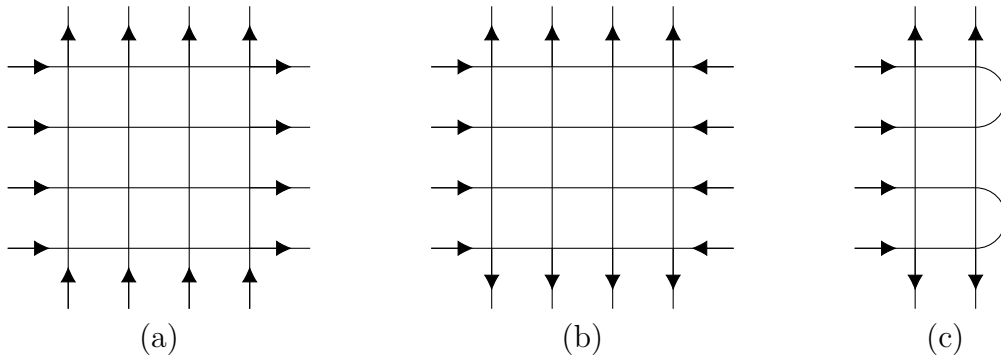


Figura 9 – Exemplos de condições de contorno fixas para o modelo de seis vértices: (a) ferroelétrica; (b) parede de domínio; (c) parede de domínio com uma extremidade reflexiva. Fonte: elaborada pela autora.

Um exemplo mais interessante de fronteira fixa é a condição de contorno do tipo parede de domínio (DWBC, do inglês “domain wall boundary condition”), introduzida em 1982 no contexto do cálculo de funções de correlação para o modelo XXZ [53]. Esta fronteira é caracterizada por setas apontando para dentro da rede em uma direção e para fora na outra, como ilustrado na Figura 9(b). A função de partição neste caso apresenta características que lhe permite ser escrita como o determinante de uma certa

matriz [25]. Ao calcular a energia livre deste sistema no regime desordenado, constata-se que é radicalmente diferente de (1.28), sendo dada por [30]

$$F_{\text{DWBC}} = k_B T \log \left[\frac{2\eta}{\pi} \frac{\cos(\pi\lambda/2\eta)}{\sin(\eta - \lambda) \sin(\eta + \lambda)} \right]. \quad (1.29)$$

As expressões (1.28) e (1.29) não são equivalentes – aliás, $F_{\text{DWBC}} > F_{\text{PBC}}$. Uma vez que $F \propto -\log Z$, e a função de partição Z é a soma sobre todos os estados possíveis, esta constatação indica que o número de configurações é restringido pela fronteira no caso DWBC em comparação ao caso periódico. Isto se atribui à regra do gelo, que deve criar regiões ordenadas nas proximidades das fronteiras, responsáveis pela emergência de diferentes fases coexistentes no limite contínuo da rede [54].

A separação de fases no modelo de seis vértices com fronteira parede de domínio foi investigada numericamente [55] e expressões analíticas para a curva ártica foram obtidas para quaisquer valores dos parâmetros espectrais no regime desordenado $|\Delta| < 1$ [44, 45]. Para tanto, estes autores introduziram uma função de correlação na fronteira – a probabilidade de formação de domínio ferroelétrico, sobre a qual iremos nos referir por EFP (do inglês “emptiness formation probability”) [56]. Em certo sentido, esta função de comporta como um parâmetro de ordem da rede, que vale 1 na região ordenada e 0 na desordenada, de modo que a curva ártica corresponde justamente ao ponto no qual esta correlação salta de um valor para outro. Esta abordagem recebeu o nome de *método da EFP*. Posteriormente, percebeu-se que as equações paramétricas que determinam a curva ártica vêm do envelope de uma família de linhas retas que, por sua vez, são determinadas por outro tipo de correlação do modelo. Isto culminou em outra abordagem para o tratamento de curvas árticas, o *método da tangente*, que se mostrou bastante útil para além do modelo de seis vértices. As correlações na fronteira para o modelo com condição de contorno DWBC serão estudadas no Capítulo 2, onde reproduziremos os resultados dos trabalhos [25, 56, 57]. Já o tratamento das curvas árticas através dos métodos supracitados será feito no Capítulo 4, no qual discutiremos os resultados de [45, 46].

Como possível variação da condição DWBC, podemos incluir uma extremidade reflexiva, como na Figura 9(c). Este modelo compartilha várias semelhanças com o caso da fronteira parede de domínio. A primeira delas é que sua função de partição também é o determinante de uma matriz, o que foi descoberto por Tsuchiya em 1998 [27]. Esta fórmula pode ser empregada, por exemplo, no cálculo de funções de correlação de sistemas integráveis abertos [58, 59], para os quais o modelo estatístico associado satisfaz a equação de Yang-Baxter no volume e a relação de reflexão, proposta por Sklyanin [60], nas fronteiras.

No que diz respeito às grandezas termodinâmicas, no regime desordenado a energia livre do modelo com extremidade reflexiva difere, em geral, tanto do resultado com

condições periódicas como DWBC no regime desordenado [28],

$$F_{\text{RE}} = \frac{k_B T}{2} \log \left[\frac{2\eta}{\pi} \frac{\cos[\pi(\lambda - \mu)/2\eta] \cos[\pi(\lambda + \mu)/2\eta]}{\sin(\eta + \lambda - \mu) \sin(\eta + \lambda + \mu) \sin(\eta - \lambda - \mu) \sin(\eta - \lambda + \mu)} \times \left(\frac{\sin(2\lambda) \sin(2\mu)}{\sin(\pi\lambda/\eta) \sin(\pi\mu/\eta)} \right)^{1/2} \right], \quad (1.30)$$

o que, mais uma vez, levanta a hipótese de separação espacial de fases neste regime, corroboradas por simulações de Monte Carlo [61].

Até então, não haviam resultados relativos a curvas árticas para o modelo de seis vértices com uma extremidade reflexiva disponíveis na literatura. Nossa primeira abordagem foi tentar implementar o método da EFP para este modelo. Isto nos levou a um estudo extenso das correlações na fronteira, sintetizados no trabalho [51] e apresentados no Capítulo 3. Além disso, nos dedicamos a adaptar o método da tangente para o caso da fronteira reflexiva, obtendo resultados concretos no ponto especial $\Delta = 0$, $\mu = 0$, $a = b$ [52]. Isto também será abordado no Capítulo 4.

2 Fronteira do tipo parede de domínio

O modelo de seis vértices com condição de contorno do tipo parede de domínio é definido na rede quadrada com fronteira fixa, de forma que as arestas da borda tenham setas apontando para dentro da rede na direção horizontal e para fora na direção vertical [19]. Uma ilustração disto está na Figura 10.

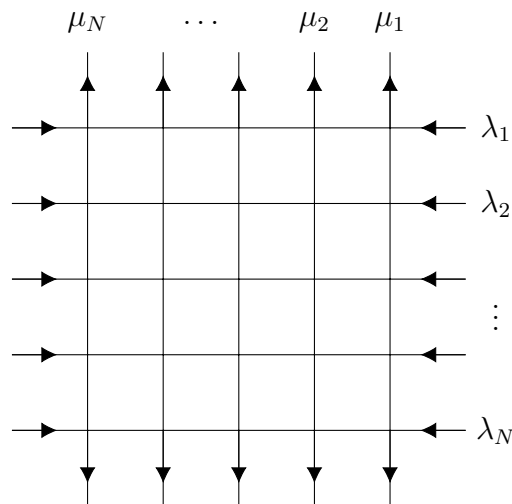


Figura 10 – Fronteira do tipo parede de domínio (DWBC) para o modelo de seis vértices heterogêneo, em uma rede de dimensões $N \times N$. Fonte: elaborada pela autora.

Neste Capítulo, calcularemos a função de partição do modelo de seis vértices com fronteira do tipo parede de domínio e veremos que ela pode ser expressa de maneira unívoca em termos do determinante de Izergin-Korepin [25]. Em seguida, estudaremos três tipos de correlações na fronteira [56, 57]. Estas correlações também admitem representações determinantes, bem como representações integrais em virtude de identidades que envolvem polinômios ortogonais [62]. Nos capítulos subsequentes, veremos como elas podem ser usadas no estudo das curvas árticas do modelo no regime desordenado [45].

2.1 Função de partição e o determinante de Izergin-Korepin

Como discutimos, os pesos de Boltzmann associados a cada configuração possível do vértice no sítio (j, k) são os elementos de matriz de $\mathcal{L}_{jk}(\lambda_j, \mu_k)$. Com isto, a função de partição é dada por

$$Z_N = \sum_{\{\omega\}} \sum_{\{\varsigma\}} \prod_{j,k=1}^N \langle \omega_j^k, \varsigma_j^k | \mathcal{L}_{jk}(\lambda_j, \mu_k) | \omega_{j-1}^k, \varsigma_j^{k-1} \rangle, \quad (2.1)$$

em que $\{\omega\}$ ($\{\varsigma\}$) denota o conjunto dos parâmetros ω_j^k (ς_j^k), $j, k = 1, \dots, N$. Vale ressaltar que a condição de contorno fixa $|\omega_j^N\rangle = |\varsigma_0^k\rangle = |\uparrow\rangle$, $|\omega_j^0\rangle = |\varsigma_N^k\rangle = |\downarrow\rangle$. Ao somar primeiro sobre o conjunto das configurações horizontais, $\{\omega\}$, e depois sobre as verticais, $\{\varsigma\}$, podemos escrever a função de partição (2.1) como

$$Z_N = \langle \downarrow | B(\lambda_1) \dots B(\lambda_N) | \uparrow \rangle. \quad (2.2)$$

Equivalentemente, se efetuarmos primeiro a soma sobre as configurações verticais, a função de partição pode ser escrita de forma similar, a saber

$$Z_N = \langle \bar{\uparrow} | C(\mu_1) \dots C(\mu_N) | \bar{\downarrow} \rangle, \quad (2.3)$$

em que $C(\mu_k)$, $k = 1, \dots, N$, são elementos da matriz de monodromia definida pelo produto ordenado dos pesos ao longo das linhas da rede, e $|\bar{\downarrow}\rangle = \otimes_{j=1}^N |\downarrow\rangle_j$, $|\bar{\uparrow}\rangle = \otimes_{j=1}^N |\uparrow\rangle_j$ são estados de base do espaço horizontal $\mathcal{H} = \otimes_{j=1}^N \mathcal{H}_j$.

Em [53], Korepin apresentou quatro lemas que a função de partição Z_N (2.2) satisfaz e que a definem unicamente. Posteriormente, no trabalho [25], os autores mostraram que estes lemas permitem escrever a função de partição na forma de um determinante. No que segue, vamos introduzir e discutir estes lemas e depois apresentar a fórmula do determinante de Izergin-Korepin.

Lema 2.1.1. $Z_1 = c$.

Segue diretamente das equações (1.6) e (2.2), pois $Z_1 = \langle \downarrow | B(\lambda) | \uparrow \rangle = c$.

Lema 2.1.2. Z_N é uma função simétrica dos conjuntos de parâmetros $\{\lambda_j\}$ e $\{\mu_k\}$ separadamente.

No que diz respeito aos parâmetros $\{\lambda_j\}$, $j = 1, \dots, N$, isto é uma consequência direta de $[B(\lambda), B(\mu)] = 0$ aplicado a expressão (2.2) para a função de partição. Analogamente, uma vez que $[C(\lambda), C(\mu)] = 0$, podemos ver de (2.3) que Z_N também é simétrica com relação aos parâmetros $\{\mu_k\}$.

Lema 2.1.3. A dependência de Z_N em cada parâmetro λ_j é da forma

$$Z_N = e^{-(N-1)i\lambda_j} P_{N-1}(e^{2i\lambda_j}), \quad (2.4)$$

e, de forma análoga, a dependência em cada μ_k é dada por $Z_N = e^{(N-1)i\mu_k} Q_{N-1}(e^{-2i\mu_k})$, sendo $P_n(x)$, $Q_n(x)$ polinômios de grau n em x .

Para ver isto, considere a parametrização (1.4). Os pesos $a(\lambda, \mu)$ e $b(\lambda, \mu)$ podem ser reescritos como

$$a(\lambda, \mu) = \frac{e^{-i\lambda} (e^{i(2\lambda-\mu+\eta)} - e^{i(\mu-\eta)})}{2}, \quad b(\lambda, \mu) = \frac{e^{-i\lambda} (e^{i(2\lambda-\mu-\eta)} - e^{i(\mu+\eta)})}{2}. \quad (2.5)$$

Escrevendo o operador $\mathcal{L}_{jk}(\lambda_j, \mu_k)$ como uma matriz 2×2 ,

$$\mathcal{L}_{jk}(\lambda_j, \mu_k) = \begin{bmatrix} A_k(\lambda_j, \mu_k) & B_k(\lambda_j, \mu_k) \\ C_k(\lambda_j, \mu_k) & D_k(\lambda_j, \mu_k) \end{bmatrix}, \quad (2.6)$$

e substituindo os pesos acima, vê-se que $A_k(\lambda_j, \mu_k)$ e $D_k(\lambda_j, \mu_k)$ são polinômios de primeiro grau em $e^{2i\lambda_j}$, multiplicados por um fator $e^{-i\lambda_j}$, enquanto $B_k(\lambda_j, \mu_k)$ e $C_k(\lambda_j, \mu_k)$ são constantes. Fazendo o produto ordenado dos operadores \mathcal{L}_{jk} em $k = 1, \dots, N$, encontraremos que os elementos da diagonal da matriz de monodromia, $A(\lambda_j)$ e $D(\lambda_j)$, são polinômios de grau N em $e^{2i\lambda_j}$ com um fator $e^{-Ni\lambda_j}$ em comum, ao passo que os elementos fora da diagonal, $B(\lambda_j)$ e $C(\lambda_j)$, dependem de λ_j conforme proposto no Lema. Uma vez que a dependência de Z_N em λ_j é a mesma que a dependência de $B(\lambda_j)$, por (2.2), e os demais $B(\lambda_i)$, $i \neq j$, independem de λ_j , o Lema fica justificado. Para a dependência em cada μ_k o raciocínio é similar.

Lema 2.1.4. *No ponto $\lambda_1 - \mu_1 = \eta$, é válida a relação de recorrência*

$$Z_N \Big|_{\lambda_1 - \mu_1 = \eta} = c \prod_{k=2}^N a(\lambda_1, \mu_k) \prod_{j=2}^N a(\lambda_j, \mu_1) Z_{N-1}[\lambda_1; \mu_1], \quad (2.7)$$

em que $Z_{N-1}[\lambda_j; \mu_k]^1$ é a função de partição de uma rede $(N-1) \times (N-1)$, havendo excluída a j -ésima linha e k -ésima coluna da rede original $N \times N$.

Se $\lambda_1 - \mu_1 = \eta$, $a(\lambda_1, \mu_1) = c$ e $b(\lambda_1, \mu_1) = 0$. De (1.6),

$$\mathcal{L}_{11}(\lambda_1 = \mu_1 + \eta, \mu_1) = c \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = c P,$$

em que P permuta os estados dos espaços \mathcal{V}_1 e \mathcal{H}_1 . Tomando a expressão (2.2) para a função de partição e calculando o produto interno no espaço \mathcal{V}_1 , obtém-se

$$Z_N \Big|_{\lambda_1 - \mu_1 = \eta} = c \alpha_2(\lambda_1) \prod_{j=2}^N a(\lambda_j, \mu_1) \langle \Downarrow|_2 B_2(\lambda_N) \dots B_2(\lambda_2) |\Uparrow\rangle_2,$$

em que $\alpha_2(\lambda) = \prod_{k=2}^N a(\lambda, \mu_k)$, $|\Uparrow\rangle_2 = \otimes_{k=2}^N |\uparrow\rangle_k$ e $B_2(\lambda_j) = \langle \uparrow | \mathcal{T}_{j2}(\lambda_j) | \Downarrow \rangle$, sendo $\mathcal{T}_{j2}(\lambda_j) = \mathcal{L}_{jN}(\lambda_j, \mu_N) \dots \mathcal{L}_{j2}(\lambda_j, \mu_2)$, $j = 1, \dots, N$.

Note que, apesar de termos fixado $\lambda_1 - \mu_1$, um resultado análogo deve valer se escolhermos qualquer outro par λ_j, μ_k . Tomando algum λ_j e fazendo, uma de cada vez, as escolhas $\lambda_j - \mu_k = \eta$, $k = 1, \dots, N$, obtemos o valor de Z_N em N pontos, o que fornece

¹No decorrer do texto, os colchetes indicarão os parâmetros dos quais a função independe.

uma maneira única de fixar todos os coeficientes do polinômio $P_{N-1}(e^{2\lambda_j})$ do Lema 2.1.3. É possível verificar diretamente que a função de partição dada por

$$Z_N = \frac{\prod_{j,k=1}^N a(\lambda_j, \mu_k) b(\lambda_j, \mu_k)}{\prod_{1 \leq i < j \leq N} d(\lambda_j, \lambda_i) \prod_{1 \leq k < l \leq N} d(\mu_k, \mu_l)} \det Z, \quad (2.8)$$

em que

$$d(\lambda, \mu) = \sin(\lambda - \mu), \quad (2.9)$$

e Z é a matriz cujas entradas são dadas por

$$Z_{jk} = \varphi(\lambda_j, \mu_k), \quad j, k = 1, \dots, N, \quad \varphi(\lambda, \mu) = \frac{c}{a(\lambda, \mu)b(\lambda, \mu)}, \quad (2.10)$$

satisfaz aos Lemas 2.1.1–2.1.4.

2.2 Limite homogêneo de Z_N

Nesta Seção, tomaremos o limite homogêneo de Z_N (2.8), passo necessário para obter o limite assintótico da função de partição conforme $N \rightarrow \infty$, bem como para o estudo da separação de fases no modelo. Isto significa tomar os limites $\lambda_1, \dots, \lambda_N \rightarrow \lambda$, $\mu_1, \dots, \mu_N \rightarrow \mu$. Uma vez que a dependência em λ_j e μ_k sempre aparece como a diferença destes parâmetros no caso da fronteira parede de domínio, faremos $\mu = 0$.

Primeiro, vamos tomar o limite homogêneo de $\det Z$. Explicitamente, este determinante é escrito como

$$\det Z = \begin{vmatrix} \varphi(\lambda_1, \mu_1) & \varphi(\lambda_1, \mu_2) & \dots & \varphi(\lambda_1, \mu_N) \\ \varphi(\lambda_2, \mu_1) & \varphi(\lambda_2, \mu_2) & \dots & \varphi(\lambda_2, \mu_N) \\ & & \vdots & \\ \varphi(\lambda_N, \mu_1) & \varphi(\lambda_N, \mu_2) & \dots & \varphi(\lambda_N, \mu_N) \end{vmatrix}. \quad (2.11)$$

Sejam

$$\lambda_j = \lambda + \xi_j, \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.12)$$

Queremos que $\xi_1 = \dots = \xi_N = 0$. Evidentemente, não é possível fazê-lo diretamente em (2.11), dado que o determinante automaticamente se anularia já com duas linhas idênticas. Então, comecemos por fazer somente $\xi_1 = 0$ e vamos expandir $\varphi(\lambda + \xi_2, \mu_k)$ em série em torno de $\xi_2 = 0$. Assim,

$$\varphi(\lambda + \xi_2, \mu_k) = \varphi(\lambda, \mu_k) + \left. \frac{\partial}{\partial \lambda} \varphi(\lambda + \xi_2, \mu_k) \right|_{\xi_2=0} \xi_2 + O(\xi_2^2). \quad (2.13)$$

Uma vez que a combinação linear de linhas (ou colunas) do determinante não altera seu valor, trocaremos a segunda linha de (2.11) pela subtração da segunda pela primeira.

Usando (2.13) e desprezando termos de ordem igual ou superior a ξ_2^2 , as duas primeiras linhas do determinante se tornam

$$\xi_2 \begin{vmatrix} \varphi(\lambda, \mu_1) & \varphi(\lambda, \mu_2) & \dots & \varphi(\lambda, \mu_N) \\ \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_1) & \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_2) & \dots & \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_N) \end{vmatrix}, \quad (2.14)$$

com a notação $\partial_\lambda \equiv \partial/\partial\lambda$. Para repetir o raciocínio para a linha seguinte, precisamos expandir $\varphi(\lambda + \xi_3, \mu_k)$ até terceira ordem,

$$\varphi(\lambda + \xi_3, \mu_k) = \varphi(\lambda, \mu_k) + \frac{\partial}{\partial\lambda} \varphi(\lambda + \xi_3, \mu_k) \Big|_{\xi_3=0} \xi_3 + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial\lambda^2} \varphi(\lambda + \xi_3, \mu_k) \Big|_{\xi_3=0} \xi_3^2 + O(\xi_3^3), \quad (2.15)$$

e trocar a terceira linha pela sua subtração pela primeira mais metade da segunda. Com isto, as três primeiras linhas ficam

$$\xi_2 \frac{\xi_3}{2!} \begin{vmatrix} \varphi(\lambda, \mu_1) & \varphi(\lambda, \mu_2) & \dots & \varphi(\lambda, \mu_N) \\ \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_1) & \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_2) & \dots & \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_N) \\ \partial_\lambda^2 \varphi(\lambda, \mu_1) & \partial_\lambda^2 \varphi(\lambda, \mu_2) & \dots & \partial_\lambda^2 \varphi(\lambda, \mu_N) \end{vmatrix}. \quad (2.16)$$

Ao final de todos os limites $\xi_1 \rightarrow 0, \dots, \xi_N \rightarrow 0$, (2.11) se torna

$$\prod_{j=1}^{N-1} \frac{\xi_j^j}{j!} \begin{vmatrix} \varphi(\lambda, \mu_1) & \varphi(\lambda, \mu_2) & \dots & \varphi(\lambda, \mu_N) \\ \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_1) & \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_2) & \dots & \partial_\lambda \varphi(\lambda, \mu_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_\lambda^{N-1} \varphi(\lambda, \mu_1) & \partial_\lambda^{N-1} \varphi(\lambda, \mu_2) & \dots & \partial_\lambda^{N-1} \varphi(\lambda, \mu_N) \end{vmatrix}. \quad (2.17)$$

Antes de tomar os limites $\mu_1, \dots, \mu_N \rightarrow 0$, note que $\varphi(\lambda, \mu_k) \equiv \varphi(\lambda - \mu_k)$. Assim, seguindo o mesmo raciocínio, mas operando sobre as colunas do determinante, obtemos

$$(-1)^{N(N-1)/2} \prod_{j=1}^{N-1} \frac{\xi_j^j}{j!} \prod_{k=1}^{N-1} \frac{\mu_{k+1}^k}{k!} \begin{vmatrix} \varphi & \partial_\lambda \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-1} \varphi \\ \partial_\lambda \varphi & \partial_\lambda^2 \varphi & \dots & \partial_\lambda^N \varphi \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_\lambda^{N-1} \varphi & \partial_\lambda^N \varphi & \dots & \partial_\lambda^{2(N-1)} \varphi \end{vmatrix}. \quad (2.18)$$

Por outro lado, para a expressão de fora do determinante em (2.8),

$$\frac{\prod_{j,k=1}^N a(\lambda_j, \mu_k) b(\lambda_j, \mu_k)}{\prod_{1 \leq i < j \leq N} d(\lambda_j, \lambda_i) \prod_{1 \leq k < l \leq N} d(\mu_k, \mu_l)} \sim (-1)^{N(N-1)/2} [a(\lambda) b(\lambda)]^{N^2} \prod_{j=1}^{N-1} \frac{j!}{\xi_{j+1}^j} \prod_{k=1}^{N-1} \frac{k!}{\mu_{k+1}^k}, \quad (2.19)$$

onde usamos $\sin(x) \sim x$ se $x \rightarrow 0$ para os produtos no denominador. Substituindo (2.18) e (2.19) em (2.8), obtemos [25]

$$Z_N(\lambda) = \frac{[a(\lambda) b(\lambda)]^{N^2}}{\left[\prod_{j=1}^{N-1} j! \right]^2} \det \bar{Z}, \quad \bar{Z}_{jk} = \partial_\lambda^{j+k-2} \varphi(\lambda), \quad j, k = 1, \dots, N. \quad (2.20)$$

com a notação $a(\lambda) \equiv a(\lambda, 0)$ (que será usada em todo o restante do texto).

2.3 Funções de correlação na fronteira

Nesta Seção, discutiremos duas funções de correlação que definem as probabilidades na fronteira para o modelo de seis vértices com condição de contorno do tipo parede de domínio, reproduzindo os resultados de [57]. A primeira delas, $H_N^{(r)}$, reflete o fato de que, para esta condição de contorno, há um (e somente um) vértice do tipo c na primeira coluna da rede². A probabilidade de que esteja posicionado na r -ésima linha é dada por

$$H_N^{(r)} = \frac{1}{Z_N} \langle \Downarrow | B(\lambda_N) \dots B(\lambda_{r+1}) q_1 B(\lambda_r) p_1 B(\lambda_{r-1}) \dots B(\lambda_1) | \Uparrow \rangle, \quad (2.21)$$

em que q_1, p_1 são projetores nos estados $|\Downarrow\rangle_1$ e $|\Uparrow\rangle_1$, respectivamente, dados por

$$q_1 = \frac{1}{2}(1 - \sigma_1^z), \quad p_1 = \frac{1}{2}(1 + \sigma_1^z), \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.22)$$

A segunda função, $G_N^{(r)}$, descreve a probabilidade de que entre as linhas r e $r + 1$, na primeira coluna, o estado de polarização seja para baixo:

$$G_N^{(r)} = \frac{1}{Z_N} \langle \Downarrow | B(\lambda_N) \dots B(\lambda_{r+1}) q_1 B(\lambda_r) B(\lambda_{r-1}) \dots B(\lambda_1) | \Uparrow \rangle. \quad (2.23)$$

Uma vez que $p_1 + q_1 = 1$, temos que $G_N^{(r)} = H_N^{(1)} + \dots + H_N^{(r)}$. Esta recorrência pode ser inferida da representação gráfica destas correlações, na Figura 11.

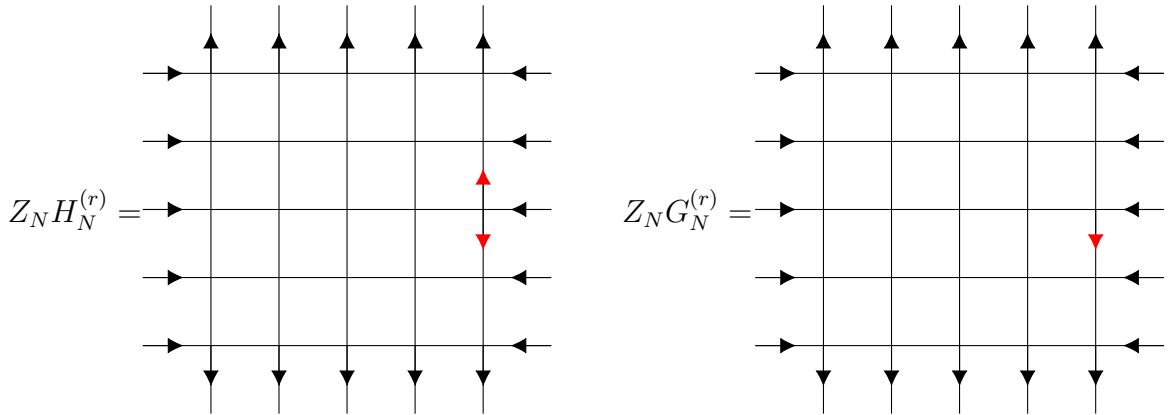


Figura 11 – Representação gráfica das correlações $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$ ($r = 3$, $N = 5$). As setas em vermelho indicam a posição dos projetores q_1 (spin-down) e p_1 (spin-up). Fonte: elaborada pela autora.

Vamos mostrar que as funções $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$ podem ser escritas em termos de uma soma envolvendo funções de partição de subredes de dimensões $(N - 1) \times (N - 1)$. Em particular, note que $G_N^{(N)} = 1$ (2.23), o que nos permite encontrar uma relação de

²Na realidade, para a condição de contorno DWBC há um único vértice c em cada uma das quatro fronteiras da rede.

recorrência entre Z_N e Z_{N-1} , resolvida pela fórmula de Izergin-Korepin (2.8). Para isto, começaremos por decompor a matriz de monodromia $\mathcal{T}_j(\lambda_j)$ no produto de dois termos,

$$\mathcal{T}(\lambda_j) = \mathcal{T}_{j2}(\lambda_j)\mathcal{T}_{j1}(\lambda_j), \quad (2.24)$$

em que

$$\mathcal{T}_{j1}(\lambda_j) = \mathcal{L}_{j1}(\lambda_j, \mu_1) = \begin{bmatrix} A_1 & B_1 \\ C_1 & D_1 \end{bmatrix}, \quad (2.25)$$

$$\mathcal{T}_{j2}(\lambda_j) = \mathcal{L}_{jN}(\lambda_j, \mu_N) \dots \mathcal{L}_{j2}(\lambda_j, \mu_2) = \begin{bmatrix} A_2 & B_2 \\ C_2 & D_2 \end{bmatrix}, \quad (2.26)$$

onde A_1, B_1, C_1 e D_1 dependem de λ_j e μ_1 , enquanto A_2, B_2, C_2 e D_2 dependem de $\lambda_j, \mu_2, \dots, \mu_N$. Note que as entradas de \mathcal{T}_{j1} e \mathcal{T}_{j2} comutam, uma vez que atuam em espaços vetoriais disjuntos. Em termos destes operadores,

$$B(\lambda_j) = A_2(\lambda_j)B_1(\lambda_j) + B_2(\lambda_j)D_1(\lambda_j), \quad (2.27)$$

que vem quando comparamos (2.24)–(2.26) com (1.12). Explicitamente, de (1.6),

$$B_1(\lambda_j, \mu_1) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{bmatrix} = c \sigma_1^-, \quad (2.28)$$

em que σ_1^- atua nos estados de base do espaço \mathcal{H}_1 , fazendo $\sigma_1^- |\uparrow\rangle_1 = |\downarrow\rangle_1$, $\sigma_1^- |\downarrow\rangle_1 = 0$. Note que $(\sigma_1^-)^l = 0$, $l > 1$.

Desejamos calcular o produto $B(\lambda_r) \dots B(\lambda_1) |\uparrow\rangle$. Veja que, usando (2.27), os únicos termos não nulos são os que levam no máximo um σ_1^- . Assim,

$$\begin{aligned} B(\lambda_r) \dots B(\lambda_1) |\uparrow\rangle &= \left\{ \sum_{i=1}^r \left[\prod_{j=1}^{i-1} B_2(\lambda_j) D_1(\lambda_j) \right] A_2(\lambda_i) B_1(\lambda_i) \left[\prod_{j=i+1}^r B_2(\lambda_j) D_1(\lambda_j) \right] \right\} |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + \\ &+ B_2(\lambda_r) \dots B_2(\lambda_1) D_1(\lambda_r) \dots D_1(\lambda_1) |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \\ &= (\star) |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + \left[\prod_{j=1}^{r-1} b(\lambda_j, \mu_1) \right] B_2(\lambda_r) \dots B_2(\lambda_1) |\uparrow\rangle, \end{aligned} \quad (2.29)$$

em que $|\uparrow\rangle_2 \equiv \otimes_{k=2}^N |\uparrow\rangle_k$ e o termo “ (\star) ” envolve apenas os operadores A_2, B_2 , que não atuam em $|\downarrow\rangle_1$, e D_1 , que preserva o estado, visto que $D_1(\lambda_r) |\uparrow\rangle_1 = b(\lambda_r, \mu_1) |\uparrow\rangle_1$. Analogamente,

$$\langle \downarrow | B(\lambda_N) \dots B(\lambda_{r+1}) = \langle \downarrow |_2 \langle \uparrow |_1 (\star) + \left[\prod_{j=r+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \right] \langle \downarrow | B_2(\lambda_N) \dots B_2(\lambda_{r+1}). \quad (2.30)$$

Substituindo (2.29) (com $r \rightarrow r-1$) e (2.30) em (2.21) e usando que $p_1 |\downarrow\rangle_1 = q_1 |\uparrow\rangle_1 = 0$, obtemos

$$H_N^{(r)} = \frac{1}{Z_N} \prod_{j=1}^{r-1} b(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \langle \downarrow | B_2(\lambda_N) \dots B_2(\lambda_{r+1}) q_1 B(\lambda_r) p_1 B_2(\lambda_{r-1}) \dots B_2(\lambda_1) |\uparrow\rangle. \quad (2.31)$$

De (2.27),

$$\begin{aligned} \langle \downarrow | {}_1 q_1 B(\lambda_r) p_1 | \uparrow \rangle_1 &= \langle \downarrow | {}_1 [A_2(\lambda_r) B_1(\lambda_r) + B_2(\lambda_r) D_1(\lambda_r)] | \uparrow \rangle_1 \\ &= c A_2(\lambda_r), \end{aligned} \quad (2.32)$$

e então,

$$H_N^{(r)} = \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^{r-1} b(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \langle \downarrow | {}_2 B_2(\lambda_N) \dots B_2(\lambda_{r+1}) A_2(\lambda_r) B_2(\lambda_{r-1}) \dots B_2(\lambda_1) | \uparrow \rangle_2. \quad (2.33)$$

A expressão (2.33) pode ser representada graficamente como na Figura 12.

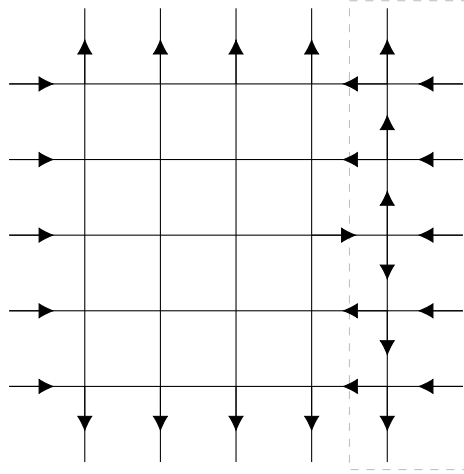


Figura 12 – Ilustração do numerador de (2.33): o produto interno corresponde a subrede à esquerda do retângulo pontilhado, cujas linhas correspondem às entradas da matriz de monodromia \mathcal{T}_{j_2} . Já os termos de fora do produto interno são os vértices englobados pelo retângulo. Fonte: elaborada pela autora.

Agora, usando as equações (1.21) e (1.22), obtemos

$$\begin{aligned} A_2(\lambda_r) \prod_{j=1}^{r-1} B_2(\lambda_j) | \uparrow \rangle_2 &= \alpha_2(\lambda_r) \prod_{j=1}^{r-1} f(\lambda_j, \lambda_r) \prod_{j=1}^{r-1} B_2(\lambda_j) | \uparrow \rangle_2 - \\ &\quad - \sum_{i=1}^{r-1} \alpha_2(\lambda_i) g(\lambda_i, \lambda_r) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{r-1} f(\lambda_j, \lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r B_2(\lambda_j) | \uparrow \rangle_2, \end{aligned} \quad (2.34)$$

em que

$$\alpha_2(\lambda) = \prod_{k=2}^N a(\lambda, \mu_k). \quad (2.35)$$

Das expressões para $f(\lambda, \mu)$ e $g(\lambda, \mu)$ em (1.11), vemos que

$$\frac{f(\lambda, \lambda)}{g(\lambda, \lambda)} = 1, \quad g(\lambda, \mu) = -g(\mu, \lambda), \quad (2.36)$$

e, com isto, podemos passar o primeiro termo de (2.34) para dentro da soma, obtendo

$$A_2(\lambda_r) \prod_{j=1}^{r-1} B_2(\lambda_j) |\uparrow\rangle_2 = \sum_{i=1}^r \alpha_2(\lambda_i) \frac{g(\lambda_r, \lambda_i)}{f(\lambda_r, \lambda_i)} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f(\lambda_j, \lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r B_2(\lambda_j) |\uparrow\rangle_2. \quad (2.37)$$

Substituindo em (2.33),

$$H_N^{(r)} = \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^{r-1} b(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \sum_{i=1}^r \alpha_2(\lambda_i) \frac{g(\lambda_r, \lambda_i)}{f(\lambda_r, \lambda_i)} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f(\lambda_j, \lambda_i) Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_1], \quad (2.38)$$

em que

$$Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_1] = \langle \downarrow | B_2(\lambda_N) \dots B_2(\lambda_{i+1}) B_2(\lambda_{i-1}) \dots B_2(\lambda_1) |\uparrow\rangle_2. \quad (2.39)$$

Para obter uma expressão similar para $G_N^{(r)}$, lembramos que esta função pode ser escrita como uma soma de $H_N^{(l)}$ e aplicamos isto diretamente à expressão (2.33). Segue que

$$\begin{aligned} G_N^{(r)} &= \sum_{l=1}^r H_N^{(l)} \\ &= \frac{c}{Z_N} \sum_{l=1}^r \prod_{j=1}^{l-1} b(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=l+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \langle \downarrow | B_2(\lambda_N) \dots B_2(\lambda_{l+1}) A_2(\lambda_l) B_2(\lambda_{l-1}) \dots B_2(\lambda_1) |\uparrow\rangle_2. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Tomemos o último termo desta soma, isto é, $l = r$. A sua contribuição é

$$\begin{aligned} &\prod_{j=1}^{r-1} b(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \langle \downarrow | B_2(\lambda_N) \dots B_2(\lambda_{r+1}) A_2(\lambda_r) B_2(\lambda_{r-1}) \dots B_2(\lambda_1) |\uparrow\rangle_2 = \\ &\prod_{j=1}^r b(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \left[\frac{\alpha_2(\lambda_r)}{b(\lambda_r, \mu_1)} \prod_{j=1}^{r-1} f(\lambda_j, \lambda_r) \langle \downarrow | B_2(\lambda_N) \dots B_2(\lambda_{r+1}) B_2(\lambda_{r-1}) \dots B_2(\lambda_1) |\uparrow\rangle_2 \right] \\ &+ (\diamond), \end{aligned} \quad (2.41)$$

em que “ (\diamond) ”, assim como o restante dos termos da soma em (2.40), levam o operador $B_2(\lambda_r)$ – o único termo de $G_N^{(r)}$ que não o contém é o que está escrito explicitamente em (2.41). Por outro lado, todos os termos restantes da soma devem dar contribuições similares a esta, apenas trocando $\lambda_r \leftrightarrow \lambda_j$, $j = 1, \dots, r-1$. De fato, isto é uma consequência direta da definição (2.23) pois, dado que os $B(\lambda_j)$ comutam, $G_N^{(r)}$ é simétrica nos parâmetros $\lambda_1, \dots, \lambda_r$. Portanto, $G_N^{(r)}$ pode ser escrita como

$$G_N^{(r)} = \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^r b(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \sum_{i=1}^r \frac{\alpha_2(\lambda_i)}{b(\lambda_i, \mu_1)} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f(\lambda_j, \lambda_i) Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_1]. \quad (2.42)$$

Fazendo $r = N$ na expressão acima, obtemos uma relação de recorrência para a função de partição ($G_N^{(N)} = 1$):

$$Z_N = c \prod_{j=1}^N b(\lambda_j, \mu_1) \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_2(\lambda_i)}{b(\lambda_i, \mu_1)} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f(\lambda_j, \lambda_i) Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_1], \quad (2.43)$$

que se reduz a (2.7) se $\lambda_1 = \mu_1 + \eta$.

Usando a fórmula (2.8), podemos colocar as funções de correlação introduzidas anteriormente em termos de determinantes [56, 57]. Para os cálculos subsequentes será conveniente escrever a razão $Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_1]/Z_N$, já que ela aparece nas expressões (2.38) e (2.42). Segue que

$$\frac{Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_1]}{Z_N} = \frac{(-1)^{i-1}}{a(\lambda_i, \mu_1)b(\lambda_i, \mu_1)} \prod_{j \neq i}^N \frac{d(\lambda_j, \lambda_i)}{a(\lambda_j, \mu_1)b(\lambda_j, \mu_1)} \prod_{k=2}^N \frac{d(\mu_1, \mu_k)}{a(\lambda_i, \mu_k)b(\lambda_i, \mu_k)} \frac{\det Z_{[i;1]}}{\det Z}, \quad (2.44)$$

em que $\det Z_{[i;j]}$ é o determinante da matriz obtida de Z após a exclusão da i -ésima linha e j -ésima coluna.

Substituindo (2.44) em (2.38) e cancelando os fatores em comum, obtemos

$$H_N^{(r)} = \frac{c}{\det Z} \frac{\prod_{k=2}^N d(\mu_1, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r}^N b(\lambda_j, \mu_1)} \sum_{i=1}^r (-1)^{i-1} \frac{\prod_{j=1}^{r-1} e(\lambda_j, \lambda_i) \prod_{j=r+1}^N d(\lambda_j, \lambda_i)}{\prod_{k=1}^N b(\lambda_i, \mu_k)} \det Z_{[i;1]}, \quad (2.45)$$

sendo

$$e(\lambda, \mu) = \sin(\lambda - \mu + 2\eta). \quad (2.46)$$

Defina

$$y_r(\lambda) = \frac{\prod_{j=1}^{r-1} e(\lambda_j, \lambda) \prod_{j=r+1}^N d(\lambda_j, \lambda)}{\prod_{k=2}^N b(\lambda, \mu_k)}, \quad r = 1, \dots, N. \quad (2.47)$$

Note que $y_r(\lambda_i) = 0$ se $i = r + 1, \dots, N$ em razão do produto de $d(\lambda_j, \lambda_i) = \sin(\lambda_j - \lambda_i)$. Então, a soma em (2.45) pode ser estendida de r a N . Perceba que, embora $y_r(\lambda)$ dependa dos parâmetros $\lambda_1, \dots, \lambda_N, \mu_2, \dots, \mu_N$, estes podem ser tratados como constantes, sendo λ a única variável que muda em y_r ao passarmos de um termo para outro na soma (2.45). Com isto, podemos transformar esta soma em um determinante de uma matriz $N \times N$, \mathbf{H} , cujas entradas são

$$\mathbf{H}_{jk} = \begin{cases} y_r(\lambda_j), & k = 1, \\ \varphi(\lambda_j, \mu_k), & k \neq 1. \end{cases} \quad (2.48)$$

Assim,

$$H_N^{(r)} = \frac{c \prod_{k=2}^N d(\mu_1, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r}^N b(\lambda_j, \mu_1)} \frac{\det \mathbf{H}}{\det Z}. \quad (2.49)$$

Analogamente, substituindo (2.44) em (2.42), $G_N^{(r)}$ admite a seguinte expressão

$$G_N^{(r)} = \frac{\prod_{k=2}^N d(\mu_1, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_1)} \frac{\det \mathbf{G}}{\det Z}, \quad (2.50)$$

com as entradas da matriz \mathbf{G} dadas por

$$\mathbf{G}_{jk} = \begin{cases} x_r(\lambda), & k = 1, \\ \varphi(\lambda_j, \mu_k), & k \neq 1, \end{cases} \quad x_r(\lambda) = \frac{\prod_{i=1}^r e(\lambda_i, \lambda) \prod_{i=r+1}^N d(\lambda_i, \lambda)}{\prod_{k=1}^N b(\lambda, \mu_k)}, \quad (2.51)$$

onde, novamente, interpretamos λ como a única variável de $x_r(\lambda)$.

Como veremos nos próximos capítulos, ambas correlações introduzidas nesta Seção têm utilidade no estudo das curvas árticas do modelo [45]. De fato, enquanto $G_N^{(r)}$ pode ser usada para localizar os pontos de contato entre a curva e as fronteiras da rede devido ao seu comportamento degrau no limite termodinâmico, $H_N^{(r)}$ terá um papel fundamental na obtenção explícita das equações paramétricas da curva ártica e dos pontos de contato via sua função geradora, $h_N(z)$, que estudaremos posteriormente.

2.4 A probabilidade de formação de domínio ferroelétrico

Outra função de correlação usada no estudo da separação de fases no modelo de seis vértices com condição de contorno do tipo parede de domínio é a probabilidade de formação de domínio ferroelétrico (ou EFP, como já mencionamos). Ela é definida como a probabilidade de que os estados das arestas verticais entre as linhas r e $r + 1$, nas s primeiras colunas, sejam $|\downarrow\rangle$:

$$F_N^{(r,s)} = \frac{1}{Z_N} \langle \downarrow | B(\lambda_N) \dots B(\lambda_{r+1}) q_1 q_2 \dots q_s B(\lambda_r) B(\lambda_{r-1}) \dots B(\lambda_1) | \uparrow \rangle. \quad (2.52)$$

Note que $F_N^{(r,1)} = G_N^{(r)}$. Em virtude da regra do gelo, $F_N^{(r,s)}$ nos dá a probabilidade de que o canto inferior direito, de dimensões $(N - r) \times s$, apresente ordenamento ferroelétrico, com todos os vértices do tipo w_2 . Veja a Figura 13.

Usando a decomposição (2.24) para a matriz de monodromia, assim como foi feito para as correlações tratadas na Seção 2.3, obtemos uma relação de recorrência entre $F_N^{(r,s)}$ e $F_{N-1}^{(r-1,s-1)}$. Uma vez que $G_N^{(r)}$ e $F_N^{(r,s)}$ diferem pelo número de projetores q_i entre os operadores $B(\lambda_r)$ e $B(\lambda_{r+1})$, é fácil de ver que após calcularmos o produto interno no espaço \mathcal{V}_1 , o resultado obtido deve ser análogo a soma (2.41), porém, com o produto $q_2 \dots q_s$ à direita de $B(\lambda_{r+1})$. Assim, os mesmos argumentos de simetria se aplicam aqui, e portanto

$$F_N^{(r,s)} = \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^r b(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N a(\lambda_j, \mu_1) \sum_{i=1}^r \frac{\alpha_2(\lambda_i)}{b(\lambda_i, \mu_1)} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f(\lambda_j, \lambda_i) Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_1] F_N^{(r-1,s-1)}[\lambda_i, \mu_1]. \quad (2.53)$$

Para obter uma representação para $F_N^{(r,s)}$ em termos de um determinante, vamos calculá-la diretamente para $s = 1, 2, 3$ e, assim, motivar uma expressão para s qualquer.

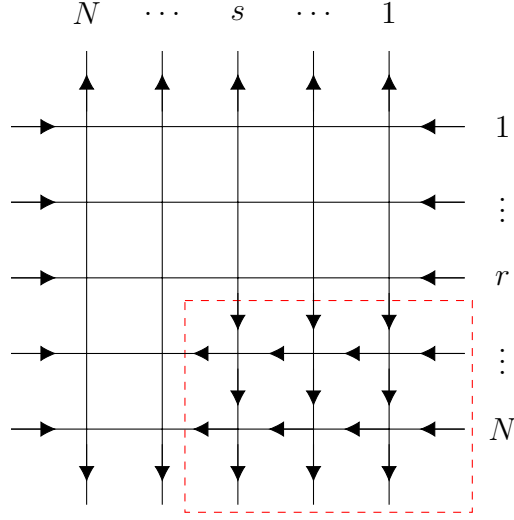


Figura 13 – Probabilidade de formação de domínio ferroelétrico (EFP). Fonte: elaborada pela autora.

Como apontado anteriormente, $F_N^{(r,1)} = G_N^{(r)}$. Usando a expressão (2.50) e desenvolvendo $\det G$ pela sua primeira coluna, temos

$$F_N^{(r,1)} = \frac{1}{\det Z \prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_1) \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_1)} \sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} x_r(\lambda_i) \det Z_{[i;1]}, \quad (2.54)$$

que é a própria expressão (2.42). Com isto, podemos calcular $F_N^{(r,2)}$, pois basta substituir (2.54) na fórmula de recorrência (2.53), adaptando para $r \rightarrow r - 1$, $N \rightarrow N - 1$ devido à exclusão da primeira linha e a primeira coluna da rede. Fora da soma,

$$\begin{aligned} \det Z &\rightarrow \det Z_{[i;1]}, & \prod_{k=2}^N d(\mu_1, \mu_k) &\rightarrow \prod_{k=3}^N d(\mu_2, \mu_k), \\ \prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_1) &\rightarrow \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r a(\lambda_i, \mu_2), & \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_1) &\rightarrow \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_2). \end{aligned} \quad (2.55)$$

Vamos indexar a soma por j . Esta soma deve ser o determinante de uma matriz $(N - 1) \times (N - 1)$, que é $Z_{[i;1]}$ com a sua primeira coluna trocada por um vetor de entradas $\tilde{x}_r(\lambda_j)$, independentes de λ_i e μ_1 . Note que estas funções podem ser obtidas de $x_r(\lambda_j)$ se a multiplicarmos e dividirmos pelos fatores que levam estes parâmetros. Além disto, as funções $\tilde{x}_r(\lambda_j)$ também devem ter um fator $(-1)^{\theta(j,i)}$,

$$\theta(j, i) = \begin{cases} 1, & i < j, \\ 0, & i > j, \end{cases} \quad (2.56)$$

para que, em conjunto com $(-1)^{j-1}$ que já está na soma, tenhamos a alternância de sinais correta do determinante. Reunindo estas informações,

$$\sum_{i=1}^N (-1)^{i-1} x_r(\lambda_i) \det Z_{[i;1]} \rightarrow \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (-1)^{j-1+\theta(j,i)} \frac{b(\lambda_j, \mu_1)}{e(\lambda_i, \lambda_j)} x_r(\lambda_j) \det Z_{[i,j;1,2]}. \quad (2.57)$$

Substituindo (2.55) e (2.57) em (2.54), e esta, por sua vez, em (2.53),

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,2)} &= \frac{1}{\det Z} \frac{\prod_{k=2}^N d(\mu_1, \mu_k) \prod_{k=3}^N d(\mu_2, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_1) a(\lambda_j, \mu_2) \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_1) b(\lambda_j, \mu_2)} \times \\
 &\times \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (-1)^{i+j+\theta(j,i)} \frac{a(\lambda_i, \mu_2) b(\lambda_j, \mu_1)}{e(\lambda_i, \lambda_j)} x_r(\lambda_i) x_r(\lambda_j) \det Z_{[i,j;1,2]}. \quad (2.58)
 \end{aligned}$$

Repetindo o raciocínio acima para obter $F_{N-1}^{(r-1,2)}$ a partir de $F_N^{(r,2)}$, temos que

$$\begin{aligned}
 F_{N-1}^{(r-1,2)}[\lambda_i; \mu_1] &= \frac{1}{\det Z_{[i;1]}} \frac{\prod_{k=3}^N d(\mu_2, \mu_k) \prod_{k=4}^N d(\mu_3, \mu_k)}{\prod_{j \neq i}^r a(\lambda_j, \mu_2) a(\lambda_j, \mu_3) \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_2) b(\lambda_j, \mu_3)} \times \\
 &\times \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq i,j}}^N (-1)^{j+m+\theta(j,i)+\theta(m,j)+\theta(m,i)} \frac{a(\lambda_j, \mu_3) b(\lambda_m, \mu_2)}{e(\lambda_j, \lambda_m)} \frac{b(\lambda_j, \mu_1) b(\lambda_m, \mu_1)}{e(\lambda_i, \lambda_j) e(\lambda_i, \lambda_m)} \times \\
 &\times x_r(\lambda_j) x_r(\lambda_m) \det Z_{[i,j,k;1,2,3]}, \quad (2.59)
 \end{aligned}$$

e assim,

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,3)} &= \frac{1}{\det Z} \prod_{l=1}^3 \left[\frac{\prod_{k=l+1}^N d(\mu_l, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_l) \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_l)} \right] \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq i,j}}^N (-1)^{i+j+m-1+\theta(j,i)+\theta(m,j)+\theta(m,i)} \times \\
 &\times \frac{a(\lambda_i, \mu_2) a(\lambda_i, \mu_3) a(\lambda_j, \mu_3) b(\lambda_j, \mu_1) b(\lambda_m, \mu_1) b(\lambda_m, \mu_2)}{e(\lambda_j, \lambda_m) e(\lambda_i, \lambda_j) e(\lambda_i, \lambda_m)} x_r(\lambda_i) x_r(\lambda_j) x_r(\lambda_m) \det Z_{[i,j,k;1,2,3]}. \quad (2.60)
 \end{aligned}$$

Dos resultados acima, inferimos que, para s genérico,

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,s)} &= \frac{1}{\det Z} \prod_{l=1}^s \left[\frac{\prod_{k=l+1}^N d(\mu_l, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_l) \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_l)} \right] \times \\
 &\times \sum_{j_1=1}^N \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^N \dots \sum_{\substack{j_s=1 \\ j_s \neq j_q < s}}^N (-1)^{\sum_{i=1}^s (j_i - 1) + \sum_{1 \leq m < n \leq s} \theta(j_n, j_m)} \prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{a(\lambda_{j_m}, \mu_n) b(\lambda_{j_n}, \mu_m)}{e(\lambda_{j_m}, \lambda_{j_n})} \times \\
 &\times \prod_{m=1}^s x_r(\lambda_m) \det Z_{[j_1, \dots, j_s; 1, \dots, s]}. \quad (2.61)
 \end{aligned}$$

Pode-se verificar que (2.61) satisfaz à relação de recorrência (2.53).

A soma múltipla (2.61) pode ser transformada em um determinante. Primeiro, considere a identidade

$$\exp(\xi \partial_\epsilon) v(\lambda + \epsilon) \Big|_{\epsilon=0} = v(\lambda + \xi), \quad (2.62)$$

em que $v(\lambda + \xi)$ é uma função analítica qualquer, e λ e ϵ são variáveis independentes. Isto pode ser visto expandindo a função $\exp(\xi \partial_\epsilon)$ em série, atuando em $v(\lambda + \epsilon)$ e, depois, tomando o limite $\epsilon \rightarrow 0$. O resultado é justamente a série de Taylor de $v(\lambda + \xi)$.

Aplicando (2.12), usando propriedades de determinantes e generalizando (2.62) para o caso de múltiplas variáveis, com

$$v(\lambda + \xi_1, \dots, \lambda + \xi_s) = \prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{a(\lambda + \xi_{j_m}, \mu_n) b(\lambda + \xi_{j_n}, \mu_m)}{e(\lambda + \xi_{j_m}, \lambda + \xi_{j_n})} \prod_{m=1}^s x_r(\lambda + \xi_m), \quad (2.63)$$

$F_N^{(r,s)}$ pode ser reescrita como

$$F_N^{(r,s)} = \frac{1}{\det Z} \prod_{l=1}^s \left[\frac{\prod_{k=l+1}^N d(\mu_l, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_l) \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_l)} \right] \times \\ \times \det F(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) \left[\prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{a(\lambda + \epsilon_m, \mu_n) b(\lambda + \epsilon_n, \mu_m)}{e(\lambda + \epsilon_m, \lambda + \epsilon_n)} \prod_{m=1}^s x_r(\lambda + \epsilon_m) \right]_{\epsilon_1 = \dots = \epsilon_s = 0}, \quad (2.64)$$

em que $\det F(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s})$ é o operador diferencial

$$\det F(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) = \begin{vmatrix} \exp(\xi_1 \partial_{\epsilon_1}) & \dots & \exp(\xi_1 \partial_{\epsilon_s}) & \varphi(\lambda + \xi_1, \mu_{s+1}) & \dots & \varphi(\lambda + \xi_1, \mu_N) \\ \exp(\xi_2 \partial_{\epsilon_1}) & \dots & \exp(\xi_2 \partial_{\epsilon_s}) & \varphi(\lambda + \xi_2, \mu_{s+1}) & \dots & \varphi(\lambda + \xi_2, \mu_N) \\ & & \vdots & & & \vdots \\ \exp(\xi_N \partial_{\epsilon_1}) & \dots & \exp(\xi_N \partial_{\epsilon_s}) & \varphi(\lambda + \xi_N, \mu_{s+1}) & \dots & \varphi(\lambda + \xi_N, \mu_N) \end{vmatrix}. \quad (2.65)$$

2.4.1 Limite homogêneo das correlações

Agora, vamos obter $F_N^{(r,s)}$ no limite homogêneo $\lambda_1, \dots, \lambda_N \rightarrow \lambda$, $\mu_1, \dots, \mu_N \rightarrow 0$. Uma vez que as funções $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$ podem ser obtidas da EFP, obteremos o limite homogêneo das suas expressões como casos especiais de $F_N^{(r,s)}$.

O tratamento de $\det F(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s})$ é análogo ao que fizemos para $\det Z$ na Seção 2.2. Segue que

$$\det F \sim (-1)^{(N-s)(N-s-1)/2} \prod_{j=1}^{N-1} \frac{\xi_{j+1}^j}{j!} \prod_{k=1}^{N-s-1} \frac{\mu_{k+s+1}^k}{k!} \begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 & \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-s-1} \varphi \\ \partial_{\epsilon_1} & \dots & \partial_{\epsilon_s} & \partial_\lambda \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-s} \varphi \\ & & \vdots & & & \vdots \\ \partial_{\epsilon_1}^{N-1} & \dots & \partial_{\epsilon_s}^{N-1} & \partial_\lambda^{N-s} \varphi & \dots & \partial_\lambda^{2N-s-2} \varphi \end{vmatrix}. \quad (2.66)$$

Já o limite dos fatores a direita e a esquerda do determinante $\det F(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s})$ são diretamente obtidos. Usando (1.4), (2.9) e (2.46),

$$\prod_{l=1}^s \left[\frac{\prod_{k=l+1}^N d(\mu_l, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a(\lambda_j, \mu_l) \prod_{j=r+1}^N b(\lambda_j, \mu_l)} \right] \sim \frac{(-1)^{s(2N-s-1)/2}}{[a(\lambda)]^{rs} [b(\lambda)]^{(N-r)s}} \prod_{k=1}^{s-1} \mu_{k+1}^k \prod_{k=s+1}^N \mu_k^s, \quad (2.67)$$

$$\prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{a(\lambda + \epsilon_m, \mu_n) b(\lambda + \epsilon_n, \mu_m)}{e(\lambda + \epsilon_m, \lambda + \epsilon_n)} \sim \prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{a(\lambda + \epsilon_m) b(\lambda + \epsilon_n)}{e(\lambda + \epsilon_m, \lambda + \epsilon_n)}. \quad (2.68)$$

Juntando (2.66)–(2.68), mais (2.18) e substituindo em (2.64), temos que a EFP no limite homogêneo é dada por [56]

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,s)} &= \frac{1}{\det \bar{Z}} \frac{\prod_{k=1}^s (N-k)!}{[a(\lambda)]^{rs} [b(\lambda)]^{(N-r)s}} \begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 & \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-s-1} \varphi \\ \partial_{\epsilon_1} & \dots & \partial_{\epsilon_s} & \partial_\lambda \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-s} \varphi \\ \vdots & & & & & \vdots \\ \partial_{\epsilon_1}^{N-1} & \dots & \partial_{\epsilon_s}^{N-1} & \partial_\lambda^{N-1} \varphi & \dots & \partial_\lambda^{2N-s-2} \varphi \end{vmatrix} \times \\
 &\times \prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{a(\lambda + \epsilon_m) b(\lambda + \epsilon_n)}{e(\lambda + \epsilon_m, \lambda + \epsilon_n)} \prod_{m=1}^s x_r(\lambda + \epsilon_m) \Big|_{\epsilon_1 = \dots = \epsilon_s = 0}. \quad (2.69)
 \end{aligned}$$

Tomando $s = 1$ em (2.69), obtemos facilmente uma expressão para $G_N^{(r)}$, que se escreve

$$F_N^{(r,1)} = G_N^{(r)} = \frac{1}{\det \bar{Z}} \frac{(N-1)!}{[a(\lambda)]^r [b(\lambda)]^{N-r}} \begin{vmatrix} 1 & \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-2} \varphi \\ \partial_\epsilon & \partial_\lambda \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-1} \varphi \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \partial_\epsilon^{N-1} & \partial_\lambda^{N-1} \varphi & \dots & \partial_\lambda^{2N-3} \varphi \end{vmatrix} x_r(\lambda + \epsilon) \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.70)$$

Por outro lado, $H_N^{(r)} = G_N^{(r)} - G_N^{(r-1)} = F_N^{(r,1)} - F_N^{(r-1,1)}$. De (2.70),

$$\begin{aligned}
 H_N^{(r)} &= \frac{1}{\det \bar{Z}} \frac{(N-1)!}{[a(\lambda)]^r [b(\lambda)]^{N-r}} \begin{vmatrix} 1 & \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-2} \varphi \\ \partial_\epsilon & \partial_\lambda \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-1} \varphi \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \partial_\epsilon^{N-1} & \partial_\lambda^{N-1} \varphi & \dots & \partial_\lambda^{2N-3} \varphi \end{vmatrix} \left(x_r(\lambda + \epsilon) - \frac{a(\lambda)}{b(\lambda)} x_{r-1}(\lambda + \epsilon) \right) \Big|_{\epsilon=0} \\
 &= \frac{c}{\det \bar{Z}} \frac{(N-1)!}{[a(\lambda)]^r [b(\lambda)]^{N-r+1}} \begin{vmatrix} 1 & \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-2} \varphi \\ \partial_\epsilon & \partial_\lambda \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-1} \varphi \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \partial_\epsilon^{N-1} & \partial_\lambda^{N-1} \varphi & \dots & \partial_\lambda^{2N-3} \varphi \end{vmatrix} y_r(\lambda + \epsilon) \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.71)
 \end{aligned}$$

$F_N^{(r,s)}$ está escrita em termos de um determinante de uma matriz $N \times N$. Usando alguns aspectos da teoria geral de polinômios ortogonais, expostos no Apêndice A, veremos que este determinante pode ser reduzido para o de uma matriz $s \times s$ [56]. Para começar, vamos reescrever (2.69), permutando as colunas do determinante e usando (1.4), (2.46), de modo que

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,s)} &= \frac{(-1)^s}{\det \bar{Z}} \frac{\prod_{k=1}^s (N-k)!}{[a(\lambda)]^{rs} [b(\lambda)]^{(N-r)s}} \det \bar{F}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) \times \\
 &\prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{\sin(\lambda + \epsilon_m + \eta) \sin(\lambda + \epsilon_n - \eta)}{\sin(\epsilon_m - \epsilon_n + 2\eta)} \prod_{m=1}^s \frac{[\sin(\epsilon_m)]^{N-r} [\sin(\epsilon_m - 2\eta)]^r}{[\sin(\lambda + \epsilon_m - \eta)]^N} \Big|_{\epsilon_1 = \dots = \epsilon_s = 0}, \quad (2.72)
 \end{aligned}$$

sendo

$$\det \bar{F}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) = \begin{vmatrix} \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-s-1} \varphi & 1 & \dots & 1 \\ \partial_\lambda \varphi & \dots & \partial_\lambda^{N-s} \varphi & \partial_{\epsilon_1} & \dots & \partial_{\epsilon_s} \\ & & \vdots & & & \vdots \\ \partial_\lambda^{N-s} \varphi & \dots & \partial_\lambda^{2N-s-2} \varphi & \partial_{\epsilon_1}^{N-1} & \dots & \partial_{\epsilon_s}^{N-1} \end{vmatrix}. \quad (2.73)$$

Agora, considere as funções

$$\omega_\pm(\epsilon) = \frac{\sin(\lambda \pm \eta)}{\sin(\lambda \mp \eta)} \frac{\sin \epsilon}{\sin(\epsilon \mp 2\eta)}, \quad \rho_\pm(\epsilon) = \frac{\sin(\lambda \mp \eta)}{\sin(2\eta)} \frac{\sin(\epsilon \mp 2\eta)}{\sin(\lambda + \epsilon \mp \eta)}. \quad (2.74)$$

Usando identidades trigonométricas, podemos mostrar que estas funções estão relacionadas entre si, satisfazendo

$$\rho_\pm(\epsilon) = \pm \frac{1}{\omega_\pm(\epsilon) - 1}, \quad (2.75)$$

e, além disso,

$$\frac{\sin(\lambda + \epsilon_1 + \eta) \sin(\lambda + \epsilon_2 - \eta)}{\sin(\epsilon_1 - \epsilon_2 + 2\eta)} = \frac{1}{\varphi(\lambda) \rho_-(\epsilon_1) \rho_+(\epsilon_2)} \frac{1}{\omega_-(\epsilon_1) \omega_+(\epsilon_2) - 1}, \quad (2.76)$$

$$[a(\lambda)]^2 \omega_-(\epsilon) + [b(\lambda)]^2 \omega_+(\epsilon) = 2a(\lambda)b(\lambda) \Delta \omega_-(\epsilon) \omega_+(\epsilon). \quad (2.77)$$

Assim,

$$F_N^{(r,s)} = \frac{(-1)^s}{\det \bar{Z}} \prod_{j=1}^s (N-j)! [\varphi(\lambda)]^{N-j+1} \det \bar{F}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) \times \\ \times \prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{1}{\rho_-(\epsilon_m) \rho_+(\epsilon_n) [\omega_-(\epsilon_m) \omega_+(\epsilon_n) - 1]} \prod_{m=1}^s \frac{[\omega_+(\epsilon_m)]^{N-r}}{[\omega_+(\epsilon_m) - 1]^N} \Big|_{\epsilon_1 = \dots = \epsilon_s = 0}. \quad (2.78)$$

Para reescrevermos os determinantes que aparecem em (2.78) em termos de polinômios ortogonais $P_n(x)$, precisamos encontrar a função peso $w(x)$ para a qual a relação de ortogonalidade (A.1) é satisfeita. Impondo

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} x^n w(x) dx = \partial_\lambda^n \varphi(\lambda), \quad (2.79)$$

de maneira que (Eqs. (A.3) e (A.5))

$$\det \bar{Z} = I_0 I_1 \dots I_{N-1}, \quad (2.80)$$

$$\det \bar{F}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) = I_0 I_1 \dots I_{N-s-1} \begin{vmatrix} P_{N-s}(\partial_{\epsilon_s}) & \dots & P_{N-s}(\partial_{\epsilon_s}) \\ & & \vdots \\ P_{N-1}(\partial_{\epsilon_1}) & \dots & P_{N-1}(\partial_{\epsilon_1}) \end{vmatrix}, \quad (2.81)$$

a função peso adequada deve ser

$$w(x) = e^{x\lambda} \Phi(x), \quad \Phi(x) = e^{-\pi x/2} \frac{\sinh(\eta x)}{\sinh(\pi x/2)}. \quad (2.82)$$

Substituindo (2.81) em (2.78),

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,s)} &= (-1)^s \left| \begin{array}{ccc} K_{N-s}(\partial_{\epsilon_s}) & \cdots & K_{N-s}(\partial_{\epsilon_s}) \\ & & \vdots \\ K_{N-1}(\partial_{\epsilon_1}) & \cdots & K_{N-1}(\partial_{\epsilon_1}) \end{array} \right| \prod_{1 \leq m < n \leq s} \frac{1}{\rho_-(\epsilon_m)\rho_+(\epsilon_n)[\omega_-(\epsilon_m)\omega_+(\epsilon_n) - 1]} \times \\
 &\times \prod_{m=1}^s \frac{[\omega_+(\epsilon_m)]^{N-r}}{[\omega_+(\epsilon_m) - 1]^N} \Big|_{\epsilon_1 = \dots = \epsilon_s = 0}, \quad (2.83)
 \end{aligned}$$

em que

$$K_n(x) = \frac{n! [\varphi(\lambda)]^{n+1}}{I_n} P_n(x). \quad (2.84)$$

É fácil de ver que, nesta representação,

$$G_N^{(r)} = -K_{N-1}(\partial_\epsilon) \frac{[\omega_+(\epsilon)]^{N-r}}{[\omega_+(\epsilon) - 1]^N} \Big|_{\epsilon=0}, \quad H_N^{(r)} = K_{N-1}(\partial_\epsilon) \frac{[\omega_+(\epsilon)]^{N-r}}{[\omega_+(\epsilon) - 1]^{N-1}} \Big|_{\epsilon=0}. \quad (2.85)$$

A partir de (2.83), a EFP admite uma representação de integrais múltiplas, que é o ponto de partida para a determinação das curvas árticas no regime desordenado. Entretanto, para obter esta representação, é necessário introduzir uma função especial diretamente relacionada com as correlações que estudamos até aqui.

2.5 A função geradora $h_N(z)$

2.5.1 Representação integral das correlações

Outra quantidade importante relacionada às correlações estudadas previamente é a função geradora $h_N(z)$, definida formalmente como

$$h_N(z) = \sum_{r=1}^N H_N^{(r)} z^{r-1}, \quad z \in \mathbb{C}. \quad (2.86)$$

É possível inverter esta relação a fim de obter outra representação para $H_N^{(r)}$. De fato, usando a fórmula integral de Cauchy [63], segue que

$$H_N^{(r)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{h_N(z)}{z^r} dz, \quad (2.87)$$

em que C é um contorno orientado no sentido anti-horário que envolve apenas a vizinhança imediata da origem. Usando a relação entre $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$, podemos obter também uma representação integral para esta função, a saber

$$G_N^{(r)} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{h_N(z)}{(z-1)z^r} dz, \quad (2.88)$$

que é obtida de (2.87) aplicando-se o teorema dos resíduos [63], notando que o contorno C não engloba a singularidade em $z = 1$.

Entretanto, uma representação integral para $F_N^{(r,s)}$ não é obtida de forma tão direta como (2.87) e (2.88). De fato, para fazê-lo precisamos usar a identidade [56]

$$K_{N-1}(\partial_\epsilon)v(\omega_+(\epsilon))\Big|_{\epsilon=0} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{(z-1)^{N-1}}{z^N} h_N(z)v(z)dz, \quad (2.89)$$

em que $v(z)$ é uma função analítica em $z = 0$, e C é o mesmo contorno que em (2.87). Para aplicar (2.89) a (2.83), vamos passar os produtos a direita do determinante para dentro dele e atuar com os operadores diferenciais coluna a coluna. No final,

$$F_N^{(r,s)} = \left(-\frac{1}{2\pi i}\right)^s \oint_C \cdots \oint_C \begin{vmatrix} \frac{h_{N-s+1}(z_1)}{(z_1-1)^s z_1^{r-s+1}} & \cdots & \frac{h_{N-s+1}(z_s)}{(z_s-1)^s z_s^{r-s+1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{h_N(z_1)}{(z_1-1)z_1^r} & \cdots & \frac{h_N(z_s)}{(z_s-1)z_s^r} \end{vmatrix} \times \\ \times \prod_{1 \leq i < j \leq s} \frac{(\tilde{z}_i - 1)(z_j - 1)}{1 - \tilde{z}_i z_j} dz_1 \dots dz_s, \quad (2.90)$$

em que z_i e \tilde{z}_i se relacionam como ω_+ e ω_- , isto é, segundo a equação (2.77),

$$a^2 \tilde{z}_i + b^2 z_i = (a^2 + b^2 - c^2) z_i \tilde{z}_i = 2ab \Delta z_i \tilde{z}_i, \quad (2.91)$$

com a , b e c funções do parâmetro espectral λ . A (2.91) leva a

$$\tilde{z}_i = -\frac{t^2 z_i}{1 - 2t \Delta z_i}, \quad t = \frac{b(\lambda)}{a(\lambda)}. \quad (2.92)$$

Rearranjando as linhas do determinante, podemos reescrever (2.90) como

$$F_N^{(r,s)} = \left(-\frac{1}{2\pi i}\right)^s \oint_C \cdots \oint_C \begin{vmatrix} \frac{h_N(z_1)}{(z_1-1)z_1^r} & \cdots & \frac{h_N(z_s)}{(z_s-1)z_s^r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{h_{N-s+1}(z_1)}{(z_1-1)^s z_1^{r-s+1}} & \cdots & \frac{h_{N-s+1}(z_s)}{(z_s-1)^s z_s^{r-s+1}} \end{vmatrix} \times \\ \times \prod_{1 \leq i < j \leq s} \frac{(\tilde{z}_i - 1)(z_j - 1)}{\tilde{z}_i z_j - 1} dz_1 \dots dz_s. \quad (2.93)$$

Note que se $s = 1$, recuperamos (2.88) imediatamente.

Como o determinante é antissimétrico com respeito a troca $z_i \leftrightarrow z_j$ (que equivale a permutação de duas colunas), apenas a parte antissimétrica do produto na segunda linha de (2.93) contribui para as integrais. Esta é dada em termos da função de partição do modelo parcialmente heterogêneo ($\mu_1, \dots, \mu_s \rightarrow 0$) numa rede $s \times s$ [56, 64],

$$\text{Asym}_{z_1, \dots, z_s} \prod_{1 \leq i < j \leq s} \frac{(\tilde{z}_i - 1)(z_j - 1)}{\tilde{z}_i z_j - 1} = \frac{1}{s!} \prod_{1 \leq i < j \leq s} (z_j - z_i) \prod_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^s \frac{1}{b^2 z_i z_j - (a^2 + b^2 - c^2) z_i + a^2} \times \\ \times a^{s(s-1)} c^{s(s-2)} \prod_{j=1}^s \left[\frac{(z_j - 1)b(\lambda)}{cb(\lambda_j)} \right]^{s-1} Z_s(\lambda_1, \dots, \lambda_s), \quad (2.94)$$

lembrando que $\lambda_i = \lambda + \xi_i$, sendo que estes parâmetros se relacionam implicitamente com z_i segundo

$$z_i = \omega_+(\xi_i), \quad \tilde{z}_i = \omega_-(\xi_i). \quad (2.95)$$

É possível escrever a função de partição $Z_s(\lambda_1, \dots, \lambda_s)$ como um determinante cujas entradas são dadas em termos da função geradora (2.86). Para chegarmos a isto, vamos começar mostrando que, para uma rede $N \times N$ com N parâmetros heterogêneos ($\mu_1, \dots, \mu_N \rightarrow 0$), é válido o resultado

$$\tilde{Z}_N(\lambda_1, \dots, \lambda_N) \equiv \frac{Z_N(\lambda_1, \dots, \lambda_N)}{Z_N(\lambda)} = \prod_{j=1}^N \left[\frac{a(\lambda_j)}{a(\lambda)} \right]^{N-1} h_{N,N}(u_1, \dots, u_N), \quad u_j = \tilde{\gamma}(\xi_j), \quad (2.96)$$

em que $Z_N(\lambda)$ é a função de partição do modelo totalmente homogêneo (2.20) e $h_{N,s}(u_1, \dots, u_s)$, $s = 1, \dots, N$, é definida como o determinante

$$h_{N,s}(u_1, \dots, u_s) = \prod_{1 \leq i < j \leq s} \frac{1}{u_j - u_i} \begin{vmatrix} u_1^{s-1} h_{N-s+1}(u_1) & \cdots & u_s^{s-1} h_{N-s+1}(u_s) \\ u_1^{s-2} (u_1 - 1) h_{N-s+2}(u_1) & \cdots & u_s^{s-2} (u_s - 1) h_{N-s+2}(u_s) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (u_1 - 1)^{s-1} h_N(u_1) & \cdots & (u_s - 1)^{s-1} h_N(u_s) \end{vmatrix}, \quad (2.97)$$

sendo $\tilde{\gamma}(\xi)$ a razão

$$\tilde{\gamma}(\xi) = \frac{a(\lambda)b(\lambda + \xi)}{b(\lambda)a(\lambda + \xi)}. \quad (2.98)$$

Tomando apenas os limites $\mu_1, \dots, \mu_N \rightarrow 0$ em $Z_N(\{\lambda_j\}, \{\mu_k\})$ (2.8), seguindo os métodos da Seção 2.2, e dividindo por $Z_N(\lambda)$, temos

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_N(\lambda_1, \dots, \lambda_N) &= \frac{1}{\det \bar{Z}} \frac{[\varphi(\lambda)]^{N^2} \prod_{j=1}^{N-1} j!}{\prod_{j=1}^N [\varphi(\lambda_j)]^N \prod_{1 \leq i < j \leq N} d(\lambda_j, \lambda_i)} \begin{vmatrix} \varphi(\lambda_1) & \partial_{\lambda_1} \varphi(\lambda_1) & \cdots & \partial_{\lambda_1}^{N-1} \varphi(\lambda_1) \\ \varphi(\lambda_2) & \partial_{\lambda_2} \varphi(\lambda_2) & \cdots & \partial_{\lambda_2}^{N-1} \varphi(\lambda_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi(\lambda_N) & \partial_{\lambda_N} \varphi(\lambda_N) & \cdots & \partial_{\lambda_N}^{N-1} \varphi(\lambda_N) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\det \bar{Z}} \frac{[\varphi(\lambda)]^{N^2} \prod_{j=1}^{N-1} j!}{\prod_{j=1}^N [\varphi(\lambda_j)]^N \prod_{1 \leq i < j \leq N} d(\lambda_j, \lambda_i)} \begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \partial_{\lambda_1} & \partial_{\lambda_2} & \cdots & \partial_{\lambda_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_{\lambda_1}^{N-1} & \partial_{\lambda_2}^{N-1} & \cdots & \partial_{\lambda_N}^{N-1} \end{vmatrix} \prod_{j=1}^N \varphi(\lambda_j), \end{aligned} \quad (2.99)$$

onde transposemos a matriz da primeira para a segunda linha de (2.99), e fatoramos $\varphi(\lambda_j)$, $j = 1, \dots, N$, que multiplicam cada coluna pela direita. Usando (A.3), (A.5) e (2.84),

$$\tilde{Z}_N(\lambda_1, \dots, \lambda_N) = \frac{[\varphi(\lambda)]^{N(N-1)/2}}{\prod_{j=1}^N [\varphi(\lambda_j)]^N \prod_{1 \leq i < j \leq N} d(\lambda_j, \lambda_i)} \begin{vmatrix} K_0(\partial_{\lambda_1}) & \cdots & K_0(\partial_{\lambda_N}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{N-1}(\partial_{\lambda_1}) & \cdots & K_{N-1}(\partial_{\lambda_N}) \end{vmatrix} \prod_{j=1}^N \varphi(\lambda_j). \quad (2.100)$$

Agora, das equações (1.4), (2.9), (2.10) e (2.98), temos que

$$u_j - u_i = \frac{a(\lambda)}{b(\lambda)} \left[\frac{b(\lambda_j)}{a(\lambda_j)} - \frac{b(\lambda_i)}{a(\lambda_i)} \right] = \frac{a(\lambda)}{b(\lambda)} \frac{\sin(2\eta) \sin(\lambda_j - \lambda_i)}{\sin(\lambda_i + \eta) \sin(\lambda_j + \eta)} = \frac{[a(\lambda)]^2}{a(\lambda_i) a(\lambda_j)} \varphi(\lambda) d(\lambda_j, \lambda_i), \quad (2.101)$$

e

$$u_j = \frac{\varphi(\lambda)}{\varphi(\lambda_j)} \left[\frac{a(\lambda)}{a(\lambda_j)} \right]^2. \quad (2.102)$$

Com isso,

$$\prod_{1 \leq i < j \leq N} d(\lambda_j, \lambda_i) = \frac{1}{[\varphi(\lambda)]^{N(N-1)/2}} \prod_{1 \leq i < j \leq N} (u_j - u_i) \prod_{j=1}^N \left[\frac{a(\lambda_j)}{a(\lambda)} \right]^{N-1}, \quad (2.103)$$

e portanto

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_N(\lambda_1, \dots, \lambda_N) &= \prod_{j=1}^N \left[\frac{a(\lambda_j)}{a(\lambda)} \right]^{N-1} \frac{u_j^{N-1}}{\varphi(\lambda_j)} \prod_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{u_j - u_i} \times \\ &\times \begin{vmatrix} K_0(\partial_{\lambda_1}) & \cdots & K_0(\partial_{\lambda_N}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{N-1}(\partial_{\lambda_1}) & \cdots & K_{N-1}(\partial_{\lambda_N}) \end{vmatrix} \prod_{j=1}^N \varphi(\lambda_j). \end{aligned} \quad (2.104)$$

Agora, considere o caso de uma heterogeneidade, tomando $\lambda_2, \dots, \lambda_N \rightarrow \lambda$ em $Z_N(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$. Aplicando novamente o procedimento da Seção 2.2, temos que

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_N(\lambda_1, \lambda) &= \frac{(-1)^{N-1} (N-1)!}{\det \bar{Z}} \frac{[\varphi(\lambda)]^N}{[d(\lambda, \lambda_1)]^{N-1}} \begin{vmatrix} \varphi(\lambda) & \cdots & \partial_\lambda^{N-2} \varphi(\lambda) & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \partial_\lambda^{N-1} \varphi(\lambda) & \cdots & \partial_\lambda^{2N-3} \varphi(\lambda) & \partial_{\lambda_1}^{N-1} \end{vmatrix} \varphi(\lambda_1) \\ &= \frac{K_{N-1}(\partial_{\lambda_1}) \varphi(\lambda_1)}{[d(\lambda_1, \lambda)]^{N-1} [\varphi(\lambda_1)]^N}, \end{aligned} \quad (2.105)$$

em que usamos (A.4) e (2.84).

Por outro lado, podemos relacionar diretamente a função de partição com uma heterogeneidade e a função geradora h_N . Havendo um vértice c na r -ésima linha da primeira coluna, todos os vértices acima são do tipo a e, abaixo, do tipo b , sendo $H_N^{(r)}$ a

probabilidade associada a esta configuração. Disto, segue que as correlações $H_N^{(r)}(\lambda_1, \lambda)$, do modelo parcialmente heterogêneo, e $H_N^{(r)}(\lambda)$, do modelo homogêneo, são relacionadas por

$$Z_N(\lambda_1, \lambda) H_N^{(r)}(\lambda_1, \lambda) = \left[\frac{a(\lambda_1)}{a(\lambda)} \right]^{N-r} \left[\frac{b(\lambda_1)}{b(\lambda)} \right]^{r-1} Z_N(\lambda) H_N^{(r)}(\lambda). \quad (2.106)$$

Uma vez que $\sum_{r=1}^N H_N^{(r)} = 1$, somando os dois lados da equação (2.106) de $r = 1$ a $r = N$, segue que

$$Z_N(\lambda_1, \lambda) = Z_N(\lambda) \left[\frac{a(\lambda_1)}{a(\lambda)} \right]^{N-1} \sum_{r=1}^N H_N^{(r)}(\lambda) [\tilde{\gamma}(\xi_1)]^{r-1}, \quad (2.107)$$

e assim, da definição (2.86),

$$\tilde{Z}_N(\lambda_1, \lambda) = \left[\frac{a(\lambda_1)}{a(\lambda)} \right]^{N-1} h_N[\tilde{\gamma}(\xi_1)]. \quad (2.108)$$

Aplicando (2.102) e comparando com (2.105), obtemos

$$\frac{1}{\varphi(\lambda_1)} K_{N-1}(\partial_{\lambda_1}) \varphi(\lambda_1) = \left(\frac{u_1 - 1}{u_1} \right)^{N-1} h_N(u_1), \quad (2.109)$$

o que nos permite escrever

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^N \frac{1}{\varphi(\lambda_j)} \left| \begin{array}{ccc} K_0(\partial_{\lambda_1}) & \cdots & K_0(\partial_{\lambda_N}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{N-1}(\partial_{\lambda_1}) & \cdots & K_{N-1}(\partial_{\lambda_N}) \end{array} \right| \prod_{j=1}^N \varphi(\lambda_j) = \\ = \left| \begin{array}{ccc} h_1(u_1) & \cdots & h_1(u_N) \\ \left(\frac{u_1 - 1}{u_1} \right) h_2(u_1) & \cdots & \left(\frac{u_N - 1}{u_N} \right) h_2(u_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{u_1 - 1}{u_1} \right)^{N-1} h_N(u_1) & \cdots & \left(\frac{u_N - 1}{u_N} \right)^{N-1} h_N(u_N) \end{array} \right|. \end{aligned} \quad (2.110)$$

Substituindo (2.110) em $\tilde{Z}_N(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$ (2.104), fatorando $(1/u_j)^{N-1}$ de cada coluna, obtemos a relação (2.96). Aplicando este resultado a $Z_s(\lambda_1, \dots, \lambda_s)$, temos

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^s \left[\frac{(z_j - 1)b(\lambda)}{cb(\lambda_j)} \right]^{s-1} Z_s(\lambda_1, \dots, \lambda_s) &= \prod_{j=1}^s \left(\frac{z_j - 1}{c} \right)^{s-1} \left(\frac{a(\lambda)}{u_j a(\lambda_j)} \right)^{s-1} \tilde{Z}_s(\lambda_1, \dots, \lambda_s) Z_s(\lambda) \\ &= \frac{Z_s(\lambda)}{c^{s(s-1)}} \prod_{j=1}^s \left(\frac{z_j - 1}{u_j} \right)^{s-1} h_{s,s}(u_1, \dots, u_s), \end{aligned} \quad (2.111)$$

em que usamos (2.102) para eliminar $b(\lambda)$, $b(\lambda_j)$ em favor de $a(\lambda)$, $a(\lambda_j)$ e u_j . Por outro lado, juntando as relações (2.95) e (2.92), podemos obter u_j como função de z_j ,

$$u_j = -\frac{z_j - 1}{(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1}, \quad (2.112)$$

e então, substituindo em (2.111), (2.94) é reescrita como

$$\begin{aligned} \text{Asym} \prod_{z_1, \dots, z_s} \prod_{1 \leq i < j \leq s} \frac{(\tilde{z}_i - 1)(z_j - 1)}{\tilde{z}_i z_j - 1} &= \frac{Z_s(\lambda)}{s! a^{s(s-1)} c^s} \prod_{1 \leq i < j \leq s} (z_j - z_i) \frac{\prod_{j=1}^s [(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1]^{s-1}}{\prod_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^s t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_i + 1} \times \\ &\times h_{s,s}(u_1, \dots, u_s). \end{aligned} \quad (2.113)$$

Diretamente da definição (2.97), o determinante em (2.93) também pode ser colocado em função de $h_{N,s}(z_1, \dots, z_s)$. De fato,

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} \frac{h_N(z_1)}{(z_1 - 1)z_1^r} & \cdots & \frac{h_N(z_s)}{(z_s - 1)z_s^r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{h_{N-s+1}(z_1)}{(z_1 - 1)^s z_1^{r-s+1}} & \cdots & \frac{h_{N-s+1}(z_s)}{(z_s - 1)^s z_s^{r-s+1}} \end{vmatrix} &= (-1)^{s(s-1)} \prod_{j=1}^s \frac{1}{z_j^r (z_j - 1)^s} \prod_{1 \leq i < j \leq s} (z_j - z_i) \times \\ &\times h_{N,s}(z_1, \dots, z_s). \end{aligned} \quad (2.114)$$

Finalmente, substituindo (2.113) e (2.114) em (2.93), obtemos a expressão desejada para $F_N^{(r,s)}$,

$$\begin{aligned} F_N^{(r,s)} &= \frac{(-1)^{s(s+1)/2} Z_s(\lambda)}{s! (2\pi i)^s a^{s(s-1)} c^s} \oint_C \cdots \oint_C \prod_{1 \leq i < j \leq s} (z_j - z_i)^2 \prod_{j=1}^s \frac{[(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1]^{s-1}}{z_j^r (z_j - 1)^s} \times \\ &\times \frac{h_{N,s}(z_1, \dots, z_s) h_{s,s}(u_1, \dots, u_s)}{\prod_{i \neq j}^s t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_i + 1} dz_1 \cdots dz_s. \end{aligned} \quad (2.115)$$

Vale apontar que as fórmulas (2.88) e (2.115) serão empregadas posteriormente na obtenção dos pontos de contato e da porção Γ_{SE} da curva ártica mediante análise do limite assintótico das integrais via método do ponto de sela [45]. Para tanto, é necessário o conhecimento do comportamento da função geradora $h_N(z)$ para $N \rightarrow \infty$.

2.5.2 Limite assintótico da função geradora

Como vimos na Subseção anterior, existe uma relação entre a função geradora $h_N(z)$ e a função de partição de um modelo com apenas uma heterogeneidade, $Z_N(\lambda_1, \lambda)$, dada pela (2.108). A seguir, veremos como desta relação podemos extrair o comportamento assintótico de $h_N(z)$ conforme $N \rightarrow \infty$.

Apenas em termos de λ e $\xi \equiv \xi_1$, \tilde{Z}_N (2.105) se escreve

$$\tilde{Z}_N(\lambda, \xi) = \frac{Z_N(\lambda, \xi)}{Z_N(\lambda)} = \frac{(N-1)!}{[d(\xi)]^{N-1}} \left[\frac{\varphi(\lambda)}{\varphi(\lambda + \xi)} \right]^N \tilde{S}_N(\xi), \quad \tilde{S}_N(\xi) = \frac{\tilde{\Xi}_N}{\Xi_N}, \quad (2.116)$$

sendo $\Xi_N = \det \bar{Z}$ (2.20) e $\tilde{\Xi}_N$ é dado por

$$\tilde{\Xi}_N = \begin{vmatrix} \varphi(\lambda) & \partial_\lambda \varphi(\lambda) & \cdots & \partial_\lambda^{N-2} \varphi(\lambda) & \varphi(\lambda + \xi) \\ \partial_\lambda \varphi(\lambda) & \partial_\lambda^2 \varphi(\lambda) & \cdots & \partial_\lambda^{N-1} \varphi(\lambda) & \partial_\lambda \varphi(\lambda + \xi) \\ & & \vdots & & \\ \partial_\lambda^{N-2} \varphi(\lambda) & \partial_\lambda^{N-1} \varphi(\lambda) & \cdots & \partial_\lambda^{2N-4} \varphi(\lambda) & \partial_\lambda^{N-2} \varphi(\lambda + \xi) \\ \partial_\lambda^{N-1} \varphi(\lambda) & \partial_\lambda^N \varphi(\lambda) & \cdots & \partial_\lambda^{2N-3} \varphi(\lambda) & \partial_\lambda^{N-1} \varphi(\lambda + \xi) \end{vmatrix}. \quad (2.117)$$

Igualando (2.116) a (2.108) e resolvendo para $h_N[\tilde{\gamma}(\xi)]$, temos

$$h_N[\tilde{\gamma}(\xi)] = (N-1)! \left[\frac{a(\lambda)}{d(\xi)a(\lambda + \xi)} \right]^{N-1} \left[\frac{\varphi(\lambda)}{\varphi(\lambda + \xi)} \right]^N \tilde{S}_N(\xi). \quad (2.118)$$

Pela expressão (2.118), vê-se que é preciso determinar $\tilde{S}_N(\xi)$ conforme $N \rightarrow \infty$ para conhecer o comportamento assintótico de $h_N[\tilde{\gamma}(\xi)]$. Para isto, considere a identidade de Sylvester [65]

$$\det \mathbf{B} = \left(\det \mathbf{A}_{[p+1, \dots, n; p+1, \dots, n]} \right)^{n-p-1} \det \mathbf{A}, \quad n, p \in \mathbb{Z}, \quad (2.119)$$

em que \mathbf{A} é uma matriz $n \times n$, e as entradas da matriz \mathbf{B} são dadas por

$$\mathbf{B}_{jk} = \det \mathbf{A}_{[p+1, \dots, p+j-1, p+j+1, \dots, n; p+1, \dots, p+k-1, p+k+1, \dots, n]}, \quad j, k = 1, \dots, n-p. \quad (2.120)$$

Com $n = N+1$, $p = N-1$ e $\det \mathbf{A} = \Xi_{N+1}$, temos

$$\Xi_{N+1} = \frac{1}{\Xi_{N-1}} \begin{vmatrix} \Xi_N & \partial_\lambda \Xi_N \\ \partial_\lambda \Xi_N & \partial_\lambda^2 \Xi_N \end{vmatrix} \implies \Xi_{N+1} \Xi_{N-1} = \Xi_N \partial_\lambda^2 \Xi_N - (\partial_\lambda \Xi_N)^2. \quad (2.121)$$

Analogamente, tomando $\det \mathbf{A} = \tilde{\Xi}_{N+1}$ e aplicando (2.119) novamente,

$$\tilde{\Xi}_{N+1} = \frac{1}{\tilde{\Xi}_{N-1}} \begin{vmatrix} \Xi_N & \tilde{\Xi}_N \\ \partial_\lambda \Xi_N & \partial_\lambda \tilde{\Xi}_N \end{vmatrix} \implies \tilde{\Xi}_{N+1} \tilde{\Xi}_{N-1} = \Xi_N \partial_\lambda \tilde{\Xi}_N - \tilde{\Xi}_N \partial_\lambda \Xi_N. \quad (2.122)$$

Usando (2.121) e (2.122), encontramos uma equação diferencial para \tilde{S}_N ,

$$\partial_\lambda \tilde{S}_N = \frac{\Xi_{N+1} \tilde{\Xi}_{N-1}}{\Xi_N^2} \tilde{S}_{N+1}. \quad (2.123)$$

Entretanto, queremos analisar \tilde{S}_N como função de ξ ao invés de λ . Abrindo o determinante $\tilde{\Xi}_{N+1}$ como uma soma e tomando derivadas com respeito a λ e ξ , obtém-se

$$\begin{aligned} \partial_\lambda \tilde{\Xi}_{N+1} &= \partial_\xi \tilde{\Xi}_{N+1} + \frac{1}{\Xi_{N-1}} \begin{vmatrix} \partial_\lambda \Xi_N & \tilde{\Xi}_N \\ \partial_\lambda^2 \Xi_N & \partial_\lambda \tilde{\Xi}_N \end{vmatrix} \implies \\ & \partial_\lambda \tilde{\Xi}_{N+1} = \partial_\xi \tilde{\Xi}_{N+1} + \frac{[(\partial_\lambda \Xi_N)(\partial_\lambda \tilde{\Xi}_N) - \tilde{\Xi}_N \partial_\lambda^2 \Xi_N]}{\Xi_{N-1}}. \end{aligned} \quad (2.124)$$

Assim,

$$\partial_\lambda \tilde{S}_{N+1} = \partial_\xi \tilde{S}_{N+1} - \tilde{S}_{N+1} \partial_\lambda \log \left(\frac{\Xi_{N+1}}{\Xi_N} \right) - \tilde{S}_N, \quad (2.125)$$

onde usamos (2.121)–(2.124). Fazendo $N + 1 \rightarrow N$ e aplicando (2.123) novamente,

$$\partial_\xi \tilde{S}_N = \tilde{S}_{N+1} \frac{\Xi_{N+1} \Xi_{N-1}}{\Xi_N^2} + \tilde{S}_N \partial_\lambda \log \left(\frac{\Xi_N}{\Xi_{N-1}} \right) + \tilde{S}_{N-1}. \quad (2.126)$$

Se $\xi = 0$, $\tilde{Z}_N = 1$, uma vez que não haverá mais heterogeneidades. Disto, deduzimos de (2.116) que o comportamento de \tilde{S}_N quando $\xi \rightarrow 0$ deve ser da forma

$$\tilde{S}_N(\xi) \sim \frac{\xi^{N-1}}{(N-1)!}. \quad (2.127)$$

Por outro lado, \tilde{Z}_N é a razão entre $Z_N(\lambda, \xi)$ e $Z_N(\lambda)$; então, no limite termodinâmico, deve ser uma função exponencial de ξ que cresce, no máximo, com N . Com base nisto, propõe-se

$$\tilde{S}_N(\xi) = \frac{e^{N\phi(\xi)+o(N)}}{(N-1)!}, \quad (2.128)$$

em que $\phi(\xi)$ é uma função a ser determinada a seguir, e $o(N)$ indica termos de ordem inferior a N . Adicionalmente, o comportamento de Ξ_N com $N \rightarrow \infty$ é conhecido [30],

$$\Xi_N = \frac{e^{N^2\varrho(\lambda)+O(N)}}{[\prod_{j=0}^{N-1} j!]^2}, \quad (2.129)$$

em que

$$\varrho(\lambda) = \log \left[\frac{\nu}{\sin[\nu(\lambda - \eta)]} \right], \quad \nu = \frac{\pi}{\pi - 2\eta}. \quad (2.130)$$

Substituindo (2.128) e (2.129) em (2.126), obtemos uma equação diferencial ordinária para $\phi(\xi)$,

$$\partial_\xi \phi(\xi) = e^{2\varrho(\lambda)+\phi(\xi)} + 2\partial_\lambda \varrho(\lambda) + e^{-\phi(\xi)}, \quad (2.131)$$

cuja solução é dada por

$$e^{\phi(\xi)} = \frac{\sin[\nu(\lambda - \eta)] \sin(\nu\xi)}{\nu \sin[\nu(\lambda + \xi - \eta)]}, \quad (2.132)$$

para a qual é necessário usar (2.127) a fim de eliminar a constante de integração. Finalmente, obtemos o comportamento assintótico de $h_N[\tilde{\gamma}(\xi)]$ para $N \rightarrow \infty$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log h_N[\tilde{\gamma}(\xi)]}{N} = \log \left[\frac{\sin(\lambda + \xi - \eta) \sin[\nu(\lambda - \eta)] \sin(\nu\xi)}{\nu \sin(\lambda - \eta) \sin(\xi) \sin[\nu(\lambda + \xi - \eta)]} \right]. \quad (2.133)$$

3 Fronteira com uma extremidade reflexiva

O modelo de seis vértices com uma fronteira reflexiva (RE) é uma variação da condição de contorno do tipo parede de domínio, definido em uma rede retangular de dimensões $2N \times N$, como representado na Figura 14.

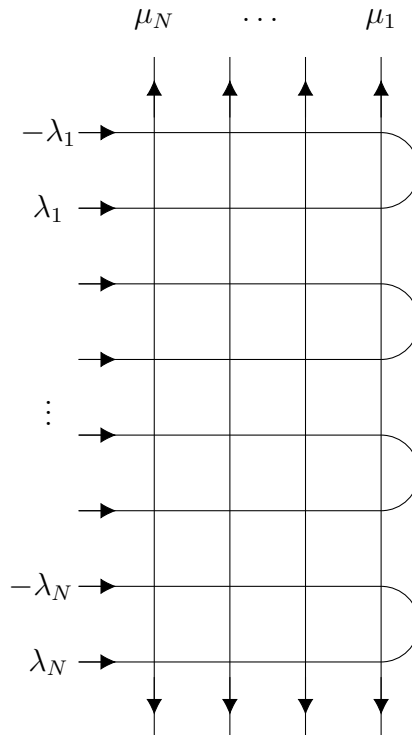


Figura 14 – Fronteira do tipo parede de domínio com uma extremidade reflexiva (RE) para o modelo de seis vértices heterogêneo. Fonte: elaborada pela autora.

Aqui, cabe um comentário a respeito da leitura correta dos vértices em uma rede como a da Figura 14. Considere a Figura 15. A leitura deve ser começada da parte inferior da linha dupla, da esquerda para a direita. Após a reflexão na fronteira, o sentido de leitura na linha se inverte, ou seja, passa a ser da direita para a esquerda, tal que $\lambda \rightarrow -\lambda$. Outra forma de ler os pesos da linha dupla é “desdobrando-a” no ponto de reflexão, como na figura da direita – assim, não é necessário inverter o sentido da leitura.

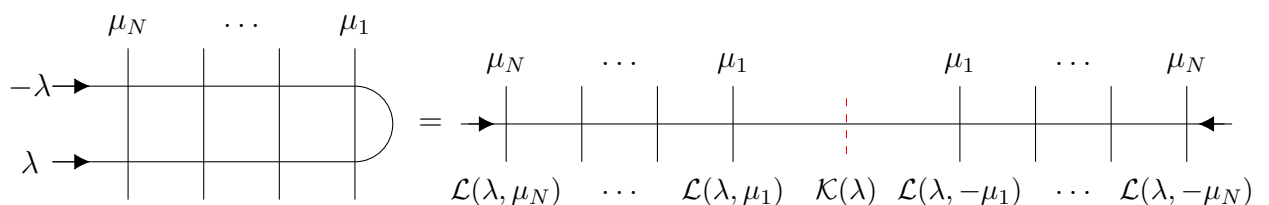


Figura 15 – Leitura dos pesos. Fonte: elaborada pela autora.

O desenvolvimento desta parte será feito de forma análoga ao que foi exposto no Capítulo 2. Introduziremos a matriz de monodromia de Sklyanin (linha dupla) [60] e algumas das relações de comutação entre as entradas desta matriz, ferramentas necessárias para a derivação da função de partição do modelo, bem como das funções de correlação da fronteira e a EFP [51]. Assim como no caso DWBC, a função de partição deste modelo também pode ser escrita em termos de um determinante, o que foi feito por Tsuchiya [27]. Além disso, as correlações também admitem representações determinantes, que poderão ser reduzidas com o uso de propriedades de polinômios bi-ortogonais [66].

3.1 Álgebra de reflexão

No contexto de modelos de vértices, o critério de integrabilidade de Yang-Baxter se baseia na proposição de que a solução exata destes modelos está diretamente relacionada a comutatividade das respectivas matrizes de transferência, $T(\lambda) = \text{tr}_{\mathcal{H}}[\mathcal{T}(\lambda)]$, para diferentes valores dos parâmetros espectrais:

$$[T(\lambda), T(\mu)] = 0, \quad \forall \lambda, \mu. \quad (3.1)$$

Uma condição suficiente para que (3.1) seja válida é a existência de uma matriz R , invertível, que satisfaz a relação fundamental (1.8) e a equação de Yang-Baxter (1.10).

Sob condições periódicas de contorno, a derivada logarítmica da matriz de transferência do modelo de seis vértices é proporcional ao Hamiltoniano do modelo XXZ, no caso de uma cadeia de spins fechada. Com isto, a equação (3.1), além de permitir encontrar os autoestados e autovalores do modelo quântico via diagonalização da matriz de transferência (o que é feito através do ansatz de Bethe), também fornece infinitas quantidades conservadas [19].

Também é possível relacionar cadeias de spins unidimensionais abertas com o modelo de seis vértices, embora sob diferentes condições de contorno – no caso, com extremidades reflexivas ao invés de periódicas. Neste caso, além dos operadores $\mathcal{L}_{jk}(\lambda_j, \mu_k)$, $j, k = 1, \dots, N$, associados aos pesos estatísticos internos, introduz-se as matrizes $\mathcal{K}^{(\pm)}(\lambda_j)$, operadores que atuam no espaço horizontal associado a cada linha dupla e que descrevem as reflexões nas bordas. Para que a integrabilidade seja preservada na fronteira, estes pesos devem satisfazer às relações de reflexão [60],

$$R_{12}(\lambda - \mu)\mathcal{K}_1^{(-)}(\lambda)R_{12}(\lambda + \mu)\mathcal{K}_2^{(-)}(\mu) = \mathcal{K}_2^{(-)}(\mu)R_{12}(\lambda + \mu)\mathcal{K}_1^{(-)}(\lambda)R_{12}(\lambda - \mu), \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} R_{12}(-\lambda + \mu)[\mathcal{K}_1^{(+)}(\lambda)]^{t_1}R_{12}(-\lambda - \mu - 4\eta)[\mathcal{K}_2^{(+)}(\mu)]^{t_2} = \\ = [\mathcal{K}_2^{(+)}(\mu)]^{t_2}R_{12}(-\lambda - \mu - 4\eta)[\mathcal{K}_1^{(-)}(\lambda)]^{t_1}R_{12}(-\lambda + \mu), \end{aligned} \quad (3.3)$$

com t_i a transposição no espaço vetorial indicado e $\mathcal{K}_1 = \mathcal{K} \otimes \mathbf{1}$, $\mathcal{K}_2 = \mathbf{1} \otimes \mathcal{K}$. Adicionalmente, a matriz R satisfaz

$$P_{12}R_{12}(\lambda)P_{12} = R_{12}(\lambda), \quad (3.4)$$

$$[R_{12}(\lambda)]^{t_1 t_2} = R_{12}(\lambda), \quad (3.5)$$

$$R_{12}(\lambda)R_{12}(-\lambda) = \varrho_1(\lambda), \quad (3.6)$$

$$[R_{12}(\lambda)]^{t_1} [R_{12}(-\lambda - 4\eta)]^{t_1} = \varrho_2(\lambda), \quad (3.7)$$

em que $\varrho_1(\lambda)$, $\varrho_2(\lambda)$ são funções complexas. As relações (3.4)–(3.7), em conjunto com o isomorfismo $\mathcal{K}^{(+)}(\lambda) = [\mathcal{K}^{(-)}(-\lambda - 4\eta)]^t$, podem ser usadas para obter (3.3) através de (3.2). Importante ressaltar que, daqui em diante, tomaremos $R = \mathcal{L}$, isto é,

$$R_{12}(\lambda \pm \mu) = \begin{bmatrix} a_{\pm}(\lambda, \mu) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_{\pm}(\lambda, \mu) & c_{\pm}(\lambda, \mu) & 0 \\ 0 & c_{\pm}(\lambda, \mu) & b_{\pm}(\lambda, \mu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{\pm}(\lambda, \mu) \end{bmatrix}, \quad (3.8)$$

com a nova parametrização

$$\begin{aligned} a_{\pm}(\lambda_j, \mu_k) &= a(\lambda_j \pm \mu_k) = \sin(\lambda_j \pm \mu_k + 2\eta), \\ b_{\pm}(\lambda_j, \mu_k) &= b(\lambda_j \pm \mu_k) = \sin(\lambda_j \pm \mu_k), \\ c_{\pm}(\lambda_j, \mu_k) &= c(\lambda_j \pm \mu_k) = \sin(2\eta), \end{aligned} \quad (3.9)$$

em que o sinal negativo (positivo) é referente às linhas inferiores (superiores), de parâmetro λ_j ($-\lambda_j$). Os parâmetros η , λ_j e μ_k devem estar restritos aos intervalos $0 < \eta < \pi/2$, $0 < \lambda_j \leq \pi/2 - \eta$, $-\lambda_j < \mu_k < \lambda_j$, respectivamente, com $j, k = 1, \dots, N$. Como $c_+ = c_-$ é constante, denotaremos estes pesos apenas por c . Assumiremos $\mathcal{K}^{(-)}$ na forma diagonal,

$$\mathcal{K}^{(-)}(\lambda) = \begin{bmatrix} \kappa_+(\lambda) & 0 \\ 0 & \kappa_-(\lambda) \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

Com isto, a solução da equação (3.2) é dada por

$$\kappa_{\pm}(\lambda) = \frac{\sin(\xi \pm \lambda)}{\sin(\xi)}, \quad \lambda < \xi < \pi - \lambda. \quad (3.11)$$

Veja a Figura 16 para uma ilustração destes vértices.

A matriz de monodromia de Sklyanin é definida como

$$\mathcal{U}_j(\lambda_j) = \mathcal{T}_j(\lambda_j) \mathcal{K}_j^{(-)}(\lambda_j) \check{\mathcal{T}}_j(\lambda_j) \quad (3.12)$$

$$= \begin{bmatrix} \mathcal{A}_j(\lambda_j) & \mathcal{B}_j(\lambda_j) \\ \mathcal{C}_j(\lambda_j) & \mathcal{D}_j(\lambda_j) \end{bmatrix}, \quad (3.13)$$

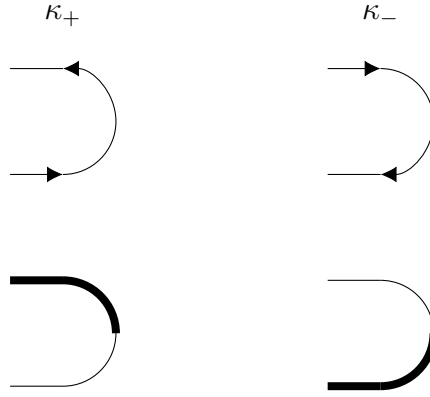


Figura 16 – Representação dos pesos da fronteira reflexiva, em termos de setas e linhas.

em que

$$\check{\mathcal{T}}_j(\lambda_j) = \mathcal{L}_{j1}(\lambda_j + \mu_1) \dots \mathcal{L}_{jN}(\lambda_j + \mu_N) \quad (3.14)$$

$$= \begin{bmatrix} \check{A}(\lambda_j) & \check{B}(\lambda_j) \\ \check{C}(\lambda_j) & \check{D}(\lambda_j) \end{bmatrix}, \quad (3.15)$$

é proporcional a $[\mathcal{T}_j(-\lambda_j)]^{-1}$ em virtude de (3.6). Os operadores $\check{A}(\lambda)$, $\check{B}(\lambda)$, $\check{C}(\lambda)$ e $\check{D}(\lambda)$ atuam no espaço \mathcal{V} correspondente a todas as colunas. Usando (3.2)–(3.7), é possível mostrar que, para diferentes parâmetros, a matriz de transferência definida por

$$\mathcal{T}(\lambda) = \text{tr}_{\mathcal{H}}[\mathcal{K}^{(+)}(\lambda)\mathcal{U}(\lambda)], \quad (3.16)$$

comuta para diferentes parâmetros, isto é, $[\mathcal{T}(\lambda), \mathcal{T}(\mu)] = 0$ [60].

A matriz de monodromia $\mathcal{U}_j(\lambda_j)$ também satisfaz a equação de reflexão (3.2),

$$R_{12}(\lambda - \mu)\mathcal{U}_1(\lambda)R_{12}(\lambda + \mu)\mathcal{U}_2(\mu) = \mathcal{U}_2(\mu)R_{12}(\lambda + \mu)\mathcal{U}_1(\lambda)R_{12}(\lambda - \mu), \quad (3.17)$$

o que fornece as relações de comutação entre os operadores de linha dupla \mathcal{A} , \mathcal{B} , \mathcal{C} e \mathcal{D} ao substituirmos (3.13) em (3.17). As mais relevantes para os cálculos posteriores são

$$[\mathcal{B}(\lambda), \mathcal{B}(\mu)] = [\mathcal{C}(\lambda), \mathcal{C}(\mu)] = 0, \quad (3.18)$$

$$\mathcal{A}(\mu)\mathcal{B}(\lambda) = \frac{a_-b_+}{b_-a_+}\mathcal{B}(\lambda)\mathcal{A}(\mu) - \frac{cb_+}{b_-a_+}\mathcal{B}(\mu)\mathcal{A}(\lambda) - \frac{c}{a_+}\mathcal{B}(\mu)\mathcal{D}(\lambda), \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\lambda)\mathcal{B}(\mu) &= \frac{a_-a_+}{b_-b_+} \left(1 - \frac{c^2}{a_+^2}\right) \mathcal{B}(\mu)\mathcal{D}(\lambda) - \frac{ca_+}{b_-b_+} \left(1 - \frac{c^2}{a_+^2}\right) \mathcal{B}(\lambda)\mathcal{D}(\mu) - \\ &\quad - \frac{2\Delta c^2}{b_-a_+} \mathcal{B}(\mu)\mathcal{A}(\lambda) + \frac{a_-^2 c}{b_-^2 a_+} \left(1 - \frac{c^2}{a_-^2}\right) \mathcal{B}(\lambda)\mathcal{A}(\mu), \end{aligned} \quad (3.20)$$

em que $a_{\pm} \equiv a_{\pm}(\lambda, \mu)$, $b_{\pm} \equiv b_{\pm}(\lambda, \mu)$ para todos os pesos que aparecem nas expressões (3.18)–(3.20), e Δ é dado por (1.3).

Para encontrar a ação das entradas da matriz de monodromia no estado de referência do espaço vertical $|\uparrow\rangle = \otimes_{k=1}^N |\uparrow\rangle_k$, vamos substituir (1.12), (3.10) e (3.15) em $\mathcal{U}(\lambda)$, obtendo

$$\mathcal{U}(\lambda) = \begin{bmatrix} \kappa_+(\lambda)A(\lambda)\check{A}(\lambda) + \kappa_-(\lambda)B(\lambda)\check{C}(\lambda) & \kappa_+(\lambda)A(\lambda)\check{B}(\lambda) + \kappa_-(\lambda)B(\lambda)\check{D}(\lambda) \\ \kappa_+(\lambda)C(\lambda)\check{A}(\lambda) + \kappa_-(\lambda)D(\lambda)\check{C}(\lambda) & \kappa_+(\lambda)C(\lambda)\check{B}(\lambda) + \kappa_-(\lambda)D(\lambda)\check{D}(\lambda) \end{bmatrix}. \quad (3.21)$$

Comparando com (3.13) e usando (1.14), (1.15), temos que

$$\mathcal{A}(\lambda) |\uparrow\rangle = \kappa_+(\lambda)\alpha_+(\lambda)\alpha_-(\lambda) |\uparrow\rangle, \quad (3.22)$$

$\mathcal{C}(\lambda) |\uparrow\rangle = 0$, e

$$\mathcal{D}(\lambda) |\uparrow\rangle = \kappa_+(\lambda)C(\lambda)\check{B}(\lambda) |\uparrow\rangle + \kappa_-(\lambda)\delta_+(\lambda)\delta_-(\lambda) |\uparrow\rangle, \quad (3.23)$$

com

$$\alpha_{\pm}(\lambda) = \prod_{k=1}^N a_{\pm}(\lambda, \mu_k), \quad \delta_{\pm}(\lambda) = \prod_{k=1}^N b_{\pm}(\lambda, \mu_k). \quad (3.24)$$

Para calcular $C(\lambda)\check{B}(\lambda) |\uparrow\rangle$, voltamos à relação fundamental (1.8) e fazemos $\mu = -\lambda$:

$$R_{12}(2\lambda)\mathcal{T}_1(\lambda)\mathcal{T}_2(-\lambda) = \mathcal{T}_2(-\lambda)\mathcal{T}_1(\lambda)R_{12}(2\lambda). \quad (3.25)$$

Multiplicando ambos os lados da equação por $[\mathcal{T}_2(-\lambda)]^{-1}$,

$$[\mathcal{T}_2(-\lambda)]^{-1}R_{12}(2\lambda)\mathcal{T}_1(\lambda) = \mathcal{T}_1(\lambda)R_{12}(2\lambda)[\mathcal{T}_2(-\lambda)]^{-1}, \quad (3.26)$$

o que implica, graças à (3.6),

$$\check{\mathcal{T}}_2(\lambda)R_{12}(2\lambda)\mathcal{T}_1(\lambda) = \mathcal{T}_1(\lambda)R_{12}(2\lambda)\check{\mathcal{T}}_2(\lambda). \quad (3.27)$$

Com isto, obtemos relações de comutação entre as entradas de \mathcal{T} e $\check{\mathcal{T}}$ com mesmo parâmetro espectral. A que procuramos é

$$C(\lambda)\check{B}(\lambda) = \check{B}(\lambda)C(\lambda) + \frac{c}{a(2\lambda)}[\check{A}(\lambda)A(\lambda) - D(\lambda)\check{D}(\lambda)], \quad (3.28)$$

onde, mais uma vez, empregamos a notação $a(2\lambda) \equiv a_{\pm}(2\lambda, 0)$. Finalmente,

$$\mathcal{D}(\lambda) |\uparrow\rangle = \left[\left(\kappa_-(\lambda) - \frac{c}{a(2\lambda)}\kappa_+(\lambda) \right) \delta_+(\lambda)\delta_-(\lambda) + \frac{c}{a(2\lambda)}\kappa_+(\lambda)\alpha_+(\lambda)\alpha_-(\lambda) \right] |\uparrow\rangle. \quad (3.29)$$

Definindo

$$h(\lambda) = \frac{c}{a(2\lambda)}, \quad \tilde{\mathcal{D}}(\lambda) = \mathcal{D}(\lambda) - h(\lambda)\mathcal{A}(\lambda), \quad (3.30)$$

a equação (3.29) pode ser escrita de forma mais compacta,

$$\tilde{\mathcal{D}}(\lambda) |\uparrow\rangle = [\kappa_-(\lambda) - h(\lambda)\kappa_+(\lambda)]\delta_+(\lambda)\delta_-(\lambda) |\uparrow\rangle. \quad (3.31)$$

Em termos do operador $\tilde{\mathcal{D}}(\lambda)$, as relações (3.19) e (3.20) ficam simplificadas:

$$\mathcal{A}(\mu)\mathcal{B}(\lambda) = f_1(\lambda, \mu)\mathcal{B}(\lambda)\mathcal{A}(\mu) + f_2(\lambda, \mu)\mathcal{B}(\mu)\mathcal{A}(\lambda) + f_3(\lambda, \mu)\mathcal{B}(\mu)\tilde{\mathcal{D}}(\lambda), \quad (3.32)$$

$$\tilde{\mathcal{D}}(\lambda)\mathcal{B}(\mu) = g_1(\lambda, \mu)\mathcal{B}(\mu)\tilde{\mathcal{D}}(\lambda) + g_2(\lambda, \mu)\mathcal{B}(\lambda)\tilde{\mathcal{D}}(\mu) + g_3(\lambda, \mu)\mathcal{B}(\lambda)\mathcal{A}(\mu), \quad (3.33)$$

em que

$$\begin{aligned} f_1(\lambda, \mu) &= \frac{a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)}{b_-(\lambda, \mu)a_+(\lambda, \mu)}, \\ f_2(\lambda, \mu) &= -\frac{cb_+(\lambda, \mu)}{b_-(\lambda, \mu)a_+(\lambda, \mu)} - \frac{ch(\lambda)}{a_+(\lambda, \mu)}, \\ f_3(\lambda, \mu) &= -\frac{c}{a_+(\lambda, \mu)}, \\ g_1(\lambda, \mu) &= \frac{a_-(\lambda, \mu)a_+(\lambda, \mu)}{b_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)} \left(1 - \frac{c^2}{a_+^2(\lambda, \mu)}\right), \\ g_2(\lambda, \mu) &= -\frac{ca_+(\lambda, \mu)}{b_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)} \left(1 - \frac{c^2}{a_+^2(\lambda, \mu)}\right) + \frac{ch(\lambda)}{a_+(\mu, \lambda)}, \\ g_3(\lambda, \mu) &= h(\mu) \left(g_2(\lambda, \mu) - \frac{ch(\lambda)}{a_+(\mu, \lambda)}\right) - h(\lambda)f_2(\mu, \lambda) + \frac{ca_-^2(\lambda, \mu)}{a_+(\lambda, \mu)b_-^2(\lambda, \mu)} \left(1 - \frac{c^2}{a_-^2(\lambda, \mu)}\right). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Para encontrar a ação de $\mathcal{A}(\lambda)$ e $\mathcal{D}(\lambda)$ sobre o estado de Bethe $\mathcal{B}(\lambda_r) \dots \mathcal{B}(\lambda_1) |\uparrow\rangle$, usamos as relações (3.32) e (3.33) e aplicamos argumentos similares aos que empregamos na obtenção de (1.21) e (1.25). Segue que

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\lambda) \prod_{j=1}^r \mathcal{B}(\lambda_j) |\uparrow\rangle &= \beta(\lambda) \prod_{j=1}^r f_1(\lambda_j, \lambda) \prod_{j=1}^r \mathcal{B}(\lambda_j) |\uparrow\rangle + \\ &+ \sum_{i=1}^r \left(\beta(\lambda_i) f_2(\lambda_i, \lambda) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f_1(\lambda_j, \lambda_i) + \zeta(\lambda_i) f_3(\lambda_i, \lambda) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r g_1(\lambda_i, \lambda_j) \right) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r \mathcal{B}(\lambda_j) |\uparrow\rangle, \end{aligned} \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{D}}(\lambda) \prod_{j=1}^r \mathcal{B}(\lambda_j) |\uparrow\rangle &= \zeta(\lambda) \prod_{j=1}^r g_1(\lambda, \lambda_j) \prod_{j=1}^r \mathcal{B}(\lambda_j) |\uparrow\rangle + \\ &+ \sum_{i=1}^r \left(\zeta(\lambda_i) g_2(\lambda, \lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r g_1(\lambda_i, \lambda_j) + \beta(\lambda_i) g_3(\lambda, \lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f_1(\lambda_j, \lambda_i) \right) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r \mathcal{B}(\lambda_j) |\uparrow\rangle, \end{aligned} \quad (3.36)$$

sendo

$$\beta(\lambda) = \kappa_+(\lambda)\alpha_+(\lambda)\alpha_-(\lambda), \quad \zeta(\lambda) = [\kappa_-(\lambda) - h(\lambda)\kappa_+(\lambda)]\delta_+(\lambda)\delta_-(\lambda). \quad (3.37)$$

3.2 Função de partição e o determinante de Tsuchiya

A função de partição do modelo de seis vértices com condição de contorno reflexiva é dada pelo produto dos operadores $\mathcal{B}(\lambda_j)$, conforme a Figura 14, isto é

$$Z_N = \langle \Downarrow | \mathcal{B}(\lambda_1) \dots \mathcal{B}(\lambda_N) | \Uparrow \rangle. \quad (3.38)$$

Esta função de partição também satisfaz a alguns lemas que a determinam unicamente. Isto foi estabelecido por Tsuchiya [27]. São eles:

Lema 3.2.1. $Z_1 = c[\kappa_+(\lambda)b_-(\lambda, \mu) + \kappa_-(\lambda)b_+(\lambda, \mu)]$.

Lema 3.2.2. Z_N depende de cada λ_j segundo $Z_N = e^{-2N\lambda_j} P_{2N}(e^{2i\lambda_j})$.

Lema 3.2.3. Se $\mu_N = -\lambda_1$, vale a seguinte relação de recorrência entre Z_N e Z_{N-1} :

$$Z_N \Big|_{\mu_N = -\lambda_1} = cb(2\lambda_1)\kappa_+(\lambda_1) \prod_{k=1}^{N-1} a_+(\lambda_1, \mu_k) a_-(\lambda_1, \mu_k) \prod_{j=2}^N a_-(\lambda_j, \lambda_1) b_+(\lambda_j, \lambda_1) Z_{N-1}[\lambda_1; \mu_N]. \quad (3.39)$$

Como resultado, a função de partição é dada por

$$Z_N = \frac{\prod_{j,k=1}^N a_+(\lambda_j, \mu_k) a_-(\lambda_j, \mu_k) b_+(\lambda_j, \mu_k) b_-(\lambda_j, \mu_k)}{\prod_{1 \leq k < j \leq N} a_+(\lambda_j, \lambda_k) b_-(\lambda_j, \lambda_k) \prod_{1 \leq m < n \leq N} b_+(\mu_m, \mu_n) b_-(\mu_m, \mu_n)} \times \prod_{j=1}^N b(2\lambda_j) \prod_{k=1}^N \kappa_-(\mu_k) \det \mathbf{M}, \quad (3.40)$$

sendo que as entradas da matriz \mathbf{M} são

$$\mathbf{M}_{jk} = \psi(\lambda_j, \mu_k), \quad j, k = 1, \dots, N, \quad \psi(\lambda, \mu) = \frac{\varphi_+(\lambda, \mu)\varphi_-(\lambda, \mu)}{c}, \quad (3.41)$$

em que

$$\varphi_{\pm}(\lambda, \mu) = \frac{c}{a_{\pm}(\lambda, \mu)b_{\pm}(\lambda, \mu)}. \quad (3.42)$$

Para mostrar que Z_N dado pela (3.38) satisfaz aos Lemas 3.2.1–3.2.3, podemos empregar raciocínio semelhante ao que seguimos ao discutir o determinante de Izergin-Korepin (2.8). Aqui, vamos mostrar como a fórmula determinante de Z_N dada pela (3.40) satisfaz a estes lemas. Começando pelo Lema 3.2.1, ao fazermos $N = 1$ na expressão (3.40), vemos que os fatores do denominador não aparecem e os do numerador cancelam com os que vem do determinante, de maneira que $Z_1 = c\kappa_-(\mu)b(2\lambda)$. Com a parametrização (3.9), podemos reduzir a expressão proposta no Lema a este resultado.

Para provar o Lema 3.2.2, tomaremos $j = 1$ sem perda de generalidade, dado que Z_N é uma função simétrica dos $\lambda_1, \dots, \lambda_N$. Considere a função $v(\lambda_1) = e^{2N\lambda_1} Z_N$. Queremos mostrar que $v(\lambda_1)$ é um polinômio de grau $2N$ em $e^{2i\lambda_1}$. Para nos convenceremos

disto, observamos que Z_N , como função de $e^{2i\lambda_1}$, tem apenas polos simples e estes coincidem com seus zeros. De fato, parte destes polos são os de $\det \mathbf{M}$, que são zeros do produto no numerador de Z_N . O restante são os pontos $\lambda_j - \lambda_k = l\pi$ ou $\lambda_j + \lambda_k + 2\eta = l\pi$, $l \in \mathbb{Z}$, zeros do denominador; entretanto, nestes pontos $\det \mathbf{M} = 0$ pois, nesta situação, haverá duas linhas iguais no determinante, já que $\sin(x + l\pi) = \pm \sin(x)$, com o sinal positivo (negativo) se l par (ímpar). Portanto, Z_N é função analítica de $e^{2i\lambda_1}$ e, conseqüentemente, $v(\lambda_1)$ também.

Falta-nos encontrar o grau deste polinômio. Veja que o numerador de (3.40) tem ordem $e^{2(2N+1)i\lambda_1}$, enquanto o denominador $e^{2(N-1)i\lambda_1}$ e o $\det \mathbf{M} e^{-4i\lambda_1}$, de maneira que a contribuição total de Z_N é $e^{2Ni\lambda_1}$. Com o fator adicional $e^{2Ni\lambda_1}$, a ordem mais alta de $v(\lambda_1)$ em $e^{2i\lambda_1}$ é $2N$, o que nos leva à conclusão de que $v(\lambda_1)$ deve ser da forma $P_{2N}(e^{2i\lambda_1})$.

Por fim, vamos obter a expressão do Lema 3.2.3 a partir de (3.40). Separando os termos que dependem de λ_1 e μ_N dos demais no fator de fora do determinante, temos

$$\begin{aligned} & \prod_{j=2}^N \prod_{k=1}^{N-1} \frac{c}{\psi(\lambda_j, \mu_k)} \frac{\prod_{j=2}^N b(2\lambda_j) \prod_{k=1}^{N-1} \kappa_-(\mu_k)}{\prod_{2 \leq k < j \leq N} a_+(\lambda_j, \lambda_k) b_-(\lambda_j, \lambda_k) \prod_{1 \leq m < n \leq N-1} b_+(\mu_m, \mu_n) b_-(\mu_m, \mu_n)} \times \\ & \times \prod_{k=1}^N \frac{c}{\psi(\lambda_1, \mu_k)} \prod_{j=2}^N \frac{c}{\psi(\lambda_j, \mu_N)} \prod_{j=2}^N \frac{1}{a_+(\lambda_j, \lambda_1) b_-(\lambda_j, \lambda_1)} \prod_{m=1}^{N-1} \frac{1}{b_+(\mu_m, \mu_N) b_-(\mu_m, \mu_N)} \times \\ & \times b(2\lambda_1) \kappa_-(\mu_N), \end{aligned} \quad (3.43)$$

em que usamos as funções introduzidas em (3.41) e (3.42) a fim de simplificar a notação. Fazendo $\mu_N = -\lambda_1$, as duas últimas linhas da expressão acima se reduzem a

$$(-1)^{N-1} b(2\lambda_1) \kappa_+(\lambda_1) \frac{c}{\psi(\lambda_1, \mu_N)} \prod_{k=1}^{N-1} a_+(\lambda_1, \mu_k) a_-(\lambda_1, \mu_k) \prod_{j=2}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N). \quad (3.44)$$

Agora, vamos analisar o termo do determinante. Observe que conforme $\mu_N \rightarrow -\lambda_1$, $\psi(\lambda_1, \mu_N) \gg 1$ dado que $b_+(\lambda_1, \mu_N) \rightarrow 0$. Portanto, neste limite, $\det \mathbf{M}$ tem a forma assintótica

$$\det \mathbf{M} \sim (-1)^{N+1} \psi(\lambda_1, \mu_N) \det \mathbf{M}_{[1;N]}, \quad (3.45)$$

o que pode ser visto ao desenvolver o determinante pela primeira linha, por exemplo. Por outro lado, de (3.40),

$$\begin{aligned} Z_{N-1}[\lambda_1; \mu_N] &= \frac{\prod_{j=2}^N \prod_{k=1}^{N-1} a_+(\lambda_j, \mu_k) a_-(\lambda_j, \mu_k) b_+(\lambda_j, \mu_k) b_-(\lambda_j, \mu_k)}{\prod_{2 \leq k < j \leq N} a_+(\lambda_j, \lambda_k) b_-(\lambda_j, \lambda_k) \prod_{1 \leq m < n \leq N-1} b_+(\mu_m, \mu_n) b_-(\mu_m, \mu_n)} \times \\ & \times \prod_{j=2}^N b(2\lambda_j) \prod_{k=1}^{N-1} \kappa_-(\mu_k) \det \mathbf{M}_{[1;N]}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Juntando as partes (3.43)–(3.46) e substituindo em (3.40), obtemos a fórmula de recorrência (3.39).

3.3 Funções de correlação

A seguir, introduziremos as funções de correlação na fronteira, $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$, e a EFP, $F_N^{(r,s)}$, para o modelo de seis vértices com condição de contorno reflexiva. Tais funções têm a mesma interpretação e expressões similares a (2.21), (2.23) e (2.52), respectivamente, porém, são definidas em termos dos operadores $\mathcal{B}(\lambda)$ da matriz de monodromia $\mathcal{U}(\lambda)$. Assim como no caso da fronteira do tipo parede de domínio, é possível trabalhar estas expressões (usando a álgebra de reflexão discutida na Seção 3.1) e escrever cada uma delas como uma recorrência com a função de partição do modelo. Esta Seção compreende parte dos nossos resultados originais [51].

Sejam

$$H_N^{(r)} = \frac{1}{Z_N} \langle \Downarrow | \mathcal{B}(\lambda_N) \dots \mathcal{B}(\lambda_{r+1}) q_N \mathcal{B}(\lambda_r) p_N \mathcal{B}(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}(\lambda_1) | \Uparrow \rangle, \quad (3.47)$$

$$G_N^{(r)} = \frac{1}{Z_N} \langle \Downarrow | \mathcal{B}(\lambda_N) \dots \mathcal{B}(\lambda_{r+1}) q_N \mathcal{B}(\lambda_r) \mathcal{B}(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}(\lambda_1) | \Uparrow \rangle, \quad (3.48)$$

as funções de correlação na fronteira esquerda, e

$$F_N^{(r,s)} = \frac{1}{Z_N} \langle \Downarrow | \mathcal{B}(\lambda_N) \dots \mathcal{B}(\lambda_{r+1}) q_N \dots q_{N-s+1} \mathcal{B}(\lambda_r) \mathcal{B}(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}(\lambda_1) | \Uparrow \rangle, \quad (3.49)$$

a EFP para o modelo de seis vértices com uma extremidade reflexiva. Veja as Figuras 17 e 18 para uma representação gráfica de cada uma dessas correlações.

A fim de calcular os produtos internos (3.47)–(3.49) no espaço vertical \mathcal{V}_N , iremos decompor as matrizes de monodromia \mathcal{T} e $\check{\mathcal{T}}$ em duas partes:

$$\mathcal{T}_j(\lambda_j) = \mathcal{T}_{jN}(\lambda_j) \mathcal{T}_{j1}(\lambda_j), \quad \check{\mathcal{T}}_j(\lambda_j) = \check{\mathcal{T}}_{j1}(\lambda_j) \check{\mathcal{T}}_{jN}(\lambda_j), \quad (3.50)$$

sendo

$$\mathcal{T}_{jN}(\lambda_j) = \mathcal{L}_{jN}(\lambda_j - \mu_N), \quad \mathcal{T}_{j1}(\lambda_j) = \mathcal{L}_{jN-1}(\lambda_j - \mu_{N-1}) \dots \mathcal{L}_{j1}(\lambda_j - \mu_1), \quad (3.51)$$

$$\check{\mathcal{T}}_{jN}(\lambda_j) = \mathcal{L}_{jN}(\lambda_j + \mu_N), \quad \check{\mathcal{T}}_{j1}(\lambda_j) = \mathcal{L}_{j1}(\lambda_j + \mu_1) \dots \mathcal{L}_{jN-1}(\lambda_j + \mu_{N-1}). \quad (3.52)$$

Escrevendo os operadores \mathcal{T}_{jk} e $\check{\mathcal{T}}_{jk}$ como

$$\mathcal{T}_{jk} = \begin{bmatrix} A_k & B_k \\ C_k & D_k \end{bmatrix}, \quad \check{\mathcal{T}}_{jk} = \begin{bmatrix} \check{A}_k & \check{B}_k \\ \check{C}_k & \check{D}_k \end{bmatrix}, \quad (3.53)$$

com $k = 1, N$, e substituindo na matriz $\mathcal{U}(\lambda_j)$ (3.12), segue que

$$\mathcal{U}(\lambda_j) = \mathcal{T}_{jN}(\lambda_j) [\mathcal{T}_{j1}(\lambda_j) \mathcal{K}^{(-)}(\lambda_j) \check{\mathcal{T}}_{j1}(\lambda_j)] \check{\mathcal{T}}_{jN}(\lambda_j) \quad (3.54)$$

$$= \begin{bmatrix} A_N & B_N \\ C_N & D_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 & B_1 \\ C_1 & D_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \kappa_+ & 0 \\ 0 & \kappa_- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \check{A}_1 & \check{B}_1 \\ \check{C}_1 & \check{D}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \check{A}_N & \check{B}_N \\ \check{C}_N & \check{D}_N \end{bmatrix} \quad (3.55)$$

$$= \begin{bmatrix} A_N & B_N \\ C_N & D_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{A}_1 & \mathcal{B}_1 \\ \mathcal{C}_1 & \mathcal{D}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \check{A}_N & \check{B}_N \\ \check{C}_N & \check{D}_N \end{bmatrix} \quad (3.56)$$

$$= \mathcal{T}_{jN}(\lambda_j) \mathcal{U}_1(\lambda_j) \check{\mathcal{T}}_{jN}(\lambda_j), \quad (3.57)$$

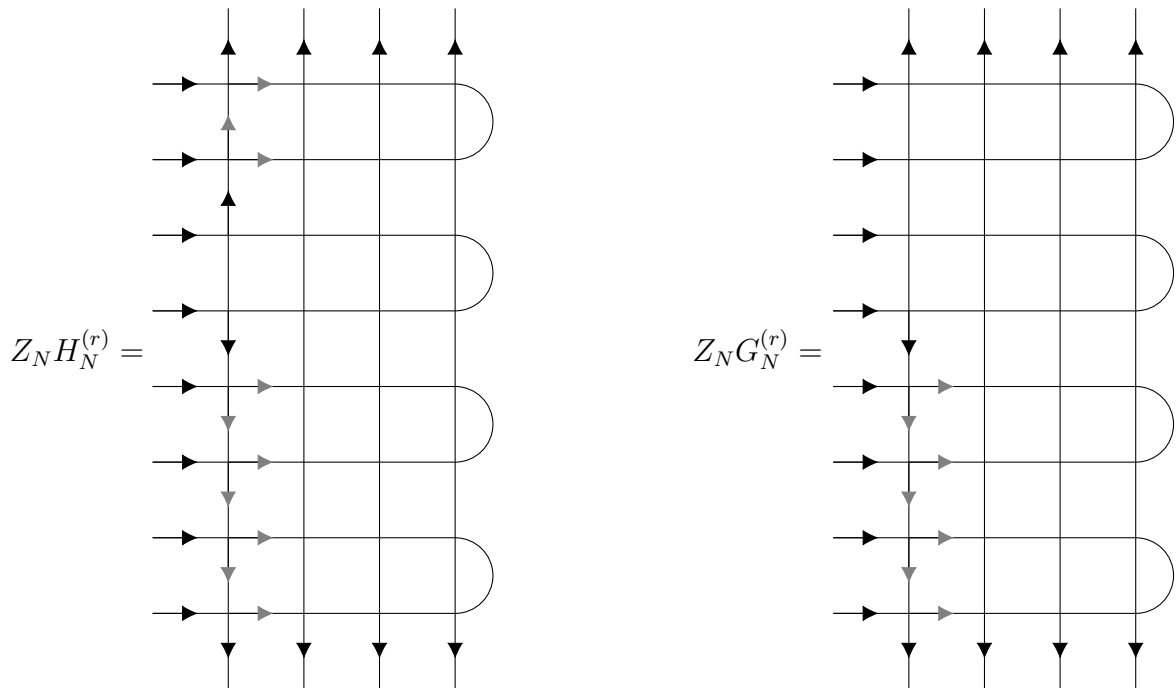


Figura 17 – Representação gráfica das correlações $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$ no caso da fronteira com uma extremidade reflexiva, com $N = 4$, $r = 2$. Em cinza, destacamos os únicos vértices permitidos na primeira coluna segundo a regra do gelo. Fonte: elaborada pela autora.

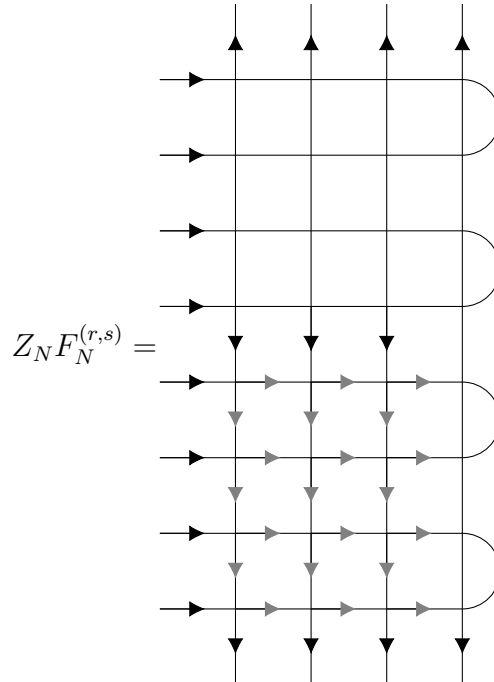


Figura 18 – Representação gráfica de $F_N^{(r,s)}$ para o modelo de seis vértices com condição de contorno reflexiva, com $N = 4$, $r = 2$, $s = 3$. Assim como no caso DWBC, o efeito dos projetores na r -ésima linha é congelar a região abaixo deles com vértices do tipo w_3 . Fonte: elaborado pela autora.

em que os operadores \mathcal{A}_1 , \mathcal{B}_1 , \mathcal{C}_1 e \mathcal{D}_1 independem de μ_N . Fazendo o produto de matrizes na equação (3.56) e igualando a (3.13), obtém-se

$$\mathcal{B}(\lambda) = (A_N \mathcal{A}_1 + B_N \mathcal{C}_1) \check{B}_N + (A_N \mathcal{B}_1 + B_N \mathcal{D}_1) \check{D}_N, \quad (3.58)$$

reforçando que os operadores com índices diferentes comutam. Como $B_N = \check{B}_N = c \sigma_N^-$, o cálculo de $\mathcal{B}(\lambda_r) \dots \mathcal{B}(\lambda_1) |\uparrow\rangle$ pode ser feito com base nos mesmos argumentos que levam a (2.29), resultando em

$$\mathcal{B}(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}(\lambda_1) |\uparrow\rangle = (\star) |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_N + \left[\prod_{j=1}^{r-1} a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \right] \mathcal{B}_1(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_1) |\uparrow\rangle, \quad (3.59)$$

sendo que $|\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_N$, $|\uparrow\rangle_1 = \otimes_{k=1}^{N-1} |\uparrow\rangle_k$, e “ (\star) ” envolve apenas operadores que não mudam o estado $|\downarrow\rangle_N$. Atuando p_N pela esquerda em (3.59),

$$p_N \mathcal{B}(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}(\lambda_1) |\uparrow\rangle = \left[\prod_{j=1}^{r-1} a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \right] \mathcal{B}_1(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_1) |\uparrow\rangle. \quad (3.60)$$

Analogamente,

$$\langle \downarrow | \mathcal{B}(\lambda_N) \dots \mathcal{B}(\lambda_{r+1}) q_N = \left[\prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \right] \langle \downarrow | \mathcal{B}_1(\lambda_N) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_{r+1}). \quad (3.61)$$

Substituindo (3.60) e (3.61) em $H_N^{(r)}$,

$$\begin{aligned} H_N^{(r)} &= \frac{1}{Z_N} \prod_{j=1}^{r-1} a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \times \\ &\times \langle \downarrow |_1 \mathcal{B}_1(\lambda_N) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_{r+1}) \langle \downarrow |_N \mathcal{B}(\lambda_r) |\uparrow\rangle_N \mathcal{B}_1(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_1) |\uparrow\rangle_1, \end{aligned} \quad (3.62)$$

e então, usando (3.58), temos que

$$\begin{aligned} H_N^{(r)} &= \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^{r-1} a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \langle \downarrow |_1 \mathcal{B}_1(\lambda_N) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_{r+1}) \times \\ &\times [b_-(\lambda_r, \mu_N) \mathcal{A}_1(\lambda_r) + b_+(\lambda_r, \mu_N) \mathcal{D}_1(\lambda_r)] \mathcal{B}_1(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_1) |\uparrow\rangle_1, \end{aligned} \quad (3.63)$$

ou ainda, em termos de $\tilde{\mathcal{D}}_1(\lambda_r)$ (Eq. (3.30)),

$$\begin{aligned} H_N^{(r)} &= \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^{r-1} a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \langle \downarrow |_1 \mathcal{B}_1(\lambda_N) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_{r+1}) \times \\ &\times [(b_-(\lambda_r, \mu_N) + b_+(\lambda_r, \mu_N) h(\lambda_r)) \mathcal{A}_1(\lambda_r) + b_+(\lambda_r, \mu_N) \tilde{\mathcal{D}}_1(\lambda_r)] \mathcal{B}_1(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_1) |\uparrow\rangle_1. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Vale mencionar que (3.63) poderia ter sido extraída diretamente da Figura 17 – os fatores de fora do produto interno são os pesos da primeira coluna (da esquerda para a direita),

enquanto que a soma entre colchetes vem das duas possibilidades para preencher a aresta vertical livre no meio da r -ésima linha dupla. Aplicando os resultados (3.35) e (3.36) e simplificando, obtém-se a seguinte expressão para $H_N^{(r)}$,

$$H_N^{(r)} = \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^{r-1} a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \sum_{i=1}^r S_H(\lambda_i) Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_N], \quad (3.65)$$

em que $S_H(\lambda_i) = S_{H,1}(\lambda_i) + S_{H,2}(\lambda_i)$, sendo

$$S_{H,1}(\lambda_i) = \left[\frac{(b_-(\lambda_r, \mu_N) + b_+(\lambda_r, \mu_N)h(\lambda_r))f_2(\lambda_i, \lambda_r) + b_+(\lambda_r, \mu_N)g_3(\lambda_r, \lambda_i)}{f_1(\lambda_r, \lambda_i)} \right] \times \\ \times \beta_1(\lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f_1(\lambda_j, \lambda_i), \quad (3.66)$$

$$S_{H,2}(\lambda_i) = \left[\frac{(b_-(\lambda_r, \mu_N) + b_+(\lambda_r, \mu_N)h(\lambda_r))f_3(\lambda_i, \lambda_r) + b_+(\lambda_r, \mu_N)g_2(\lambda_r, \lambda_i)}{g_1(\lambda_i, \lambda_r)} \right] \times \\ \times \zeta_1(\lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r g_1(\lambda_i, \lambda_j). \quad (3.67)$$

Agora, usando o fato de que $G_N^{(r)} = \sum_{j=1}^r H_N^{(j)}$, segue de (3.64)

$$G_N^{(r)} = \frac{c}{Z_N} \sum_{i=1}^r \prod_{j=1}^{i-1} a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=i+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \langle \Downarrow_1 \mathcal{B}_1(\lambda_N) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_{i+1}) \rangle \times \\ \times [(b_-(\lambda_i, \mu_N) + b_+(\lambda_i, \mu_N)h(\lambda_i))\mathcal{A}_1(\lambda_i) + b_+(\lambda_i, \mu_N)\tilde{\mathcal{D}}_1(\lambda_i)] \mathcal{B}_1(\lambda_{i-1}) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_1) |\Uparrow_1 \rangle. \quad (3.68)$$

Após passarmos $\mathcal{A}_1(\lambda_i)$ e $\tilde{\mathcal{D}}_1(\lambda_i)$ na frente de $\mathcal{B}_1(\lambda_{i-1}) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_1)$, usando (3.35) e (3.36), o último termo desta soma, com $i = r$, será dado por

$$\left[\prod_{j=1}^r a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \right] \frac{1}{a_-(\lambda_r, \mu_N) b_+(\lambda_r, \mu_N)} \times \\ \times \left[(b_-(\lambda_r, \mu_N) + b_+(\lambda_r, \mu_N)h(\lambda_r))\beta_1(\lambda_r) \prod_{j=1}^{r-1} f_1(\lambda_j, \lambda_r) + b_+(\lambda_r, \mu_N)\zeta_1(\lambda_r) \prod_{j=1}^{r-1} g_1(\lambda_r, \lambda_j) \right] \times \\ \times \langle \Downarrow_1 \mathcal{B}_1(\lambda_N) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_{r+1}) \mathcal{B}_1(\lambda_{r-1}) \dots \mathcal{B}_1(\lambda_1) |\Uparrow_1 \rangle + (\diamond), \quad (3.69)$$

com “ (\diamond) ” uma soma de termos que dependem de $\mathcal{B}_1(\lambda_r)$. O termo escrito explicitamente em (3.69) é o único da soma em (3.68) que independe de $\mathcal{B}_1(\lambda_r)$. Portanto, sendo $G_N^{(r)}$ simétrica em $\lambda_1, \dots, \lambda_r$, graças à (3.18) e à definição (3.48), todos os termos restantes têm essa mesma forma, com $\lambda_r \rightarrow \lambda_i$. Assim,

$$G_N^{(r)} = \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^r a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \sum_{i=1}^r S_G(\lambda_i) Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_N], \quad (3.70)$$

sendo $S_G(\lambda_i)$ dado por

$$S_G(\lambda_i) = \frac{1}{a_-(\lambda_i, \mu_N)b_+(\lambda_i, \mu_N)} \times \left[(b_-(\lambda_i, \mu_N) + b_+(\lambda_i, \mu_N)h(\lambda_i))\beta_1(\lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r f_1(\lambda_j, \lambda_i) + b_+(\lambda_i, \mu_N)\zeta_1(\lambda_i) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^r g_1(\lambda_i, \lambda_j) \right]. \quad (3.71)$$

Uma fórmula de recorrência entre as funções de partição Z_N e Z_{N-1} pode ser obtida de (3.70) se $r = N$, uma vez que $G_N^{(N)} = 1$. Neste caso,

$$Z_N = c \prod_{j=1}^N a_-(\lambda_j, \mu_N)b_+(\lambda_j, \mu_N) \sum_{i=1}^N S_G(\lambda_i)Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_N]. \quad (3.72)$$

Vamos separar o primeiro termo desta soma. Nós temos

$$Z_N = c \prod_{j=2}^N a_-(\lambda_j, \mu_N)b_+(\lambda_j, \mu_N)\tilde{S}_G(\lambda_1)Z_{N-1}[\lambda_1; \mu_N] + c \sum_{i=2}^N \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N a_-(\lambda_i, \mu_N)b_+(\lambda_i, \mu_N)\tilde{S}_G(\lambda_i)Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_N], \quad (3.73)$$

com

$$\tilde{S}_G(\lambda) = a_-(\lambda, \mu_N)b_+(\lambda, \mu_N)S_G(\lambda). \quad (3.74)$$

No ponto $\mu_N = -\lambda_1$, todos os termos da soma em (3.73) se anulam visto que eles levam o fator $b_+(\lambda_1, \mu_N) = 0$. Com isto, recupera-se a fórmula de recorrência de Tsuchiya (3.39) a partir de (3.72).

Por fim, de (3.49) vê-se que $F_N^{(r,s)}$ é uma generalização de $G_N^{(r)}$ para as s primeiras colunas (contando da esquerda para a direita). Ao fazermos o produto interno apenas no espaço \mathcal{V}_N , devemos obter a mesma soma que (3.68), porém com os projetores $q_{N-1} \dots q_{N-s+1}$ à esquerda de $\mathcal{B}_1(\lambda_{i-1})$. Por definição, estes projetores não atuam no espaço \mathcal{V}_N . Como $F_N^{(r,s)}$ também é simétrica nos parâmetros $\lambda_1, \dots, \lambda_r$, os mesmos argumentos que usamos para encontrar o termo geral da soma (3.68) se aplicam aqui. Portanto, a fórmula de recorrência para $F_N^{(r,s)}$ se escreve

$$F_N^{(r,s)} = \frac{c}{Z_N} \prod_{j=1}^r a_-(\lambda_j, \mu_N)b_+(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \mu_N)b_-(\lambda_j, \mu_N) \times \sum_{i=1}^r S_G(\lambda_i)Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_N]F_{N-1}^{(r-1,s-1)}[\lambda_i; \mu_N]. \quad (3.75)$$

Nosso objetivo é obter fórmulas determinantes para as correlações $H_N^{(r)}$, $G_N^{(r)}$ e $F_N^{(r,s)}$, substituindo a fórmula de Tsuchiya (3.40) nas recorrências (3.65), (3.70) e (3.75),

respectivamente. Começemos por escrever a razão entre as funções de partição Z_{N-1} e Z_N , que, segundo (3.40), é dada por

$$\begin{aligned} \frac{Z_{N-1}[\lambda_i; \mu_N]}{Z_N} &= \frac{(-1)^{i-1}}{b(2\lambda_i)\kappa_-(\mu_N)} \frac{1}{\alpha_{1,+}(\lambda_i)\alpha_{1,-}(\lambda_i)\delta_{1,+}(\lambda_i)\delta_{1,-}(\lambda_i)} \prod_{j=1}^N \frac{\psi(\lambda_j, \mu_N)}{c} \times \\ &\times \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N a_+(\lambda_j, \lambda_i)b_-(\lambda_j, \lambda_i) \prod_{k=1}^{N-1} b_+(\mu_k, \mu_N)b_-(\mu_k, \mu_N) \frac{\det \mathbf{M}_{[i;N]}}{\det \mathbf{M}}, \end{aligned} \quad (3.76)$$

sendo

$$\alpha_{1,\pm}(\lambda) = \prod_{k=1}^{N-1} a_{\pm}(\lambda, \mu_k), \quad \delta_{1,\pm}(\lambda) = \prod_{k=1}^{N-1} b_{\pm}(\lambda, \mu_k). \quad (3.77)$$

Substituindo (3.76) em (3.65) e cancelando os fatores em comum, encontraremos

$$\begin{aligned} H_N^{(r)} &= \frac{\psi(\lambda_r, \mu_N)}{\kappa_-(\mu_N) \det \mathbf{M}} \frac{(-1)^{N-1} \prod_{k=1}^{N-1} b_+(\mu_k, \mu_N)b_-(\mu_k, \mu_N)}{\prod_{j=1}^{r-1} a_+(\lambda_j, \mu_N)b_-(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_N)b_+(\lambda_j, \mu_N)} \times \\ &\times \sum_{i=1}^r (-1)^{i+N} u_r(\lambda_i) \det \mathbf{M}_{[i;N]}, \end{aligned} \quad (3.78)$$

em que $u_r(\lambda) = u_{r,1}(\lambda) + u_{r,2}(\lambda)$, onde

$$\begin{aligned} u_{r,1}(\lambda) &= \left[\frac{(b_-(\lambda_r, \mu_N) + b_+(\lambda_r, \mu_N)h(\lambda_r))f_2(\lambda, \lambda_r) + b_+(\lambda_r, \mu_N)g_3(\lambda_r, \lambda)}{f_1(\lambda_r, \lambda)} \right] \\ &\times \frac{\kappa_+(\lambda)}{cb^2(2\lambda)\delta_{1,+}(\lambda)\delta_{1,-}(\lambda)} \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \lambda)b_-(\lambda_j, \lambda) \prod_{j=1}^r a_-(\lambda_j, \lambda)b_+(\lambda_j, \lambda), \quad (3.79) \\ u_{r,2}(\lambda) &= \left[\frac{(b_-(\lambda_r, \mu_N) + b_+(\lambda_r, \mu_N)h(\lambda_r))f_3(\lambda, \lambda_r) + b_+(\lambda_r, \mu_N)g_2(\lambda_r, \lambda)}{g_1(\lambda, \lambda_r)} \right] \\ &\times \frac{(\kappa_-(\lambda) - \kappa_+(\lambda)h(\lambda))}{cb(2\lambda)(b(2\lambda) - 2\Delta a(2\lambda))\alpha_{1,+}(\lambda)\alpha_{1,-}(\lambda)} \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \lambda)b_-(\lambda_j, \lambda) \\ &\times \prod_{j=1}^r a_-(\lambda, \lambda_j)[b_+(\lambda, \lambda_j) - 2\Delta a_+(\lambda, \lambda_j)]. \end{aligned} \quad (3.80)$$

Veja que $u_r(\lambda_i) = 0$ se $i = r+1, \dots, N$, devido a presença do produto $\prod_{j=r+1}^N \sin(\lambda_j - \lambda_i)$ em (3.79) e (3.80). Observe que λ_i pode ser vista como a única variável de $u_r(\lambda_i)$ ao compararmos quaisquer dois termos da soma (3.78). Assim, podemos estendê-la de r até N e interpretá-la como o determinante de uma matriz desenvolvido pela última coluna,

$$H_N^{(r)} = \frac{\psi(\lambda_r, \mu_N)}{\kappa_-(\mu_N)} \frac{(-1)^{N+1} \prod_{k=1}^{N-1} b_+(\mu_k, \mu_N)b_-(\mu_k, \mu_N)}{\prod_{j=1}^{r-1} a_+(\lambda_j, \mu_N)b_-(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_N)b_+(\lambda_j, \mu_N)} \frac{\det \mathbf{U}}{\det \mathbf{M}}, \quad (3.81)$$

onde \mathbf{U} é a matriz cujos elementos são

$$U_{jk} = \begin{cases} \mathbf{M}_{jk}, & k \neq N, \\ u_r(\lambda_j), & k = N. \end{cases} \quad j, k = 1, \dots, N, \quad (3.82)$$

Aplicando o mesmo raciocínio a $G_N^{(r)}$, temos que

$$G_N^{(r)} = \frac{c}{\kappa_-(\mu_N) \det \mathbf{M}} \frac{(-1)^{N+1} \prod_{k=1}^{N-1} b_+(\mu_k, \mu_N) b_-(\mu_k, \mu_N)}{\prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N)} \times \sum_{i=1}^r (-1)^{i+N} t_r(\lambda_i) \det \mathbf{M}_{[i;N]}, \quad (3.83)$$

$$= \frac{c}{\kappa_-(\mu_N)} \frac{(-1)^{N+1} \prod_{k=1}^{N-1} b_+(\mu_k, \mu_N) b_-(\mu_k, \mu_N)}{\prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N)} \frac{\det \mathbf{T}}{\det \mathbf{M}}, \quad (3.84)$$

em que

$$t_r(\lambda) = \frac{t_{r,1}(\lambda) + t_{r,2}(\lambda)}{a_-(\lambda, \mu_N) b_+(\lambda, \mu_N)}, \quad (3.85)$$

$$t_{r,1}(\lambda) = \frac{\kappa_+(\lambda)}{cb^2(2\lambda)} \frac{[b_-(\lambda, \mu_N) + b_+(\lambda, \mu_N)h(\lambda)]}{\delta_{1,+}(\lambda)\delta_{1,-}(\lambda)} \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \lambda) b_-(\lambda_j, \lambda) \times \prod_{j=1}^r a_-(\lambda_j, \lambda) b_+(\lambda_j, \lambda), \quad (3.86)$$

$$t_{r,2}(\lambda) = \frac{b_+(\lambda, \mu_N)}{cb(2\lambda)(b(2\lambda) - 2\Delta a(2\lambda))} \frac{[\kappa_-(\lambda) - \kappa_+(\lambda)h(\lambda)]}{\alpha_{1,+}(\lambda)\alpha_{1,-}(\lambda)} \prod_{j=r+1}^N a_+(\lambda_j, \lambda) b_-(\lambda_j, \lambda) \times \prod_{j=1}^r a_-(\lambda, \lambda_j) [b_+(\lambda, \lambda_j) - 2\Delta a_+(\lambda, \lambda_j)], \quad (3.87)$$

e

$$\mathbf{T}_{jk} = \begin{cases} \mathbf{M}_{jk}, & k \neq N, \\ t_r(\lambda_j), & k = N, \end{cases} \quad j, k = 1, \dots, N. \quad (3.88)$$

Já a fórmula determinante de $F_N^{(r,s)}$ é derivada por iteração da recorrência (3.75) para os primeiros valores de s , analogamente ao caso da fronteira parede de domínio. Para $s = 1$, lembremos que $F_N^{(r,1)} = G_N^{(r)}$, dado pela (3.83). Para obter $F_N^{(r,2)}$, colocamos o resultado anterior em (3.75). Para tanto, é necessário adaptar (3.83) para $r \rightarrow r - 1$, $N \rightarrow N - 1$, excluindo os parâmetros λ_i e μ_N :

$$(-1)^{N+1} \rightarrow (-1)^N, \quad \kappa_-(\mu_N) \rightarrow \kappa_-(\mu_{N-1}), \quad \det \mathbf{M} \rightarrow \det \mathbf{M}_{[i;N]}, \quad (3.89)$$

$$\begin{aligned} \prod_{k=1}^{N-1} b_+(\mu_k, \mu_N) b_-(\mu_k, \mu_N) &\rightarrow \prod_{k=1}^{N-2} b_+(\mu_k, \mu_{N-1}) b_-(\mu_k, \mu_{N-1}), \\ \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N) &\rightarrow \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_{N-1}) b_+(\lambda_j, \mu_{N-1}), \\ \prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_N) b_-(\lambda_j, \mu_N) &\rightarrow \frac{1}{a_+(\lambda_i, \mu_{N-1}) b_-(\lambda_i, \mu_{N-1})} \prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_{N-1}) b_-(\lambda_j, \mu_{N-1}), \end{aligned} \quad (3.90)$$

enquanto que a soma deve ser substituída por

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N (-1)^{j+N} \left[\frac{t_{r,1}(\lambda_j) + t_{r,2}(\lambda_j)}{a_-(\lambda_j, \mu_N) b_+(\lambda_j, \mu_N)} \right] \det \mathbf{M}_{[j;N]} \rightarrow \\ & \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (-1)^{j+N+\theta(i,j)} \left[\frac{\chi_1(\lambda_i, \lambda_j, \mu_N, \mu_{N-1}) t_{r,1}(\lambda_j) + \chi_2(\lambda_i, \lambda_j, \mu_N, \mu_{N-1}) t_{r,2}(\lambda_j)}{a_-(\lambda_j, \mu_{N-1}) b_+(\lambda_j, \mu_{N-1})} \right] \det \mathbf{M}_{[i,j;N-1,N]}, \end{aligned} \quad (3.91)$$

em que

$$\chi_1(\lambda_i, \lambda_j, \mu_N, \mu_{N-1}) = \left[\frac{b_-(\lambda_j, \mu_{N-1}) + b_+(\lambda_j, \mu_{N-1}) h(\lambda_j)}{b_-(\lambda_j, \mu_N) + b_+(\lambda_j, \mu_N) h(\lambda_j)} \right] \frac{b_+(\lambda_j, \mu_{N-1}) b_-(\lambda_j, \mu_{N-1})}{a_-(\lambda_i, \lambda_j) b_+(\lambda_i, \lambda_j)}, \quad (3.92)$$

$$\chi_2(\lambda_i, \lambda_j, \mu_N, \mu_{N-1}) = \frac{b_+(\lambda_j, \mu_{N-1})}{b_+(\lambda_j, \mu_N)} \frac{a_+(\lambda_j, \mu_{N-1}) a_-(\lambda_j, \mu_{N-1})}{a_-(\lambda_j, \lambda_i) [b_+(\lambda_j, \lambda_i) - 2\Delta a_+(\lambda_j, \lambda_i)]}, \quad (3.93)$$

são as funções que precisamos introduzir para remover a dependência de $t_{r,1}(\lambda_j)$ e $t_{r,2}(\lambda_j)$, respectivamente, nos parâmetros λ_i e μ_N . Usando (3.89)–(3.91) para compor $F_{N-1}^{(r-1,1)}[\lambda_i; \mu_N]$, substituindo na fórmula de recorrência (3.75) para $F_N^{(r,2)}$ e cancelando os fatores em comum,

$$\begin{aligned} F_N^{(r,2)} &= \prod_{k=N-1}^N \left[\frac{(-1)^{k+1} c}{\kappa_-(\mu_k)} \frac{\prod_{m=1}^{k-1} b_+(\mu_m, \mu_k) b_-(\mu_m, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_k) b_-(\lambda_j, \mu_k) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_k) b_+(\lambda_j, \mu_k)} \right] \times \\ &\times \frac{1}{\det \mathbf{M}} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (-1)^{(i+N)+(j+N)+\theta(i,j)} a_+(\lambda_i, \mu_{N-1}) b_-(\lambda_i, \mu_{N-1}) \det \mathbf{M}_{[i,j;N-1,N]} \times \\ &\times \frac{[t_{r,1}(\lambda_i) + t_{r,2}(\lambda_i)] [\chi_1(\lambda_i, \lambda_j, \mu_N, \mu_{N-1}) t_{r,1}(\lambda_j) + \chi_2(\lambda_i, \lambda_j, \mu_N, \mu_{N-1}) t_{r,2}(\lambda_j)]}{a_-(\lambda_j, \mu_{N-1}) b_+(\lambda_j, \mu_{N-1}) a_-(\lambda_i, \mu_N) b_+(\lambda_i, \mu_N)}. \end{aligned} \quad (3.94)$$

Repetindo os mesmos passos, usamos (3.94) para encontrar $F_N^{(r,3)}$, obtendo

$$\begin{aligned} F_N^{(r,3)} &= \prod_{k=N-2}^N \left[\frac{(-1)^{k+1} c}{\kappa_-(\mu_k)} \frac{\prod_{m=1}^{k-1} b_+(\mu_m, \mu_k) b_-(\mu_m, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_k) b_-(\lambda_j, \mu_k) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_k) b_+(\lambda_j, \mu_k)} \right] \\ &\times \frac{1}{\det \mathbf{M}} \sum_{j_1=1}^N \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^N \sum_{\substack{j_3=1 \\ j_3 \neq j_1, j_2}}^N (-1)^{\sum_{i=1}^3 (j_i+N) + \sum_{m < n}^3 \theta(j_m, j_n)} \det \mathbf{M}_{[j_1, j_2, j_3; N-2, N-1, N]} \\ &\times \prod_{i=1}^3 \left[\frac{\sum_{m=1,2} t_{r,m}(\lambda_{j_i}) \prod_{k=1}^{i-1} \chi_m(\lambda_{j_k}, \lambda_{j_i}, \mu_{N-k+1}, \mu_{N-k})}{a_-(\lambda_{j_i}, \mu_{N-i+1}) b_+(\lambda_{j_i}, \mu_{N-i+1})} \right] \\ &\times \prod_{i < k}^3 a_+(\lambda_{j_i}, \mu_{N-k+1}) b_-(\lambda_{j_i}, \mu_{N-k+1}). \end{aligned} \quad (3.95)$$

Por inspeção de (3.83), (3.94) e (3.95), inferimos que, para s genérico,

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,s)} &= \prod_{k=N-s+1}^N \left[\frac{(-1)^{k+1} c}{\kappa_-(\mu_k)} \frac{\prod_{m=1}^{k-1} b_+(\mu_m, \mu_k) b_-(\mu_m, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_k) b_-(\lambda_j, \mu_k) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_k) b_+(\lambda_j, \mu_k)} \right] \\
 &\times \frac{1}{\det \mathbf{M}} \sum_{j_1=1}^N \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^N \cdots \sum_{\substack{j_s=1 \\ j_s \neq j_q < s}}^N (-1)^{\sum_{i=1}^s (j_i + N) + \sum_{m < n} \theta(j_m, j_n)} \det \mathbf{M}_{[j_1, \dots, j_s; N-s+1, \dots, N]} \\
 &\times \prod_{i=1}^s \left[\frac{\sum_{m=1,2} t_{r,m}(\lambda_{j_i}) \prod_{k=1}^{i-1} \chi_m(\lambda_{j_k}, \lambda_{j_i}, \mu_{N-k+1}, \mu_{N-k})}{a_-(\lambda_{j_i}, \mu_{N-i+1}) b_+(\lambda_{j_i}, \mu_{N-i+1})} \right] \\
 &\times \prod_{i < k}^s a_+(\lambda_{j_i}, \mu_{N-k+1}) b_-(\lambda_{j_i}, \mu_{N-k+1}). \tag{3.96}
 \end{aligned}$$

Vale ressaltar que a expressão (3.96) resolve a fórmula de recorrência (3.75).

Fazendo novamente $\lambda_j = \lambda + \xi_j$ nas funções de dentro dos somatórios em (3.96) e aplicando a identidade (2.62), junto a propriedades de determinantes, chegamos a seguinte expressão para $F_N^{(r,s)}$:

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,s)} &= \prod_{k=N-s+1}^N \left[\frac{(-1)^{k+1} c}{\kappa_-(\mu_k)} \frac{\prod_{m=1}^{k-1} b_+(\mu_m, \mu_k) b_-(\mu_m, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_k) b_-(\lambda_j, \mu_k) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_k) b_+(\lambda_j, \mu_k)} \right] \\
 &\times \frac{\det \mathbf{V}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s})}{\det \mathbf{M}} \left\{ \prod_{i < k}^s a_+(\lambda + \epsilon_i, \mu_{N-k+1}) b_-(\lambda + \epsilon_i, \mu_{N-k+1}) \right. \\
 &\times \left. \prod_{i=1}^s \left[\frac{\sum_{m=1,2} t_{r,m}(\lambda + \epsilon_i) \prod_{k=1}^{i-1} \chi_m(\lambda + \epsilon_k, \lambda + \epsilon_i, \mu_{N-k+1}, \mu_{N-k})}{a_-(\lambda + \epsilon_i, \mu_{N-i+1}) b_+(\lambda + \epsilon_i, \mu_{N-i+1})} \right] \right\}_{\epsilon_1 = \dots = \epsilon_s = 0}, \tag{3.97}
 \end{aligned}$$

em que

$$\det \mathbf{V}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) = \begin{vmatrix} \psi(\lambda + \xi_1, \mu_1) & \cdots & \psi(\lambda + \xi_1, \mu_{N-s}) & \exp(\xi_1 \partial_{\epsilon_s}) & \cdots & \exp(\xi_1 \partial_{\epsilon_1}) \\ \psi(\lambda + \xi_2, \mu_1) & \cdots & \psi(\lambda + \xi_2, \mu_{N-s}) & \exp(\xi_2 \partial_{\epsilon_s}) & \cdots & \exp(\xi_2 \partial_{\epsilon_1}) \\ & & \vdots & & & \vdots \\ \psi(\lambda + \xi_N, \mu_1) & \cdots & \psi(\lambda + \xi_N, \mu_{N-s}) & \exp(\xi_N \partial_{\epsilon_s}) & \cdots & \exp(\xi_N \partial_{\epsilon_1}) \end{vmatrix}. \tag{3.98}$$

3.3.1 Limite homogêneo

Estamos interessados em obter a função de partição do modelo e suas correlações no caso homogêneo. É importante ressaltar que, diferentemente do caso DWBC, estas funções dependem tanto da diferença como da soma dos parâmetros espectrais para a fronteira reflexiva – assim, o limite homogêneo neste caso será entendido como $\lambda_1, \dots, \lambda_N \rightarrow \lambda$, $\mu_1, \dots, \mu_N \rightarrow \mu \neq 0$. Definiremos

$$\lambda_j = \lambda + \xi_j, \quad \mu_k = \mu + \omega_k, \quad j, k = 1, \dots, N. \tag{3.99}$$

Vamos começar por Z_N (3.2). Na situação em que $\xi_1, \dots, \xi_N \rightarrow 0$, $\omega_1, \dots, \omega_N \rightarrow 0$, o determinante $\det \mathbf{M}$ toma a forma

$$\det \mathbf{M} \sim \prod_{j=1}^{N-1} \frac{\omega_{j+1}^j}{j!} \frac{\xi_{j+1}^j}{j!} \det \bar{\mathbf{M}}, \quad \bar{\mathbf{M}}_{jk} = \partial_\lambda^{j-1} \partial_\mu^{k-1} \psi(\lambda, \mu), \quad (3.100)$$

ao passo que os fatores de fora do determinante se tornam

$$\frac{\prod_{j,k=1}^N a_+(\lambda_j, \mu_k) a_-(\lambda_j, \mu_k) b_+(\lambda_j, \mu_k) b_-(\lambda_j, \mu_k)}{\prod_{k < j} a_+(\lambda_j, \lambda_k) \prod_{m < n} b_+(\mu_m, \mu_n)} \sim \frac{[a_+(\lambda, \mu) a_-(\lambda, \mu) b_+(\lambda, \mu) b_-(\lambda, \mu)]^{N^2}}{[a(2\lambda) b(2\mu)]^{N(N-1)/2}},$$

$$\frac{\prod_{j=1}^N b(2\lambda_j) \prod_{k=1}^N \kappa_-(\mu_k)}{\prod_{k < j} b_-(\lambda_j, \lambda_k) \prod_{m < n} b_-(\mu_m, \mu_n)} \sim [b(2\lambda) \kappa_-(\mu)]^N \prod_{j=1}^{N-1} \frac{1}{(-\omega_{j+1})^j} \frac{1}{\xi_{j+1}^j}. \quad (3.101)$$

Logo, no limite homogêneo, a função de partição se escreve

$$Z_N = \frac{[a_+(\lambda, \mu) a_-(\lambda, \mu) b_+(\lambda, \mu) b_-(\lambda, \mu)]^{N^2}}{C_N [-a(2\lambda) b(2\mu)]^{N(N-1)/2}} [b(2\lambda) \kappa_-(\mu)]^N \det \bar{\mathbf{M}}, \quad (3.102)$$

em que $C_N = [\prod_{j=1}^{N-1} j!]^2$.

Agora, vamos calcular o limite homogêneo das correlações. Assim como no caso da fronteira parede de domínio, vamos calcular os limites para a EFP e, a partir dela, obter as funções $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$ quando $s = 1$. Para tomarmos estes limites em (3.97), prosseguiremos como na Subseção 2.4.1. Temos:

$$\prod_{k=N-s+1}^N \left[\frac{(-1)^{k+1} c}{\kappa_-(\mu_k)} \frac{\prod_{m=1}^{k-1} b_+(\mu_m, \mu_k) b_-(\mu_m, \mu_k)}{\prod_{j=1}^r a_+(\lambda_j, \mu_k) b_-(\lambda_j, \mu_k) \prod_{j=r+1}^N a_-(\lambda_j, \mu_k) b_+(\lambda_j, \mu_k)} \right] \sim \prod_{j=N-s}^{N-1} (-\omega_{j+1})^j$$

$$\times \prod_{k=N-s+1}^N \left[\frac{(-1)^{k+1} c}{\kappa_-(\mu)} \frac{1}{[a_-(\lambda, \mu) b_+(\lambda, \mu)]^{N-r} [a_+(\lambda, \mu) b_-(\lambda, \mu)]^r} \prod_{j=0}^{s-1} [b(2\mu)]^{N-s+j} \right], \quad (3.103)$$

$$\det \mathbf{V}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) \sim \prod_{j=0}^{N-s-1} \frac{\omega_{j+1}^j}{j!} \prod_{j=0}^{N-1} \frac{\xi_{j+1}^j}{j!} \det \bar{\mathbf{V}}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}), \quad (3.104)$$

sendo

$$\det \bar{\mathbf{V}}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) = \begin{vmatrix} \psi & \dots & \partial_\mu^{N-s-1} \psi & 1 & \dots & 1 \\ \partial_\lambda \psi & \dots & \partial_\lambda \partial_\mu^{N-s-1} \psi & \partial_{\epsilon_s} & \dots & \partial_{\epsilon_1} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \\ \partial_\lambda^{N-1} \psi & \dots & \partial_\lambda^{N-1} \partial_\mu^{N-s-1} \psi & \partial_{\epsilon_s}^{N-1} & \dots & \partial_{\epsilon_1}^{N-1} \end{vmatrix}, \quad (3.105)$$

e, por fim,

$$\prod_{i < k}^s a_+(\lambda + \epsilon_i, \mu_{N-k+1}) b_-(\lambda + \epsilon_i, \mu_{N-k+1})$$

$$\times \prod_{i=1}^s \left[\frac{\sum_{m=1,2} t_{r,m}(\lambda + \epsilon_i) \prod_{k=1}^{i-1} \chi_m(\lambda + \epsilon_k, \lambda + \epsilon_i, \mu_{N-k+1}, \mu_{N-k})}{a_-(\lambda + \epsilon_i, \mu_{N-i+1}) b_+(\lambda + \epsilon_i, \mu_{N-i+1})} \right]$$

$$\sim \prod_{i=1}^{s-1} [a_+(\lambda + \epsilon_i, \mu) b_-(\lambda + \epsilon_i, \mu)]^{s-i} \prod_{i=1}^s \left[\frac{\sum_{m=1,2} t_{r,m}(\lambda + \epsilon_i) \prod_{k=1}^{i-1} \chi_m(\lambda + \epsilon_k, \lambda + \epsilon_i, \mu)}{a_-(\lambda + \epsilon_i, \mu) b_+(\lambda + \epsilon_i, \mu)} \right]. \quad (3.106)$$

Substituindo (3.100), (3.103), (3.104) e (3.106) em (3.97), obtemos a seguinte expressão para a EFP no limite homogêneo

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,s)} &= \frac{1}{\det \bar{\mathbf{M}}} \prod_{k=N-s+1}^N \left[\frac{c(k-1)!}{\kappa_-(\mu)} \frac{[b(2\mu)]^{k-1}}{[a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)]^{N-r} [a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)]^r} \right] \\
 &\times \det \bar{\mathbf{V}}(\partial_{\epsilon_1}, \dots, \partial_{\epsilon_s}) \left\{ \prod_{i=1}^{s-1} [a_+(\lambda + \epsilon_i, \mu)b_-(\lambda + \epsilon_i, \mu)]^{s-i} \right. \\
 &\times \left. \prod_{i=1}^s \left[\frac{\sum_{m=1,2} t_{r,m}(\lambda + \epsilon_i) \prod_{k=1}^{i-1} \chi_m(\lambda + \epsilon_k, \lambda + \epsilon_i, \mu)}{a_-(\lambda + \epsilon_i, \mu)b_+(\lambda + \epsilon_i, \mu)} \right] \right\}_{\epsilon_1 = \dots = \epsilon_s = 0}. \quad (3.107)
 \end{aligned}$$

Dado que $F_N^{(r,1)} = G_N^{(r)}$, tomando $s = 1$ em (3.107), segue que

$$\begin{aligned}
 G_N^{(r)} &= \frac{(N-1)!}{\det \bar{\mathbf{M}}} \frac{c}{\kappa_-(\mu)} \frac{[b(2\mu)]^{N-1}}{[a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)]^{N-r} [a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)]^r} \times \\
 &\times \begin{vmatrix} \psi & \dots & \partial_\mu^{N-s-1} \psi & 1 \\ \partial_\lambda \psi & \dots & \partial_\lambda \partial_\mu^{N-2} \psi & \partial_\epsilon \\ & & \vdots & \\ \partial_\lambda^{N-1} \psi & \dots & \partial_\lambda^{N-1} \partial_\mu^{N-2} \psi & \partial_\epsilon^{N-1} \end{vmatrix} \Bigg|_{\epsilon=0}, \quad (3.108)
 \end{aligned}$$

Agora, calculando $H_N^{(r)} = G_N^{(r)} - G_N^{(r-1)}$ usando o resultado anterior, temos

$$\begin{aligned}
 H_N^{(r)} &= \frac{(N-1)!}{\det \bar{\mathbf{M}}} \frac{\psi(\lambda, \mu)}{\kappa_-(\mu)} \frac{[b(2\mu)]^{N-1}}{[a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)]^{r-1} [a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)]^{N-r}} \times \\
 &\times \begin{vmatrix} \psi & \dots & \partial_\mu^{N-s-1} \psi & 1 \\ \partial_\lambda \psi & \dots & \partial_\lambda \partial_\mu^{N-2} \psi & \partial_\epsilon \\ & & \vdots & \\ \partial_\lambda^{N-1} \psi & \dots & \partial_\lambda^{N-1} \partial_\mu^{N-2} \psi & \partial_\epsilon^{N-1} \end{vmatrix} \Bigg|_{\epsilon=0}, \quad (3.109)
 \end{aligned}$$

pois

$$u_r(\lambda + \epsilon) = a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)t_r(\lambda + \epsilon) - a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)t_{r-1}(\lambda + \epsilon), \quad (3.110)$$

o que pode ser verificado usando as equações (3.79), (3.80) e (3.85)–(3.87).

É interessante notar que a função (3.107) pode ser reescrita em termos de um determinante menor, agora usando a teoria de polinômios bi-ortogonais, apresentada no Apêndice A. Comparando (3.100) e (A.8), cabe a identificação

$$c_{i,j} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} x^i y^j w(x, y) dx dy = \partial_\lambda^i \partial_\mu^j [c\psi(\lambda, \mu)], \quad (3.111)$$

com a função peso

$$w(x, y) = \frac{1}{2} e^{(\lambda+\eta)x + \mu y} \Phi\left(\frac{x-y}{2}\right) \Phi\left(\frac{x+y}{2}\right), \quad (3.112)$$

em que $\Phi(x)$ é dado pela (2.82), com respeito a qual as sequências $\{\tilde{P}_n(x)\}_{n=0}^\infty$, $\{\tilde{Q}_m(y)\}_{m=0}^\infty$ são ortogonais. Aplicando as relações (A.8) e (A.11), obtemos

$$\begin{aligned}
 F_N^{(r,s)} = & \prod_{k=N-s+1}^N \left[\frac{c^2}{\kappa_-(\mu)} \frac{[b(2\mu)]^{k-1}}{[a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)]^{N-r} [a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)]^r} \right] \\
 & \times \begin{vmatrix} V_{N-s}(\partial_{\epsilon_s}) & \cdots & V_{N-s}(\partial_{\epsilon_1}) \\ & \ddots & \\ V_{N-1}(\partial_{\epsilon_s}) & \cdots & V_{N-1}(\partial_{\epsilon_1}) \end{vmatrix} \left\{ \prod_{i=1}^{s-1} [a_+(\lambda + \epsilon_i, \mu)b_-(\lambda + \epsilon_i, \mu)]^{s-i} \right. \\
 & \left. \times \prod_{i=1}^s \left[\frac{\sum_{m=1,2} t_{r,m}(\lambda + \epsilon_i) \prod_{k=1}^{i-1} \chi_m(\lambda + \epsilon_k, \lambda + \epsilon_i, \mu)}{a_-(\lambda + \epsilon_i, \mu)b_+(\lambda + \epsilon_i, \mu)} \right] \right\}_{\epsilon_1 = \dots = \epsilon_s = 0}, \quad (3.113)
 \end{aligned}$$

com $V_n = (n! / J_n) \tilde{P}_n$. Já as funções $G_N^{(r)}$ e $H_N^{(r)}$ ficam

$$G_N^{(r)} = \frac{c^2}{\kappa_-(\mu)} \frac{[b(2\mu)]^{N-1}}{[a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)]^{N-r} [a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)]^r} V_{N-1}(\partial_\epsilon) t_r(\lambda + \epsilon) \Big|_{\epsilon=0}, \quad (3.114)$$

$$H_N^{(r)} = \frac{c^2}{\kappa_-(\mu)} \frac{[b(2\mu)]^{N-1}}{[a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)]^{N-r+1} [a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)]^r} V_{N-1}(\partial_\epsilon) u_r(\lambda + \epsilon) \Big|_{\epsilon=0}. \quad (3.115)$$

Formalmente, podemos definir uma função geradora de $H_N^{(r)}$ (3.47) dada pela mesma expressão que (2.86). Logo, representações integrais para $H_N^{(r)}$ e $G_N^{(r)}$ tem a mesma forma que (2.87) e (2.88), respectivamente. Entretanto, para o caso da fronteira reflexiva não foi possível encontrar uma identidade análoga a (2.89) que relacionasse esta função geradora $h_N(z)$ e os polinômios bi-ortogonais que aparecem nas correlações (3.113)–(3.115). Isto impossibilita a obtenção de uma representação integral para $F_N^{(r,s)}$ e, conseqüentemente, impede a aplicação do método da EFP para a obtenção das curvas árticas no modelo de seis vértices com este tipo de fronteira. Para esta finalidade, contudo, ainda podemos recorrer ao chamado método da tangente, como veremos a seguir. Para isto, é necessário conhecer o comportamento assintótico de $h_N(z)$ para o modelo com fronteira reflexiva.

3.3.2 Comportamento assintótico de $h_N(z)$

A seguir, estudaremos o comportamento da função geradora $h_N(z)$ no limite termodinâmico. Para isto, vamos estabelecer uma relação entre esta função e a função de partição de um modelo parcialmente heterogêneo, a exemplo do que foi feito para a fronteira parede de domínio na Subseção 2.5.2 [45]. Estes resultados originais foram apresentados no trabalho [52].

Em primeiro lugar, observe que $H_N^{(r)}$ (3.47) pode ser vista como a soma de dois termos,

$$H_N^{(r)} = \frac{A_N^{(r)} + D_N^{(r)}}{Z_N}, \quad (3.116)$$

em que $A_N^{(r)}$ e $D_N^{(r)}$ estão diretamente relacionados à probabilidade de que o vértice do tipo c está posicionado na porção superior ou inferior da r -ésima linha dupla, respectivamente. Graficamente, estas funções podem ser representadas como na Figura 19.

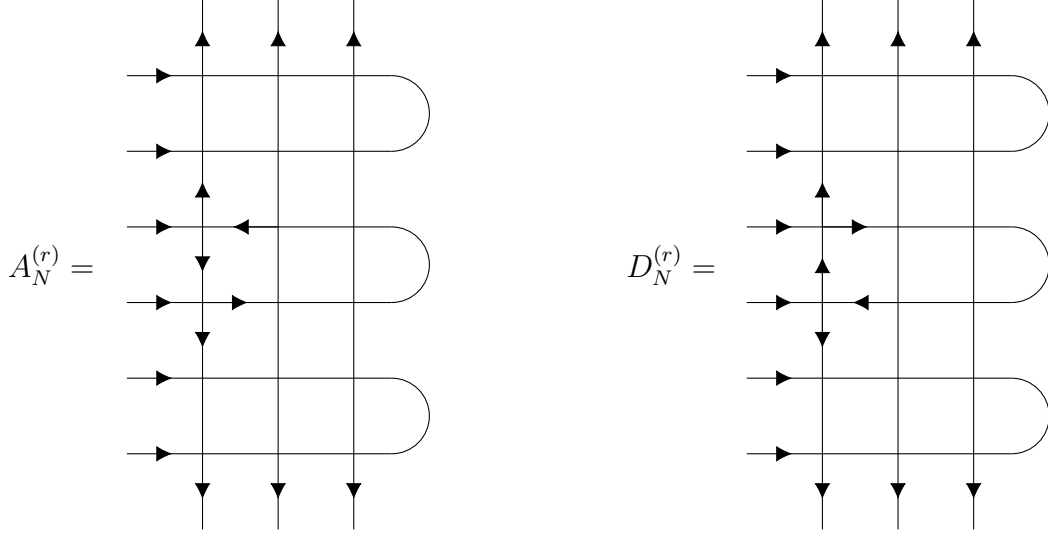


Figura 19 – As funções $A_N^{(r)}$ e $D_N^{(r)}$, com $N = r = 3$. Fonte: elaborada pela autora.

Agora, considere um modelo parcialmente heterogêneo, com parâmetros espectrais

$$\lambda_1 = \dots = \lambda_N = \lambda, \quad \mu_1 = \dots = \mu_{N-1} = \mu, \quad \mu_N = \mu + \omega. \quad (3.117)$$

A partir da Figura 19, podemos ver que

$$A_N^{(r)}(\lambda, \mu, \omega) = \left[\frac{a_+(\lambda, \mu + \omega)b_-(\lambda, \mu + \omega)}{a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)} \right]^{N-r} \left[\frac{a_-(\lambda, \mu + \omega)b_+(\lambda, \mu + \omega)}{a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)} \right]^{r-1} \times \frac{b_-(\lambda, \mu + \omega)}{b_-(\lambda, \mu)} A_N^{(r)}(\lambda, \mu), \quad (3.118)$$

$$D_N^{(r)}(\lambda, \mu, \omega) = \left[\frac{a_+(\lambda, \mu + \omega)b_-(\lambda, \mu + \omega)}{a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)} \right]^{N-r} \left[\frac{a_-(\lambda, \mu + \omega)b_+(\lambda, \mu + \omega)}{a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)} \right]^{r-1} \times \frac{b_+(\lambda, \mu + \omega)}{b_+(\lambda, \mu)} D_N^{(r)}(\lambda, \mu), \quad (3.119)$$

em que $A_N^{(r)}(\lambda, \mu)$ e $D_N^{(r)}(\lambda, \mu)$ compõem a função $H_N^{(r)}(\lambda, \mu)$ para o modelo homogêneo ($\omega = 0$). Uma vez que $\sum_{r=1}^N H_N^{(r)} = 1$, podemos relacionar os modelos parcialmente e totalmente homogêneo segundo

$$Z_N(\lambda, \mu, \omega) = \sum_{r=1}^N \left[\frac{b_-(\lambda, \mu + \omega)}{b_-(\lambda, \mu)} A_N^{(r)}(\lambda, \mu) + \frac{b_+(\lambda, \mu + \omega)}{b_+(\lambda, \mu)} D_N^{(r)}(\lambda, \mu) \right] \times \left[\frac{a_+(\lambda, \mu + \omega)b_-(\lambda, \mu + \omega)}{a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)} \right]^{N-r} \left[\frac{a_-(\lambda, \mu + \omega)b_+(\lambda, \mu + \omega)}{a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)} \right]^{r-1}. \quad (3.120)$$

No caso especial em que $\mu = 0$ e $\Delta = 0$ ($\eta = \pi/4$), podemos ignorar os índices \pm e a parametrização (3.9) se torna

$$a(\lambda) = \cos(\lambda), \quad b(\lambda) = \sin(\lambda), \quad c(\lambda) = 1. \quad (3.121)$$

Neste caso, a observação relevante é que podemos combinar as funções $Z_N(\lambda, \omega)$ e $Z_N(\lambda, \pi/2 - \omega)$, obtendo

$$\cos(\omega)Z_N(\lambda, \omega) - \sin(\omega)Z_N(\lambda, \pi/2 - \omega) = \cos(2\omega)Z_N(\lambda) \times \sum_{r=1}^N H_N^{(r)}(\lambda) \left[\frac{a(\lambda + \omega)b(\lambda - \omega)}{a(\lambda)b(\lambda)} \right]^{N-r} \left[\frac{a(\lambda - \omega)b(\lambda + \omega)}{a(\lambda)b(\lambda)} \right]^{r-1}, \quad (3.122)$$

que pode ser reescrita aplicando-se a definição (2.86),

$$\frac{a(\omega)Z_N(\lambda, \omega) - b(\omega)Z_N(\lambda, \pi/2 - \omega)}{a(2\omega)Z_N(\lambda)} = \left[\frac{a(\lambda + \omega)b(\lambda - \omega)}{a(\lambda)b(\lambda)} \right]^{N-1} h_N[\gamma(\omega)], \quad (3.123)$$

sendo

$$\gamma(\omega) = \frac{a(\lambda - \omega)b(\lambda + \omega)}{a(\lambda + \omega)b(\lambda - \omega)}. \quad (3.124)$$

De (3.123), vê-se que o comportamento assintótico de $h_N(z)$ é determinado uma vez conhecida a razão $Z_N(\lambda, \omega)/Z_N(\lambda)$ no limite em que $N \rightarrow \infty$. Usando (3.40) e (3.102), no caso geral em que $\mu \neq 0$ a razão entre as funções de partição se escreve

$$\frac{Z_N(\lambda, \mu, \omega)}{Z_N(\lambda, \mu)} = \frac{(N-1)! \kappa_-(\mu + \omega)}{[b(\omega)]^{N-1} \kappa_-(\mu)} \left[\frac{b(2\mu)}{b(2\mu + \omega)} \right]^{N-1} \times \left[\frac{a_+(\lambda, \mu + \omega)a_-(\lambda, \mu + \omega)b_+(\lambda, \mu + \omega)b_-(\lambda, \mu + \omega)}{a_+(\lambda, \mu)a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu)} \right]^N S_N(\mu, \omega), \quad (3.125)$$

em que

$$S_N(\mu, \omega) = \frac{\tilde{\tau}_N(\lambda, \mu, \omega)}{\tau_N(\lambda, \mu)}, \quad (3.126)$$

com $\tau_N(\lambda, \mu) = \det \bar{\mathbf{M}}$ (3.100), e

$$\tilde{\tau}_N = \det \tilde{\mathbf{M}}, \quad \tilde{\mathbf{M}}_{jk} = \begin{cases} \partial_\lambda^{j-1} \partial_\mu^{k-1} \psi(\lambda, \mu), & k \neq N \\ \partial_\lambda^{j-1} \psi(\lambda, \mu + \omega), & k = N \end{cases} \quad j, k = 1, \dots, N. \quad (3.127)$$

Vale ressaltar que λ é visto apenas como um parâmetro em $S_N(\mu, \omega)$. Com a finalidade de encontrar o limite assintótico de $S_N(\mu, \omega)$, buscaremos uma equação diferencial cuja solução é dada por esta razão de determinantes. Assim como no caso DWBC, o ponto de partida é aplicar a identidade de Sylvester (2.119) aos determinantes τ_{N+1} e $\tilde{\tau}_{N+1}$. Segue que

$$\tau_{N+1} = \frac{1}{\tau_{N-1}} \begin{vmatrix} \partial_{\lambda\mu}^2 \tau_N & \partial_\lambda \tau_N \\ \partial_\mu \tau_N & \tau_N \end{vmatrix} \implies \tau_{N+1} \tau_{N-1} = \tau_N \partial_{\lambda\mu}^2 \tau_N - (\partial_\lambda \tau_N)(\partial_\mu \tau_N), \quad (3.128)$$

$$\tilde{\tau}_{N+1} = \frac{1}{\tau_{N-1}} \begin{vmatrix} \partial_\lambda \tilde{\tau}_N & \partial_\lambda \tau_N \\ \tilde{\tau}_N & \tau_N \end{vmatrix} \implies \tilde{\tau}_{N+1} \tau_{N-1} = \tau_N \partial_\lambda \tilde{\tau}_N - \tilde{\tau}_N \partial_\lambda \tau_N, \quad (3.129)$$

$$\partial_\mu \tilde{\tau}_{N+1} = \partial_\omega \tilde{\tau}_{N+1} + \frac{1}{\tau_{N-1}} \begin{vmatrix} \partial_\lambda \tilde{\tau}_N & \partial_{\lambda\mu}^2 \tau_N \\ \tilde{\tau}_N & \partial_\mu \tau_N \end{vmatrix} \Rightarrow \partial_\mu \tilde{\tau}_{N+1} = \partial_\omega \tilde{\tau}_{N+1} + \frac{(\partial_\lambda \tilde{\tau}_N)(\partial_\mu \tau_N) - \tilde{\tau}_N \partial_{\lambda\mu}^2 \tau_N}{\tau_{N-1}}. \quad (3.130)$$

Usando as equações (3.128) e (3.129) para eliminar as derivadas em λ , bem como a definição (3.76), podemos colocar a equação (3.130) na forma

$$\partial_\mu S_N = \partial_\omega S_N + S_N \partial_\mu \left[\log \left(\frac{\tau_{N-1}}{\tau_N} \right) \right] - S_{N-1}. \quad (3.131)$$

Antes de propormos uma fórmula para $S_N(\mu, \omega)$, note que esta função satisfaz a condição de contorno

$$S_N(\mu, \omega) \sim \frac{\omega^{N-1}}{(N-1)!}, \quad \omega \rightarrow 0, \quad (3.132)$$

dado que $Z_N(\lambda, \mu, \omega)/Z_N(\lambda, \mu) \rightarrow 1$ conforme $\omega \rightarrow 0$ (veja (3.125)). Por outro lado, é sabido que τ_N tem comportamento exponencial [28]

$$\tau_N(\lambda, \mu) = C_N e^{2N^2 f(\lambda, \mu) + O(N)}, \quad (3.133)$$

sendo que

$$e^{4f(\lambda, \mu)} = -\frac{\pi^2}{\eta^2} \frac{\sin\left(\frac{\pi\lambda}{\eta}\right) \sin\left(\frac{\pi\mu}{\eta}\right)}{\left[\cos\left(\frac{\pi\mu}{\eta}\right) - \cos\left(\frac{\pi\lambda}{\eta}\right)\right]^2}. \quad (3.134)$$

Uma vez que os determinantes τ_N e $\tilde{\tau}_N$ diferem apenas por uma coluna, é plausível que o comportamento de $\tilde{\tau}_N$ seja similar ao de (3.133). Portanto, a razão S_N deve crescer exponencialmente de acordo

$$S_N(\mu, \omega) = \frac{e^{N\Omega(\mu, \omega) + o(N)}}{(N-1)!}. \quad (3.135)$$

Substituindo (3.135) em (3.131), obtemos a equação diferencial parcial

$$(\partial_\mu - \partial_\omega)\Omega(\mu, \omega) + 4\partial_\mu f(\lambda, \mu) + e^{-\Omega(\mu, \omega)} = 0, \quad (3.136)$$

cujas solução é dada por

$$e^{\Omega(\mu, \omega)} = 2e^{-4f(\lambda, \mu)} \partial_\lambda [f(\lambda, \mu + \omega) - f(\lambda, \mu)]. \quad (3.137)$$

Finalmente, ao substituir (3.137) em (3.125) e tomar $\mu = 0$, $\eta = \pi/4$, segue que

$$\frac{Z_N(\lambda, \omega)}{Z_N(\lambda)} = \frac{\kappa_-(\omega)}{[b(\omega)]^{2N}} \left[\frac{a(\lambda + \omega)a(\lambda - \omega)b(\lambda + \omega)b(\lambda - \omega)}{a^2(\lambda)b^2(\lambda)} \right]^N [g(\lambda, \omega)]^N, \quad (3.138)$$

para $N \gg 1$, sendo

$$g(\lambda, \omega) = \frac{1}{4} \frac{b^2(2\lambda)b^2(2\omega)}{b(2\lambda - 2\omega)b(2\lambda + 2\omega)}. \quad (3.139)$$

Por simplicidade, façamos o parâmetro da fronteira $\xi = \pi/2$, de maneira que $\kappa_{\pm}(\lambda) = \cos(\lambda)$. Com isto, ao substituir (3.138) em (3.123) e resolver para $h_N[\gamma(\omega)]$, obtemos

$$h_N[\gamma(\omega)] = \frac{1}{a(2\omega)} \left(\frac{a^2(\omega)}{[b(\omega)]^{2N}} - \frac{b^2(\omega)}{[a(\omega)]^{2N}} \right) \left[\frac{a(\lambda - \omega)b(\lambda + \omega)}{a(\lambda)b(\lambda)} g(\lambda, \omega) \right]^N. \quad (3.140)$$

Para garantir que os pesos de Boltzmann $a(\lambda \pm \omega)$, $b(\lambda \pm \omega)$ sejam reais e positivos na parametrização (3.121), os parâmetros λ e ω estão restritos aos intervalos

$$0 < \lambda \leq \frac{\pi}{4}, \quad -\lambda < \omega < \lambda. \quad (3.141)$$

Assim, $|\tan(\omega)| < 1$ e, conseqüentemente, $(b(\omega)/a(\omega))^{2(N+1)} \ll 1$ quando $N \gg 1$. Portanto,

$$h_N[\gamma(\omega)] \sim \frac{a^2(\omega)}{a(2\omega)} \left[\frac{a(\lambda - \omega)b(\lambda + \omega)g(\lambda, \omega)}{a(\lambda)b(\lambda)b^2(\omega)} \right]^N. \quad (3.142)$$

Tomando o logaritmo de (3.142) e o limite termodinâmico desta expressão, obtemos

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log h_N[\gamma(\omega)]}{N} = \log \left[\frac{a^2(\omega)a(\lambda)b(\lambda)}{a(\lambda + \omega)b(\lambda - \omega)} \right]. \quad (3.143)$$

4 Curvas árticas no regime desordenado

Neste Capítulo, abordaremos a questão da obtenção das curvas árticas para o modelo de seis vértices no regime desordenado, apresentando, em detalhes, dois métodos: o método da EFP [45] e o método da tangente [46]. Ambos os métodos foram desenvolvidos para o modelo de seis vértices com fronteira do tipo parede de domínio.

A ideia por trás do método da EFP é bastante intuitiva: visto que a correlação $F_N^{(r,s)}$ fornece a probabilidade de ter uma região ordenada no canto inferior direito da rede quadrada, no limite termodinâmico esta função deve valer 1 na região congelada e 0 em todo o restante. Assim, as coordenadas da rede nas quais ocorrem o comportamento degrau da EFP são as coordenadas da curva que separa esta região ordenada do interior desordenado (denotadas por O_{SE} e D , respectivamente, na Figura 20). No entanto, fazer o tratamento da EFP no limite termodinâmico e, a partir disto, obter as coordenadas espaciais onde esta função muda de valor é uma tarefa bastante complicada. Para o caso do modelo de seis vértices com fronteira parede de domínio, isto só é possível graças a representação integral (2.115).

Já o método da tangente foi motivado pela observação de que a curva ártica do modelo de seis vértices com fronteira parede de domínio é o envelope de uma família de linhas retas, determinada pela função geradora da correlação $H_N^{(r)}$. Usando a formulação do modelo em termos de caminhos (ver Figura 4) e fazendo uma pequena modificação na fronteira, cria-se uma perturbação na forma de um caminho aleatório direcionado que, no limite termodinâmico, torna-se uma linha reta que tangencia a curva ártica. Assim, uma vez encontrada a equação dessas retas, determina-se também a expressão analítica da curva ártica. Do ponto de vista da aplicabilidade, o método da tangente é mais abrangente do que o método da EFP – a princípio, pode ser aplicado em qualquer modelo que possa ser formulado em termos de caminhos na rede que não se intersectam. De fato, desde sua introdução, o método da tangente foi usado para reproduzir resultados conhecidos e prever novos, tanto para o modelo de seis vértices sob uma variedade de condições de contorno como também para outros modelos (veja por exemplo [67–71]).

No que segue, o limite termodinâmico deve ser entendido como a situação em que o número de linhas e colunas da rede tende a infinito ao mesmo tempo em que o espaçamento entre os vértices vai a zero, de modo que a área total da rede permaneça finita (limite contínuo). Veja as Figuras 20 e 21 para uma ilustração das redes com fronteira parede de domínio e reflexiva neste limite.

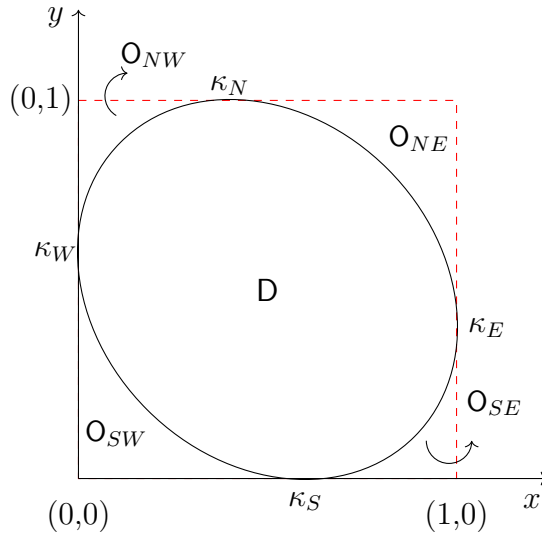


Figura 20 – Ilustração da rede com condição de contorno do tipo parede de domínio no regime $|\Delta| < 1$, no limite termodinâmico. Este é um esboço das curvas de separação entre as regiões O_{NW} , O_{NE} , O_{SW} e O_{SE} , que têm ordenamento ferroelétrico, e a região D , desordenada. Os pontos de contato da curva com as fronteiras superior, inferior, direita e esquerda são denotados por κ_i , com $i = N, S, E, W$, respectivamente. A área da rede é escalada para que seja igual a 1. Fonte: elaborada pela autora.

A curva ártica Γ do modelo com fronteira DWBC é a união das curvas

$$\Gamma = \Gamma_{NW} \cup \Gamma_{NE} \cup \Gamma_{SW} \cup \Gamma_{SE}, \quad (4.1)$$

em que Γ_i é a curva que separa as regiões O_i e D , $i = NW, NE, SW, SE$. Graças às simetrias do sistema, é necessário obter apenas uma delas. Considere os pesos w_1, w_2, w_3, w_4, w_5 e w_6 introduzidos na Seção 1. Veja que a reflexão das setas com respeito a vertical ou horizontal troca $a \leftrightarrow b$, pois

$$w_1 \leftrightarrow w_4, \quad w_2 \leftrightarrow w_3, \quad (4.2)$$

para reflexão com relação a vertical, e

$$w_1 \leftrightarrow w_3, \quad w_2 \leftrightarrow w_4, \quad (4.3)$$

com respeito a horizontal. Por outro lado, a reflexão pela diagonal mantém os pesos:

$$w_1 \leftrightarrow w_2, \quad w_3 \leftrightarrow w_4. \quad (4.4)$$

Com isto, se a porção $\Gamma_{SE}(\xi) = (x_{SE}, y_{SE}; \xi)$ da curva é descrita pelas coordenadas paramétricas

$$x_{SE} = x(\xi; \lambda), \quad y_{SE} = y(\xi; \lambda), \quad \xi \in [0, \xi_0], \quad (4.5)$$

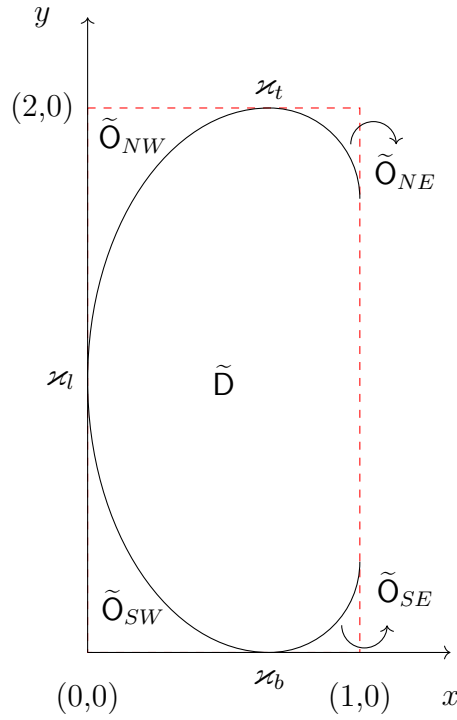


Figura 21 – Ilustração da rede com uma extremidade reflexiva no regime $|\Delta| < 1$, no limite termodinâmico, reescalada para um retângulo de dimensões 2×1 . Este esboço representa as curvas árticas que separam as regiões ferroelétricas \tilde{O}_{NW} , \tilde{O}_{SW} e antiferroelétricas \tilde{O}_{NE} , \tilde{O}_{SE} da região central desordenada \tilde{D} . κ_i , $i = l, t, b$ são os pontos de contato com as fronteiras esquerda, superior e inferior, respectivamente. Este esboço foi feito com base nos resultados numéricos de [61]. Na situação em que $a = b$, $c = 1$, espera-se que as regiões \tilde{O}_{NE} e \tilde{O}_{SE} sejam suprimidas. Fonte: elaborada pela autora.

sendo $\xi_0 \equiv \xi_0(\lambda)$ tal que

$$x(0) = \kappa_S, \quad y(0) = 0, \quad x(\xi_0) = 1, \quad y(\xi_0) = \kappa_E, \quad (4.6)$$

as demais porções da curva são obtidas desta pelas relações

$$\Gamma_{SW}(\xi) = (x_{SW}, y_{SW}; \xi) = (1 - x(\xi; \pi - \lambda), y(\xi; \pi - \lambda)), \quad (4.7)$$

$$\Gamma_{NE}(\xi) = (x_{NE}, y_{NE}; \xi) = (x(\xi; \pi - \lambda), y(\xi; \pi - \lambda)), \quad (4.8)$$

$$\Gamma_{NW}(\xi) = (x_{NW}, y_{NW}; \xi) = (1 - x(\xi; \lambda), 1 - y(\xi; \lambda)). \quad (4.9)$$

Consequentemente, se $\kappa_E \equiv \kappa$, segue que $\kappa_W = 1 - \kappa$. Pela simetria com respeito a diagonal, $\kappa_N = \kappa_E = \kappa$, $\kappa_S = \kappa_W = 1 - \kappa$. Logo, para determinar toda a curva e os quatro pontos de contato, basta encontrar Γ_{SE} e κ_E .

Analogamente, a curva ártica do modelo com condição de contorno reflexiva será a união das curvas

$$\tilde{\Gamma} = \tilde{\Gamma}_{NW} \cup \tilde{\Gamma}_{NE} \cup \tilde{\Gamma}_{SW} \cup \tilde{\Gamma}_{SE}. \quad (4.10)$$

Entretanto, da Figura 10 pode-se ver que não existem operações de simetria que levem os pesos do lado esquerdo ao direito em virtude dos vértices κ_{\pm} . Com isto, se determinarmos, por exemplo, a curva $\tilde{\Gamma}_{NW}(\omega) = (x(\omega; \lambda, \mu), y(\omega; \lambda, \mu))$, temos acesso também à porção $\tilde{\Gamma}_{SW}(\omega) = (x(\omega; \lambda, \mu), 2 - y(\omega; \lambda, -\mu))$, mas não ao restante.

4.1 Pontos de contato

Antes de abordar diretamente a questão da obtenção da curvas árticas, vamos determinar a posição dos pontos de contato, seguindo as referências [45] e [52] no que diz respeito às fronteiras DWBC e RE, respectivamente.

A região O_{SE} é preenchida por vértices w_2 (Fig. 3) e, ao passarmos por $(x, y) = (1, \kappa)$, há inversão das setas na vertical, sendo a região O_{NE} preenchida por vértices w_4 . Agora, lembre-se que a função de correlação (2.23) é a probabilidade de o estado da aresta na primeira coluna entre as linhas r e $r + 1$ seja uma seta para baixo – com isto, no limite termodinâmico, esta função admite um comportamento do tipo degrau:

$$G_{DW}(y) = \begin{cases} 1, & 0 \leq y_{DW} < \kappa, \\ 0, & \kappa < y_{DW} \leq 1, \end{cases} \quad y_{DW} = \frac{N - r}{N}, \quad y_{DW} \in [0, 1]. \quad (4.11)$$

em que $G(y) = \lim_{r, N \rightarrow \infty} G_N^{(r)}$, com “DW” indicando as quantidades relativas ao modelo com condição DWBC. Para o caso reflexivo, pouca coisa muda: \tilde{O}_{NW} e \tilde{O}_{SW} são, respectivamente, preenchidas por vértices w_1 e w_3 , de maneira que o valor assintótico de (3.48) salta de 0 para 1 no ponto de contato \varkappa_l com a fronteira do lado esquerdo:

$$G_{RE}(y) = \begin{cases} 1, & 0 \leq y_{RE} < \varkappa_l, \\ 0, & \varkappa_l < y_{RE} \leq 2, \end{cases} \quad y_{RE} = \frac{2(N - r)}{N}, \quad y_{RE} \in [0, 2], \quad (4.12)$$

sendo “RE” correspondente às funções do modelo com fronteira reflexiva.

O comportamento degrau (4.11), bem como (4.12) podem ser extraídos da representação integral (2.88) via método do ponto de sela, discutido no Apêndice B. Como a análise dos dois casos é completamente análoga, omitiremos os índices DW, RE no que segue sempre que for possível.

Primeiro, colocamos o integrando (2.88) na forma

$$e^{N\vartheta(z)} = \frac{h_N(z)}{(z - 1)z^r}, \quad (4.13)$$

então, nos limites $r, N \rightarrow \infty$,

$$\vartheta(z) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log h_N(z)}{N} - (1 - y) \log z, \quad (4.14)$$

sendo $y = y_{\text{DW}}$ ($y = y_{\text{RE}}/2$) no caso DWBC (RE). Por (B.2), o ponto de sela z_0 é a solução da equação

$$-\frac{1-y}{z_0} + \frac{d}{dz} \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log h_N(z)}{N} \right]_{z=z_0} = 0. \quad (4.15)$$

Note que os únicos resultados relativos ao limite assintótico de $h_N(z)$ são (2.133), com $z = \tilde{\gamma}(\xi)$ (Eq. (2.98)) no caso DWBC e (3.143), com $z = \gamma(\omega)$ (Eq. (3.124)) no caso RE. Em ambas as situações, z é real e positivo, e assim o manteremos na análise a seguir.

Por (B.8), o valor assintótico da integral será

$$\oint_{C_0} \frac{h_N(z)}{(z-1)z^r} dz \approx \left[\frac{2\pi}{N|\vartheta''(z_0)|} \right]^{1/2} e^{N\vartheta(z_0)} \rightarrow 0 \quad \text{conforme} \quad N \rightarrow \infty, \quad (4.16)$$

em que C_0 é o contorno deformado.

Se $z_0 < 1$, ao deformarmos o contorno de integração C a fim de passar pelo ponto de sela, podemos ignorar a singularidade em $z = 1$. Com isto, a integral sobre C_0 e C são iguais, o que leva a $G(y) = 0$. Contudo, se $z_0 > 1$, necessariamente o contorno deformado envolverá a singularidade $z = 1$. Neste caso, a integral sobre C_0 é (2.88) mais a contribuição do polo em $z = 1$, isto é,

$$\oint_{C_0} \frac{h_N(z)}{(z-1)z^r} dz = \oint_C \frac{h_N(z)}{(z-1)z^r} dz + \oint_{C_1} \frac{h_N(z)}{(z-1)z^r} dz = 0, \quad N \rightarrow \infty, \quad (4.17)$$

em que C_1 é um contorno fechado no sentido anti-horário que envolve somente a singularidade em $z = 1$. Por causa de (4.16), a equação acima implica

$$\oint_C \frac{h_N(z)}{(z-1)z^r} dz = - \oint_{C_1} \frac{h_N(z)}{(z-1)z^r} dz = -2\pi i \lim_{z \rightarrow 1} \frac{(z-1)h_N(z)}{(z-1)z^r} = -2\pi i, \quad (4.18)$$

pois $h_N(1) = \sum_{r=1}^N H_N^{(r)} = 1$. Com isto, $G(y) = 1$ se $z_0 > 1$. Portanto, $G(y)$ salta de 0 para 1 em $z_0 = 1$.

Fazendo $z = \tilde{\gamma}(\xi)$, o ponto de contato da curva com a fronteira no caso DWBC corresponde a $\xi_0 = 0$. Substituindo (2.98) e (2.133) em (4.15) e resolvendo $y_{\text{DW}} = \kappa$, segue que

$$\kappa = \frac{\nu \cot[\nu(\lambda - \eta)] - \cot(\lambda + \eta)}{\cot(\lambda - \eta) - \cot(\lambda + \eta)}. \quad (4.19)$$

Já no caso da fronteira reflexiva, a equação (4.15) fornece somente o ponto de contato com a fronteira do lado esquerdo, dada a falta de simetria do modelo. Tomando agora $z = \gamma(\omega)$, substituindo (3.124) e (3.143) em (4.15), aplicando em $\eta = \pi/4$ e resolvendo para $y_{\text{RE}} = \varkappa \equiv \varkappa$, obtemos

$$\varkappa = 2 \left[1 - (1 - \sin(2\lambda) \tan \omega) \frac{\cos(\lambda + \omega) \sin(\lambda - \omega)}{\sin(2\lambda) \cos(2\omega)} \right]_{\omega=0} = 1. \quad (4.20)$$

4.2 Método da EFP

Nesta Seção, vamos derivar expressões analíticas para as coordenadas paramétricas da curva ártica do modelo de seis vértices com condição de contorno parede de domínio, no regime desordenado, reproduzindo resultados de [45]. Como mencionado acima, $F_N^{(r,s)}$ (2.52) se comporta como uma função degrau no limite termodinâmico, valendo 1 na região ordenada \mathcal{O}_{SE} e 0 em todo o restante da rede:

$$\lim_{r,s,N \rightarrow \infty} F_N^{(r,s)} = F(x) = \begin{cases} 1, & (x, y) \in \mathcal{O}_{SE}, \\ 0, & (x, y) \notin \mathcal{O}_{SE}, \end{cases} \quad x = \frac{N-s}{N}, \quad y = \frac{N-r}{N}, \quad x, y \in [0, 1]. \quad (4.21)$$

Queremos estender a análise da integral (2.88), feita na Subseção 4.1, para o caso mais geral (2.115). O ponto de partida é substituir o integrando por $\exp[N\vartheta(z_1, \dots, z_s)]$, tal que

$$N\vartheta(z_1, \dots, z_s) = \sum_{j=2}^s \sum_{i=1}^{j-1} 2 \log(z_j - z_i) + \sum_{j=1}^s \left[(s-1) \log[(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1] - r \log z_j - s \log(z_j - 1) \right] + \log[h_{N,s}(z_1, \dots, z_s)] + \log[h_{s,s}(u_1, \dots, u_s)], \quad (4.22)$$

lembrando que

$$t = \frac{\sin(\lambda - \eta)}{\sin(\lambda + \eta)}, \quad \Delta = \cos(2\eta). \quad (4.23)$$

Derivando (4.22) com respeito a z_j , $j = 1, \dots, s$, e igualando a zero, obtemos as equações do ponto de sela:

$$\begin{aligned} & \frac{(s-1)(t^2 - 2t\Delta)}{(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1} - \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^s \left[\frac{2}{z_i - z_j} + \frac{t^2 z_i - 2t\Delta}{t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_j + 1} + \frac{t^2 z_i}{t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_i + 1} \right] - \frac{s}{z_j - 1} - \\ & - \frac{r}{z_j} + \frac{\partial}{\partial z_j} \log[h_{N,s}(z_1, \dots, z_s)] - \left[\frac{t^2 - 2t\Delta + 1}{((t^2 - 2t\Delta)z_j + 1)^2} \right] \frac{\partial}{\partial u_j} \log[h_{s,s}(u_1, \dots, u_s)] = 0. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Note que estas equações dependem de r e s , que, por sua vez, são funções das coordenadas da rede (x, y) no limite termodinâmico. Conforme mencionado anteriormente, é de (4.24) que obteremos a curva Γ_{SE} , sob a hipótese de que quase todas as raízes se condensam no mesmo valor – no caso, 1. De acordo com [45], a condensação de raízes é uma consequência de duas características do integrando (2.115):

1. o polo em $z = 1$ é de ordem s em todas as variáveis de integração z_1, \dots, z_s ;
2. o resíduo calculado sobre todas as variáveis de integração no ponto $z = 1$ é 1.

A afirmação do item 1 segue diretamente da representação (2.115) para a EFP. Por outro lado, para verificarmos o item 2, considere a versão não simetrizada de $F_N^{(r,s)}$, dada pela (2.90). Eliminando \tilde{z}_j através de (2.92) e usando a definição (2.97), segue que

$$F_N^{(r,s)} = \left(-\frac{1}{2\pi i}\right)^s \oint_C \cdots \oint_C \prod_{j=1}^s \frac{[(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1]^{s-j}}{z_j^r (z_j - 1)^{s-j+1}} \prod_{1 \leq i < j \leq s} \frac{z_i - z_j}{t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_i + 1} \times \\ \times h_{N,s}(z_1, \dots, z_s) dz_1 \dots dz_s. \quad (4.25)$$

Seja $\widehat{F}_N^{(r,s)}$ a mesma integral múltipla que $F_N^{(r,s)}$, diferindo apenas pelos contornos de integração,

$$\widehat{F}_N^{(r,s)} = \left(-\frac{1}{2\pi i}\right)^s \oint_{C_1^-} \cdots \oint_{C_1^-} \prod_{j=1}^s \frac{[(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1]^{s-j}}{z_j^r (z_j - 1)^{s-j+1}} \prod_{1 \leq i < j \leq s} \frac{z_i - z_j}{t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_i + 1} \times \\ \times h_{N,s}(z_1, \dots, z_s) dz_1 \dots dz_s, \quad (4.26)$$

em que $C_1^- = -C_1$ é orientado no sentido horário e envolve somente as singularidades $z_j = 1$, $j = 1, \dots, s$. Agora, vamos separar os fatores que levam a variável z_s , ou seja,

$$\widehat{F}_N^{(r,s)} = \left(-\frac{1}{2\pi i}\right)^s \oint_{C_1^-} \cdots \oint_{C_1^-} \prod_{j=1}^{s-1} \frac{[(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1]^{s-j}}{z_j^r (z_j - 1)^{s-j+1}} \times \\ \times \prod_{1 \leq i < j \leq s-1} \frac{z_i - z_j}{t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_i + 1} dz_1 \dots dz_{s-1} \oint_{C_1^-} \prod_{j=1}^{s-1} \frac{z_j - z_s}{t^2 z_s z_j - 2t\Delta z_j + 1} \frac{h_{N,s}(z_1, \dots, z_s)}{z_s^r (z_s - 1)} dz_s. \quad (4.27)$$

Por (2.86) e (2.97), a função $h_{N,s}(z_1, \dots, z_s)$ é um polinômio de grau $N - 1$ em cada um de seus argumentos. Portanto, exceto pelo fator $(z_s - 1)^{-1}$, que tem um polo simples em $z_s = 1$, o integrando na variável z_s é uma função analítica. Pelo teorema dos resíduos,

$$\oint_{C_1^-} \prod_{j=1}^{s-1} \frac{z_j - z_s}{t^2 z_s z_j - 2t\Delta z_j + 1} \frac{h_{N,s}(z_1, \dots, z_s)}{z_s^r (z_s - 1)} dz_s = -2\pi i \prod_{j=1}^{s-1} \frac{z_j - 1}{(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1} h_{N,s}(z_1, \dots, z_{s-1}, 1). \quad (4.28)$$

Veja que, por (2.97), se fizermos $z_s = 1$ em $h_{N,s}(z_1, \dots, z_s)$ todos os elementos da última coluna do determinante se anulam, exceto por $h_{N-s+1}(1) = 1$. Logo, ao desenvolver o determinante pela última coluna, obtém-se a recorrência

$$h_{N,s}(z_1, \dots, z_{s-1}, 1) = h_{N,s-1}(z_1, \dots, z_{s-1}). \quad (4.29)$$

Com isto,

$$\widehat{F}_N^{(r,s)} = \left(-\frac{1}{2\pi i}\right)^{s-1} \oint_{C_1^-} \cdots \oint_{C_1^-} \prod_{j=1}^{s-1} \frac{[(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1]^{s-j-1}}{z_j^r (z_j - 1)^{s-j}} \times \\ \times \prod_{1 \leq i < j \leq s-1} \frac{z_i - z_j}{t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_i + 1} dz_1 \dots dz_{s-1}. \quad (4.30)$$

Repetindo o procedimento para as variáveis z_{s-1}, \dots, z_2 , uma a uma, o que resta é

$$\widehat{F}_N^{(r,s)} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{C_1^-} \frac{h_{N,1}(z_1)}{z_1^r(z_1-1)} dz_1 = 1, \quad (4.31)$$

de acordo com (4.18).

Agora, vamos supor que parte das raízes das equações (4.24) se condensam em $z = 1$. Sejam n_c e n_u sejam o número de raízes condensadas e não condensadas, respectivamente, tal que

$$\frac{n_c}{s} \sim 1, \quad \frac{n_u}{s} \sim 0, \quad s \sim N \rightarrow \infty. \quad (4.32)$$

Vamos avaliar cada termo das equações (4.24) nas condições (4.32). Começando pelo somatório,

$$\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^s \left[\frac{2}{z_i - z_j} + \frac{t^2 z_i - 2t\Delta}{t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_j + 1} + \frac{t^2 z_i}{t^2 z_i z_j - 2t\Delta z_i + 1} \right] \sim \frac{2s}{1 - z_j} + \frac{(t^2 - 2t\Delta)s}{(t^2 - 2t\Delta)z_j + 1} + \frac{st^2}{t^2 z_j - 2t\Delta + 1}. \quad (4.33)$$

Em seguida, passamos aos logaritmos. Aplicando sucessivamente a relação de recorrência (4.29), encontraremos

$$h_{N,s}(z_1, \dots, z_{n_u}, 1, \dots, 1) = h_{N,n_u}(z_1, \dots, z_{n_u}), \quad (4.34)$$

que, por sua vez, é explicitamente escrito como

$$h_{N,n_u}(z_1, \dots, z_{n_u}) = \prod_{1 \leq i < j \leq n_u} \frac{1}{z_j - z_i} \prod_{j=1}^{n_u} (z_j - 1)^{n_u-1} h_N(z_j) \times \left| \begin{array}{ccc} \left(\frac{z_1}{z_1-1}\right)^{n_u-1} \frac{h_{N-n_u+1}(z_1)}{h_N(z_1)} & \dots & \left(\frac{z_{n_u}}{z_{n_u}-1}\right)^{n_u-1} \frac{h_{N-n_u+1}(z_{n_u})}{h_N(z_{n_u})} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{z_1}{z_1-1}\right) \frac{h_{N-1}(z_1)}{h_N(z_1)} & \dots & \left(\frac{z_{n_u}}{z_{n_u}-1}\right) \frac{h_{N-1}(z_{n_u})}{h_N(z_{n_u})} \\ 1 & \dots & 1 \end{array} \right|. \quad (4.35)$$

Uma vez que $N \gg n_u$, $h_{N-n_u+j}/h_N \sim 1$. Com isto, o determinante é, aproximadamente, uma razão de polinômios de grau $n_u - 1$ em qualquer uma das variáveis z_1, \dots, z_{n_u} , o que é desprezível no limite $s, N \rightarrow \infty$ (comparado a N). Assim, tomando o logaritmo de (4.35) e retendo apenas o termo dominante,

$$\log[h_{N,n_u}(z_1, \dots, z_{n_u})] \sim \sum_{j=1}^{n_u} \log h_N(z_j). \quad (4.36)$$

Para avaliar $h_{s,s}(u_1, \dots, u_{n_u})$, vamos buscar uma fórmula de recorrência envolvendo $h_{N,s}(u_1, \dots, u_s, 0)$, uma vez que $z_j = 1$ corresponde a $u_j = 0$. Fazendo $u_s = 0$ em (2.97) e simplificando, obtemos

$$h_{N,s}(u_1, \dots, u_{s-1}, 0) = h_N(0)h_{N-1,s-1}(u_1, \dots, u_{s-1}). \quad (4.37)$$

Consequentemente,

$$h_{s,s}(u_1, \dots, u_{n_u}, 0, \dots, 0) = \prod_{j=n_u+1}^s h_j(0)h_{n_u, n_u}(u_1, \dots, u_{n_u}), \quad (4.38)$$

o que implica

$$\log[h_{s,s}(u_1, \dots, u_{n_u}, 0, \dots, 0)] = \sum_{j=n_u+1}^s \log h_j(0) + \log[h_{n_u, n_u}(u_1, \dots, u_{n_u})], \quad (4.39)$$

cujas derivadas com relação a u_j é desprezível em comparação a N .

Com as considerações acima, ao dividirmos as equações (4.24) por N e colocarmos $s = N(1-x)$, $r = N(1-y)$, obtemos n_u equações do ponto de sela, idênticas e desacopladas:

$$\frac{1-y}{z} - \frac{1-x}{z-1} \left[\frac{t^2 - 2\Delta t + 1}{t^2 z - 2\Delta t + 1} \right] - \frac{d}{dz} \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log h_N(z)}{N} \right] = 0. \quad (4.40)$$

Seja $z = \tilde{\gamma}(\xi)$ (2.98). Após um cálculo extenso, no qual aplicamos (2.133), a equação acima se torna

$$y\varphi(\xi + \lambda) + (1-x)\varphi(\xi + \eta) - \Psi(\xi) = 0, \quad (4.41)$$

em que

$$\Psi(\xi) = \cot \xi - \cot(\lambda + \xi + \eta) - \nu \cot(\nu\xi) + \nu \cot[\nu(\lambda + \xi - \eta)], \quad (4.42)$$

sendo $\varphi(\lambda)$ é dado pela (2.10) e ν pela (2.130). Vamos definir $\tilde{\Psi}(\xi) = y\varphi(\xi + \lambda) + (1-x)\varphi(\xi + \eta) - \Psi(\xi)$. Para encontrarmos as coordenadas (x, y) sobre a curva Γ_{SE} , exigiremos que ξ é tal que

$$\tilde{\Psi}(\xi) = \tilde{\Psi}'(\xi) = 0, \quad (4.43)$$

e resolveremos as equações resultantes para x e y . Segue que

$$x(\xi) = 1 - \frac{\partial_\xi \Psi(\xi)\varphi(\xi + \lambda) - \Psi(\xi)\partial_\xi \varphi(\xi + \lambda)}{\varphi(\xi + \lambda)\partial_\xi \varphi(\xi + \eta) - \varphi(\xi + \eta)\partial_\xi \varphi(\xi + \lambda)}, \quad (4.44)$$

$$y(\xi) = \frac{\Psi(\xi)\partial_\xi \varphi(\xi + \eta) - \partial_\xi \Psi(\xi)\varphi(\xi + \eta)}{\varphi(\xi + \lambda)\partial_\xi \varphi(\xi + \eta) - \varphi(\xi + \eta)\partial_\xi \varphi(\xi + \lambda)}, \quad (4.45)$$

Note que como $\Psi(\xi) = \Psi(\pi - \lambda - \eta - \xi)$ e $\varphi(\pi - \lambda) = \varphi(\lambda)$, $x(\xi)$ pode ser obtido de $y(\xi)$ e vice-versa através da translação $\xi \rightarrow \pi - \lambda - \eta - \xi$. Explicitamente, (4.44) e (4.45) são

dados por

$$\begin{aligned}
x(\xi) = & 1 - \frac{\sin^2(\xi) \sin^2(\xi + 2\eta) \sin(\lambda + \xi - \eta) \sin(\lambda + \xi + \eta)}{\sin(2\eta) \sin(\lambda - \eta) [\sin(\lambda + \xi - \eta) \sin(\xi) + \sin(\lambda + \xi + \eta) \sin(\xi + 2\eta)]} \times \\
& \times \left[\frac{\sin(\lambda + \eta) \sin(\lambda - \eta)}{\sin^2(\xi) \sin(\lambda + \xi + \eta) \sin(\lambda + \xi - \eta)} - \frac{\nu^2 \sin[\nu(\lambda - \eta)] \sin[\nu(\lambda + 2\xi - \eta)]}{\sin^2(\nu\xi) \sin^2[\nu(\lambda + \xi - \eta)]} + \right. \\
& \left. + \frac{\nu \sin(2\xi + 2\lambda) \sin[\nu(\lambda - \eta)]}{\sin(\lambda + \xi + \eta) \sin(\lambda + \xi - \eta) \sin(\nu\xi) \sin[\nu(\lambda + \xi - \eta)]} \right], \quad (4.46)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y(\xi) = & \frac{\sin(\xi) \sin(\xi + 2\eta) \sin^2(\lambda + \xi - \eta) \sin^2(\lambda + \xi + \eta)}{\sin(2\eta) \sin(\lambda - \eta) [\sin(\lambda + \xi - \eta) \sin(\xi) + \sin(\lambda + \xi + \eta) \sin(\xi + 2\eta)]} \times \\
& \times \left[\frac{\sin(\lambda + \eta) \sin(\lambda - \eta)}{\sin(\xi) \sin(\xi + 2\eta) \sin^2(\lambda + \xi + \eta)} + \frac{\nu^2 \sin[\nu(\lambda - \eta)] \sin[\nu(\lambda + 2\xi - \eta)]}{\sin^2(\nu\xi) \sin^2[\nu(\lambda + \xi - \eta)]} - \right. \\
& \left. - \frac{\nu \sin(2\xi + 2\eta) \sin[\nu(\lambda - \eta)]}{\sin(\xi) \sin(\xi + 2\eta) \sin(\nu\xi) \sin[\nu(\lambda + \xi - \eta)]} \right]. \quad (4.47)
\end{aligned}$$

Os pontos de contato com os eixos x e y correspondem aos limites $\xi \rightarrow 0$ e $\xi \rightarrow \pi - \lambda - \eta$. De fato, diretamente de (4.46) e (4.47),

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} x(\xi) = 1, \quad \lim_{\xi \rightarrow 0} y(\xi) = \kappa, \quad \lim_{\xi \rightarrow \pi - \lambda - \eta} x(\xi) = 1 - \kappa, \quad \lim_{\xi \rightarrow \pi - \lambda - \eta} y(\xi) = 0. \quad (4.48)$$

4.3 Método da tangente

4.3.1 Fronteira parede de domínio

Agora, vamos apresentar o método da tangente como originalmente formulado, no trabalho [46]. No que segue, adotaremos a representação em termos de caminhos para o modelo de seis vértices, cujas configurações permitidas estão ilustradas na Figura 4. Como consequência da regra do gelo, os estados permitidos para o modelo são caracterizados por caminhos na rede que não se intersectam. Estes caminhos são direcionados, no sentido em que se seguirmos um deles para a direita ou para cima, não encontraremos nenhum passo para a esquerda ou para baixo. É importante notar também que, se adotarmos condições de contorno fixas, todos os caminhos deverão começar em um lado da rede e terminar em outro, isto é, não há caminhos interrompidos em configurações válidas.

Em particular, para a fronteira parede de domínio da Figura 10, cada configuração válida tem N caminhos que começam na parte de baixo da rede e terminam do lado direito da fronteira, como ilustrado na Figura 22.

Agora, façamos uma pequena modificação na rede, excluindo a sua N -ésima coluna. Com isto, se quisermos manter os estados das arestas nas fronteiras superior, direita e inferior, devemos inverter o estado de uma delas na borda esquerda, por conservação dos caminhos. Isto está ilustrado na Figura 23. Assim, as configurações permitidas neste

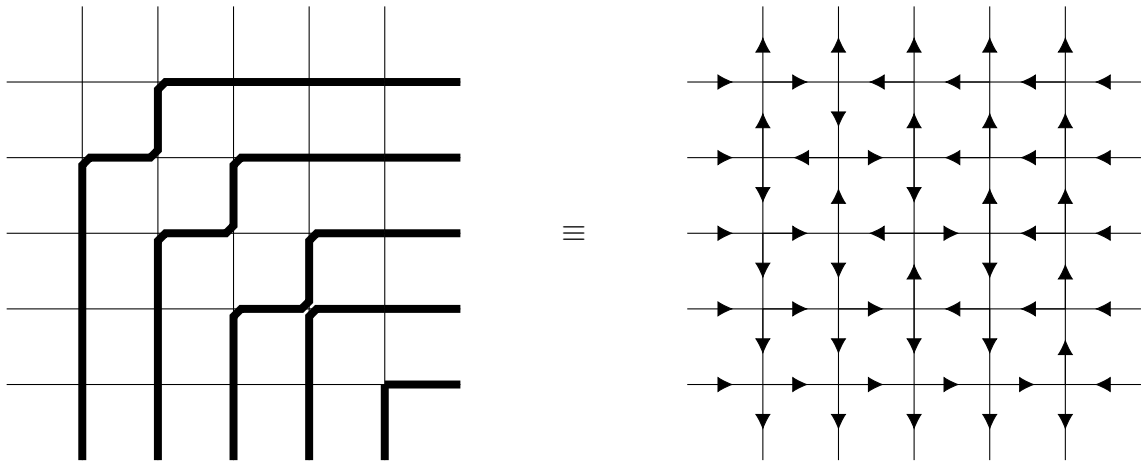


Figura 22 – Exemplo de configuração permitida na representação de linhas e seu equivalente em termos de setas. Fonte: elaborada pela autora.

retângulo são marcadas por $N - 1$ caminhos que começam na borda inferior e um que parte da borda esquerda, todos terminando na fronteira direita. É razoável esperar que, no limite termodinâmico, a região desordenada gerada por $N - 1$ caminhos é delimitada pela mesma curva que a região gerada por N , sendo que o N -ésimo caminho se torna uma linha reta que cruza o eixo y em k/N e é tangente a curva de separação de fases em algum ponto. O método da tangente é apoiado nesta suposição [46].

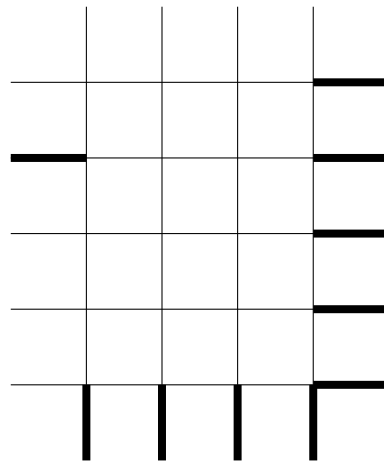


Figura 23 – Rede retangular com fronteira DWBC exceto pela linha espessa na borda esquerda, na posição k . Fonte: elaborada pela autora.

Mais geralmente, considere uma rede retangular com N linhas e $N + L$ colunas, $L \in \mathbb{N}$, com a seguinte condição de contorno: setas saindo por todas as arestas na fronteira de cima, bem como pela primeira e pelas $N - 1$ últimas da fronteira de baixo, e entrando por todas as demais. Fixemos a origem na intersecção da N -ésima coluna com a primeira linha (contando de baixo para cima). Podemos considerar dois domínios: $\tilde{\Lambda}_k^{(l)}$, formado pelas $L + 1$ primeiras colunas e N linhas, e $\tilde{\Lambda}_k^{(r)}$, formado pelas $N - 1$ últimas colunas, com $k = N - r + 1$. Veja a Figura 24(a) para uma representação desta condição de contorno

descrita em termos de caminhos. Com tais condições de contorno, as configurações do

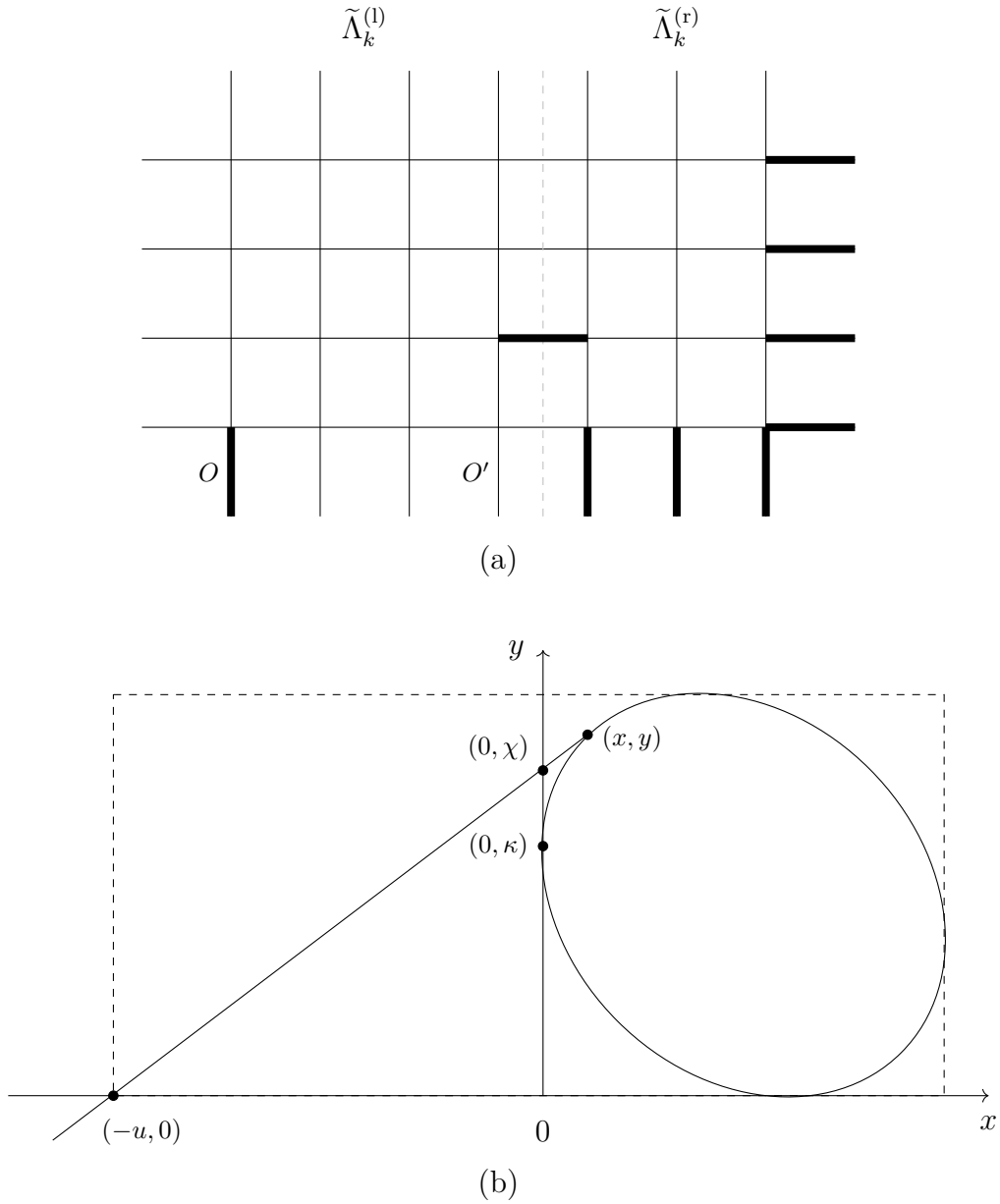


Figura 24 – (a) Rede estendida para aplicação do método da tangente no modelo de seis vértices com condição de contorno parede de domínio. (b) Limite contínuo da rede estendida. Fonte: elaborada pela autora.

domínio $\tilde{\Lambda}_k^{(l)}$ são caracterizadas por um único caminho orientado que parte da primeira aresta vertical da borda inferior e sai por alguma aresta horizontal na divisão entre os dois domínios, na posição $k \in [1, N]$. Já os estados do domínio $\tilde{\Lambda}_k^{(r)}$ são os da rede modificada que mencionamos acima, com $N - 1$ caminhos que saem da base inferior e chegam a fronteira direita. Nesta situação, supõe-se que no limite termodinâmico ($r, N, L \rightarrow \infty$):

1. A região desordenada do domínio $\tilde{\Lambda}_k^{(r)}$, determinada por $N - 1$ caminhos, é delimitada pela mesma curva ártica do que o modelo de seis vértices com fronteira DWBC

definido em uma rede $N \times N$;

2. O caminho direcionado do domínio $\tilde{\Lambda}_k^{(l)}$ se torna uma linha reta que cruza o eixo y em $(0, k/N)$ e o eixo x em $(-L/N, 0)$, com respeito a origem O' , e tangencia a porção Γ_{NW} da curva ártica em (x, y) . A partir deste ponto, espera-se que esta reta se encurve de acordo com o formato da curva ártica, já que não pode entrar na região desordenada.

Uma vez que os vértices deste domínio são os mesmos que os da região O_{NW} , é plausível afirmar que esta reta não muda de inclinação ao cruzar a interface entre os domínios $\tilde{\Lambda}_k^{(l)}$ e $\tilde{\Lambda}_k^{(r)}$.

Esta descrição está ilustrada na Figura 24(b). Definindo $u = L/N$, $\chi = k/N$, a equação desta reta se escreve

$$U_u(x, y; z) = y - \frac{\chi(z)}{u(z)}x - \chi(z) = 0. \quad (4.49)$$

Variando L , ou seja, u , obtemos uma família de linhas retas tangentes à mesma porção da curva ártica. Em outras palavras, a curva Γ_{NW} é o envelope desta família de curvas, cujas coordenadas paramétricas $(x(z), y(z))$ são solução do sistema de equações [72]

$$U_u(x, y; z) = 0, \quad \frac{d}{dz}U_u(x, y; z) = 0. \quad (4.50)$$

Assim, para encontrarmos a curva ártica, basta determinarmos χ/u e χ . Para isto, vamos estudar a função de partição da rede estendida (Fig. 24) no limite termodinâmico.

A função de partição da rede estendida é a soma do produto das funções de partição dos domínios $\tilde{\Lambda}_k^{(l)}$ e $\tilde{\Lambda}_k^{(r)}$ sobre $k = 1, \dots, N$, isto é,

$$Z_{N,L} = \sum_{k=1}^N Z_k^{(l)} Z_k^{(r)}, \quad (4.51)$$

em que $Z_k^{(l,r)}$ são as funções de partição correspondentes aos domínios $\tilde{\Lambda}_k^{(l,r)}$.

Primeiro, vamos considerar $Z_k^{(l)}$. Como mencionado acima, as configurações deste domínio são definidas pelos possíveis caminhos direcionados com início em $O = (0, 0)$ e fim em $(L, k - 1)$, com passos para a direita ou para cima apenas. Assim, para encontrar a função de partição da parte estendida da rede, faremos a contagem dos caminhos levando em consideração as diferentes contribuições dos pesos de Boltzmann w_3, w_4 e w_5, w_6 (Fig. 4).

Seja ℓ o número de vértices que são precedidos por um passo à direita e sucedidos por um passo para cima em um dado caminho \mathbf{g} . Chamaremos este tipo de vértice de canto à direita. Se w é a contribuição de cada um destes vértices, a contagem ponderada

dos caminhos que começam em $(0, 0)$ e terminam em (x, y) é dada pela soma

$$P_w(x, y) = \sum_{\ell \geq 0} \mathcal{N}(x, y; \ell) w^\ell, \quad \mathcal{N}(x, y; \ell) = \binom{x}{\ell} \binom{y}{\ell}, \quad (4.52)$$

em que $\mathcal{N}(x, y; \ell)$ é o número de caminhos entre os pontos $(0, 0)$ e (x, y) com $\ell \leq \min\{x, y\}$ cantos à direita. É importante notar que para um dado caminho $\mathbf{g} : (0, 0) \rightarrow (x, y)$, o caminho $\tilde{\mathbf{g}}$ obtido do anterior pela adição de um passo vertical anterior a origem e um passo horizontal após o ponto final têm o mesmo número de cantos à direita, ou seja $\ell(\mathbf{g}) = \ell(\tilde{\mathbf{g}})$.

Por outro lado, ao invés de atribuir um peso w para os cantos à direita, podemos considerar dois pesos diferentes: w_1 , para vértices que são precedidos e sucedidos por passos na mesma direção, e w_2 caso contrário. Sejam $s(\tilde{\mathbf{g}})$ e $t(\tilde{\mathbf{g}})$ o número de vértices do tipo w_1 e w_2 , respectivamente, em um dado caminho $\tilde{\mathbf{g}}$. Podemos relacionar $\ell(\tilde{\mathbf{g}})$ a estas duas outras quantidades segundo

$$s + t = x + y + 1, \quad t = 2\ell + 1, \quad (4.53)$$

e então

$$P_{w_1, w_2}(x, y) = \sum_{\ell \geq 0} \binom{x}{\ell} \binom{y}{\ell} w_1^{x+y-2\ell} w_2^{2\ell+1}. \quad (4.54)$$

Agora, lembre-se de que, por definição, a função de partição é dada por

$$Z_k^{(1)} = \sum_{\{\mathbf{n}\}} w_1^{n_1+n_2} w_3^{n_3+n_4} w_5^{n_5+n_6}, \quad (4.55)$$

em que $\{\mathbf{n}\} \equiv \{n_1, \dots, n_6\}$ é o conjunto de números dos vértices w_1, \dots, w_6 em cada configuração, com o vínculo $n_1 + \dots + n_6 = N(L+1)$. Lembre-se de que estamos considerando um modelo simétrico, ou seja, $w_1 = w_2$, $w_3 = w_4$, $w_5 = w_6$. Da Figura 4, vê-se que o número de vértices w_3 e w_5 são, respectivamente, $x + y - 2\ell$ e $2\ell + 1$ em cada caminho \mathbf{g} . Colocando w_1 em evidência na expressão acima e atribuindo $\mathbf{w}_1 \equiv w_3/w_1$, $\mathbf{w}_2 \equiv w_5/w_1$, segue que a função de partição $Z_k^{(1)}$ é dada por

$$Z_k^{(1)} = w_1^{N(L+1)} t^{k+L} \sum_{\ell \geq 0} \binom{L}{\ell} \binom{k-1}{\ell} \left(\frac{w_5}{w_3}\right)^{2\ell+1}, \quad t = \frac{w_3}{w_1}. \quad (4.56)$$

Por outro lado, $Z_k^{(r)}$ é a função de partição de uma rede com N linhas e $N - 1$ colunas com fronteira do tipo parede de domínio, exceto pela aresta na k -ésima linha da borda esquerda cujo sentido aponta para fora da rede. Da Figura 23, vemos que esta função de partição pode ser obtida observando que a aresta invertida corresponde justamente a probabilidade de haver um vértice w_3 na intersecção da N -ésima coluna com a k -ésima

de uma rede quadrada com condição de contorno DWBC. Logo, $Z_k^{(r)}$ está diretamente associada a função $H_N^{(k)}$,

$$Z_k^{(r)} = \frac{Z_N H_N^{(k)}}{w_1^{N-k} w_3^{k-1} w_5}, \quad (4.57)$$

em que Z_N é a função de partição do modelo homogêneo com fronteira DWBC (2.20).

Reunindo (4.56) e (4.57) e somando sobre k , obtemos

$$\begin{aligned} Z_{N,L} &= \sum_{k=1}^N Z_k^{(l)} Z_k^{(r)} \\ &= w_1^{NL} Z_N \sum_{k=1}^N \sum_{\ell \geq 0} \binom{L}{\ell} \binom{k-1}{\ell} t^{L-2\ell} (t^2 - 2\Delta t + 1)^\ell H_N^{(k)}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

No limite termodinâmico, as somas em (4.58) podem ser transformadas em integrais nas variáveis reais $\chi = k/N$ e $\zeta = \ell/N$, nas quais podemos aplicar o método de Laplace [73]. Considere apenas o termo dentro dos somatórios, e escreva-o na forma $\exp(N\mathcal{S}(\chi, \zeta; u))$. Vamos maximizar a função $\mathcal{S}(\chi, \zeta; u)$, pois é de onde deve vir a contribuição mais significativa do integrando quando $N \rightarrow \infty$. Explicitamente, $\mathcal{S}(\chi, \zeta; u)$ é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\chi, \zeta; u) &= \chi \log \chi - 2\zeta \log \zeta - (\chi - \zeta) \log(\chi - \zeta) + u \log u - (u - \zeta) \log(u - \zeta) + \\ &+ (u - 2\zeta) \log t + \zeta \log(t^2 - 2\Delta t + 1) + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log H_N^{(k)}}{N}, \end{aligned} \quad (4.59)$$

em que usamos a aproximação de Stirling¹ para tratar os coeficientes binomiais. Segue que

$$\left. \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \chi} \right|_{\chi_0, \zeta_0} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \log\left(\frac{\chi_0}{\chi_0 - \zeta_0}\right) + \frac{d}{d\chi} \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log H_N^{(k)}}{N} \right]_{\chi_0} = 0, \quad (4.60)$$

$$\left. \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \zeta} \right|_{\chi_0, \zeta_0} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \log\left(\frac{(\chi_0 - \zeta_0)(u - \zeta_0)}{\zeta_0^2}\right) + \log\left[\frac{t^2 - 2\Delta t + 1}{t^2}\right] = 0. \quad (4.61)$$

Resolvendo (4.61) para ζ_0 , obtemos

$$\zeta_0 = \frac{m(\chi_0 + u) - \sqrt{m^2(\chi_0 + u)^2 + 4\chi_0 m u}}{2(m - 1)}, \quad m = \frac{t^2 - 2\Delta t + 1}{t^2}, \quad (4.62)$$

em que o sinal a frente da raiz quadrada é fixado levando-se em conta que $u = 0$ implica $\zeta_0 = 0$ (rede quadrada).

Por outro lado, o método de Laplace também pode ser aplicado no estudo assintótico da função geradora $h_N(z)$. Uma vez que o método aproxima a soma (2.86) função para

$$h_N(z) \sim \int_0^1 H_N^{(k)} z^{N\chi} d\chi \sim c_0 \exp\left(\log H_N^{(k)} + \chi_0 \log z\right), \quad (4.63)$$

¹Aproximação de Stirling: $\log N! \approx N \log N - N$ para $N \gg 1$.

em que c_0 é constante com respeito a z , segue que

$$z \frac{d}{dz} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log h_N(z)}{N} = \chi_0, \quad (4.64)$$

com χ_0 tal que

$$\frac{d}{d\chi} \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log H_N^{(k)}}{N} \right]_{\chi_0} + \log z = 0. \quad (4.65)$$

Usando (4.62) e (4.65) em (4.60) e (4.61) para obter χ_0/u ,

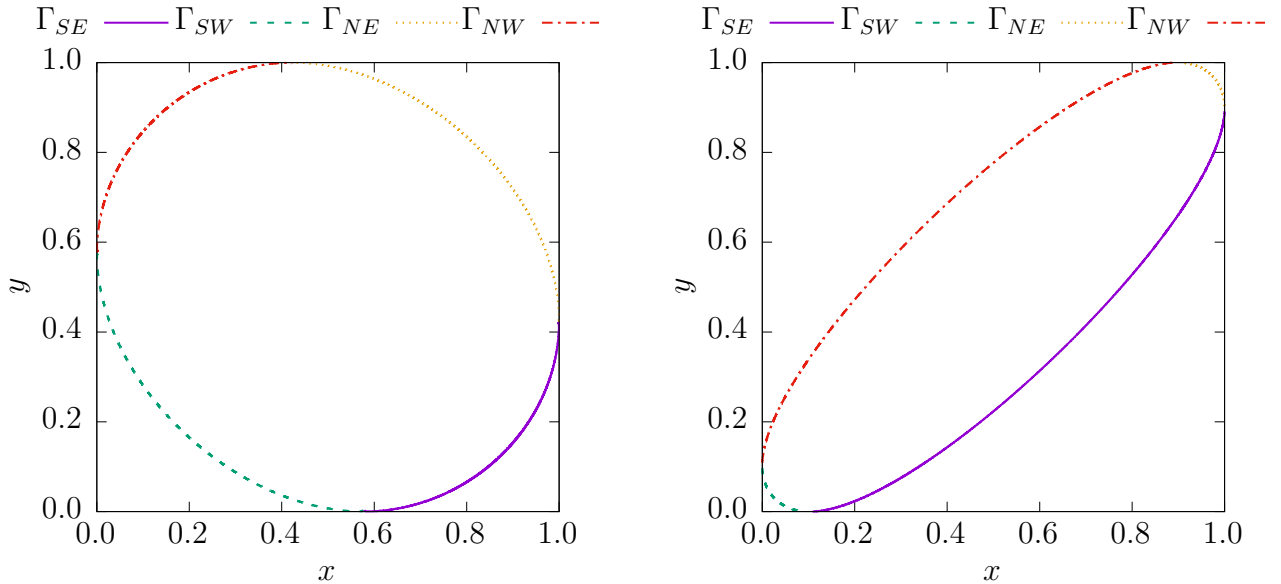
$$\frac{\chi_0}{u} \equiv \frac{\chi_0(z)}{u(z)} = \frac{z}{z-1} \left[\frac{t^2 - 2\Delta t + 1}{t^2 z - 2\Delta t + 1} \right]. \quad (4.66)$$

Substituindo em (4.49) e dividindo por z ,

$$\frac{y}{z} - \frac{x}{z-1} \left[\frac{t^2 - 2\Delta t + 1}{t^2 z - 2\Delta t + 1} \right] - \frac{d}{dz} \left[\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log h_N(z)}{N} \right] = 0, \quad (4.67)$$

que é similar à equação (4.40), com as translações $1-x \rightarrow x$, $1-y \rightarrow y$, o que é consistente com (4.9) pois estamos tratando da porção Γ_{NW} da curva ártica.

Nas Figuras 25 e 26, fizemos gráficos da curva ártica Γ (4.1) para diferentes valores de η e λ .



(a) $\eta = 0.97693$, $\lambda = 1.631$.

(b) $\eta = 1.25921$, $\lambda = 1.381$.

Figura 25 – Curvas árticas para o modelo de seis vértices com DWBC no regime desordenado. Fonte: elaborada pela autora.

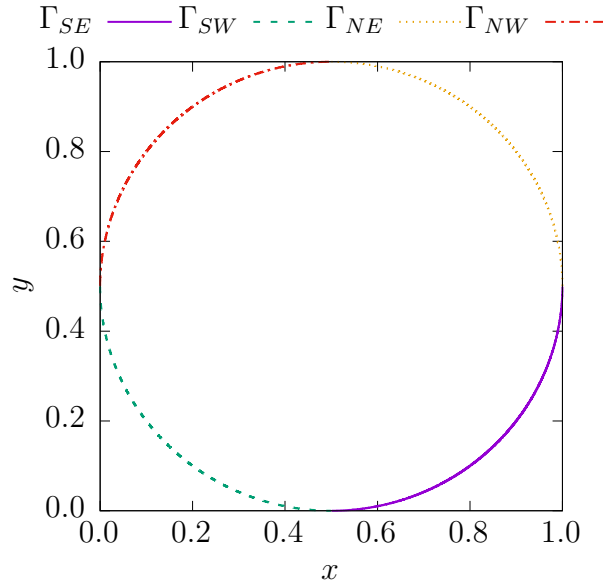


Figura 26 – No ponto especial $\eta = \pi/4$, $\lambda = \pi/2$, a curva ártica é um círculo [44]. Fonte: elaborada pela autora.

4.3.2 Fronteira com uma extremidade reflexiva

A seguir, adaptaremos o método da tangente a fim de obter a curva ártica do modelo de seis vértices com fronteira reflexiva em $\Delta = 0$, $\mu = 0$. Esta Subseção compreende nossos resultados, em parte publicados em [52].

Similar ao caso da fronteira parede de domínio, usaremos a formulação do modelo em termos de linhas (Figuras 4 e 16). Neste caso, as configurações permitidas do modelo em uma rede $2N \times N$ serão representadas por N caminhos que não se cruzam, com início na borda inferior e fim na borda da direita.

Para a aplicação do método, considere agora uma rede retangular com N linhas duplas e $N + L$ colunas, como descrito na Figura 27, sendo $L \in \mathbb{N}$. Interpretaremos esta rede como a justaposição de dois domínios, $\Lambda_k^{(r)}$ e $\Lambda_k^{(l)}$, $k = 1, \dots, 2N$, de dimensões $2N \times (N - 1)$ e $2N \times (L + 1)$, respectivamente. Como condição de contorno, colocaremos linhas espessas na primeira bem como nas $(N - 1)$ últimas arestas verticais da borda inferior, e linhas finas para as demais arestas nas fronteiras esquerda e superior.

A análise dos domínios é bastante análoga ao caso anterior: as configurações do domínio $\Lambda_k^{(l)}$ são os possíveis caminhos com início em $O = (0, 0)$ e fim na interface com $\Lambda_k^{(r)}$ em $(L, k - 1)$. Já os estados do domínio $\Lambda_k^{(r)}$, por sua vez, possuem N caminhos que chegam à fronteira direita, sendo que um deles começa em alguma aresta da interface, enquanto os $N - 1$ restantes iniciam-se na borda inferior. Com isto, adaptamos levemente as suposições 1 e 2 da Subseção anterior, afirmando

1. Os $N - 1$ caminhos que partem da borda inferior de $\Lambda_k^{(r)}$ dão origem à mesma região

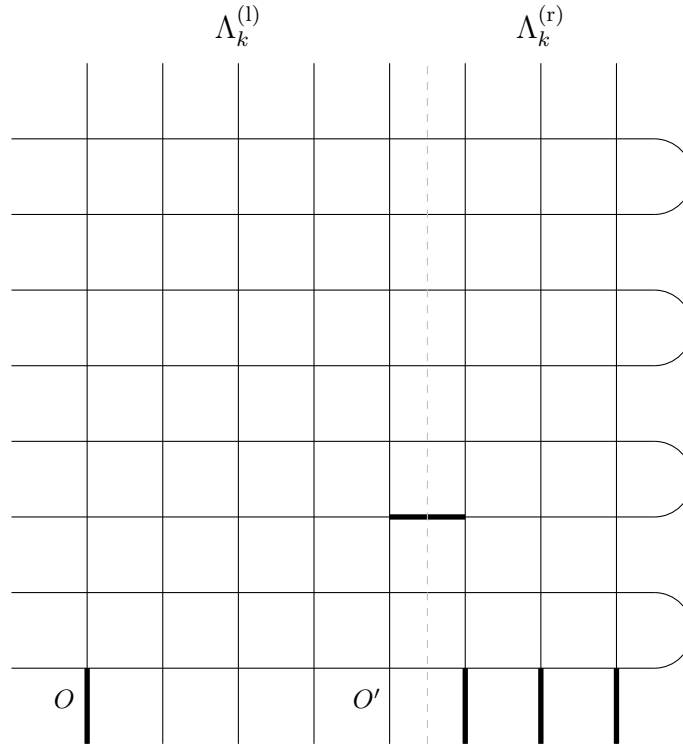


Figura 27 – Rede estendida para aplicação do método da tangente no caso da fronteira com uma extremidade reflexiva. Fonte: elaborada pela autora.

desordenada que uma rede de dimensões $2N \times N$ com condição de contorno parede de domínio com uma extremidade reflexiva.

2. No limite termodinâmico, o caminho direcionado de $\Lambda_k^{(r)}$ dá lugar a uma linha reta que cruza os eixos x e y em $(-L/N, 0)$ e $(0, k/N > \varkappa)$, respectivamente, e tangencia a porção $\tilde{\Gamma}_{NW}$ da curva ártica em (x, y) (com respeito a O'). A inclinação desta reta é constante até o ponto de tangência, a partir do qual segue a curva ártica até o ponto de contato superior.

Veja a Figura 28 para um esboço destas afirmações.

Nesta situação, a parte noroeste $\tilde{\Gamma}_{NW}$ da curva ártica é o envelope da família de linhas retas $U_u(x, y; z) = 0$ obtidas pela variação de $L = uN$. Sendo $k = 2\chi N$, segue que

$$U_u(x, y; z) = y - \frac{2\chi}{u}x - 2\chi = 0, \quad (4.68)$$

e as coordenadas paramétricas $x(z)$, $y(z)$ são as soluções de (4.50). Novamente, o problema de encontrar a curva ártica é reduzido a determinação de χ/u and χ , o que é feito via estudo do comportamento assintótico da função de partição da rede estendida, $Z_{N,L}$, dada por

$$Z_{N,L} = \sum_{k=1}^{2N} Z_k^{(l)} Z_k^{(r)}, \quad (4.69)$$

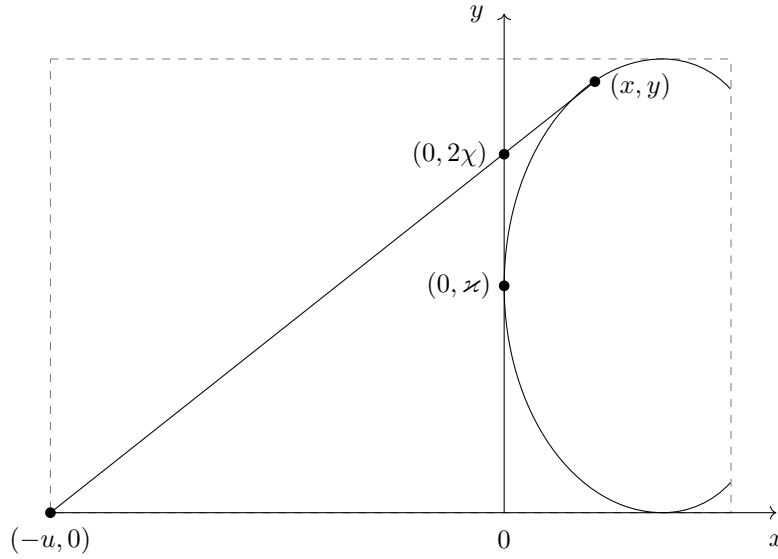


Figura 28 – Rede estendida no limite termodinâmico (reescalada). Fonte: elaborada pela autora.

em que $Z_k^{(l,r)}$ são as funções de partição dos domínios $\Lambda_k^{(l,r)}$, respectivamente.

No que diz respeito a $Z_k^{(r)}$, é fácil de ver que se trata da rede original, de dimensões $2N \times N$, com condição de contorno reflexiva após a exclusão da sua N -ésima coluna, na qual existe um vértice c na interseção com a k -ésima linha (de baixo para cima). Logo, esta função de partição está diretamente relacionada com a correlação $H_N^{(r)}$. De fato, da Figura 19 vê-se que, no caso geral,

$$Z_{k=2n}^{(r)} = \frac{A_N^{(N-n+1)}(\lambda, \mu)}{cb_-(\lambda, \mu)(a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu))^{N-n}(a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu))^{n-1}}, \quad (4.70)$$

$$Z_{k=2n-1}^{(r)} = \frac{D_N^{(N-n+1)}(\lambda, \mu)}{cb_+(\lambda, \mu)(a_-(\lambda, \mu)b_+(\lambda, \mu))^{N-n}(a_+(\lambda, \mu)b_-(\lambda, \mu))^{n-1}}, \quad (4.71)$$

com $n = N - r + 1$. Por outro lado, vamos analisar separadamente os casos $a = b$ e $a \neq b$ ao tratar a função de partição $Z_k^{(1)}$.

4.3.2.1 Caso $a = b$

A função de partição $Z_k^{(1)}$ é, novamente, proporcional ao número de maneiras de se atingir o ponto $(L, k - 1)$ partindo da origem $O = (0, 0)$ através de um caminho direcionado com passos à direita e para cima. Entretanto, diferentemente do caso DWBC, a contagem ponderada de caminhos neste caso se torna um problema muito mais complicado. Isso porque há inversão do sinal do parâmetro espectral em linhas alternadas, além de a leitura correta dos vértices (Figura 15) ao longo das linhas substituir $a_- \rightarrow b_+$ e $b_- \rightarrow a_+$ após a reflexão na fronteira direita. Assim, enquanto no caso DWBC podíamos associar univocamente $\mathbf{w}_1 \equiv w_3/w_1 = b/a$ e $\mathbf{w}_2 \equiv w_5/w_1 = c/a$, no caso reflexivo temos $w_1 = a_-$ ou b_+ e $w_3 = b_-$ ou a_+ , dependendo da linha horizontal. No entanto, no ponto

especial $\Delta = 0$, $\mu = 0$, segue que $a_{\pm}(\lambda, \mu) \rightarrow a(\lambda)$, $b_{\pm}(\lambda, \mu) \rightarrow b(\lambda)$ e então podemos fixar $\lambda = \pi/4$, o que implica $w_3/w_1 = 1$ e $w_5/w_1 = \sqrt{2}$ independente da linha horizontal da rede. Neste caso, podemos simplesmente usar o resultado (4.56) para a função de partição, e assim

$$Z_k^{(l)} = \sum_{\ell \geq 0} \binom{L}{\ell} \binom{k-1}{\ell} a^{2N(L+1)-2\ell-1}, \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (4.72)$$

Agora, especializando (4.70) e (4.71) para $\mu = 0$, $a = b$, $c = 1$,

$$Z_{k=2n}^{(r)} = \frac{A_N^{(N-n+1)}}{a^{2N-1}}, \quad Z_{k=2n-1}^{(r)} = \frac{D_N^{(N-n+1)}}{a^{2N-1}}, \quad (4.73)$$

e então, juntando os resultados (4.72) e (4.73) e substituindo em (4.69), obtemos

$$Z_{N,L} = a^{2NL} \sum_{n=1}^N \sum_{\ell \geq 0} a^{-2\ell} \binom{L}{\ell} \left[\binom{2n-1}{\ell} A_N^{(N-n+1)} + \binom{2n-2}{\ell} D_N^{(N-n+1)} \right], \quad (4.74)$$

onde mudamos o índice da soma $k \rightarrow n$ ao separar os termos com k par e ímpar. Em termos de $H_N^{(N-n+1)}$,

$$Z_{N,L} = a^{2NL} Z_N \sum_{n=1}^N \sum_{\ell \geq 0} a^{-2\ell} \binom{L}{\ell} \binom{2n-1}{\ell} H_N^{(N-n+1)} \left[1 - \frac{\ell}{2n-1} \frac{D_N^{(N-n+1)}}{Z_N H_N^{(N-n+1)}} \right]. \quad (4.75)$$

Agora, vamos estudar o limite assintótico de (4.75). Transformaremos as somas acima em integrais nas variáveis $\chi = n/N$ and $\zeta = \ell/N$, e aplicaremos o método de Laplace. Segue que

$$\tilde{Z}_{N,L} = \frac{Z_{N,L}}{a^{2NL} Z_N} \propto \int e^{NS(\xi, \zeta; u)} d\chi d\zeta, \quad (4.76)$$

sendo

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(\chi, \zeta; u) &= 2\chi \log 2\chi - 2\zeta \log(a\zeta) - (2\chi - \zeta) \log(2\chi - \zeta) + u \log u - \\ &- (u - \zeta) \log(u - \zeta) + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left(\log H_N^{(N-n+1)} + \log \left[1 - \frac{u}{2\chi} \frac{D_N^{(N-n+1)}}{Z_N H_N^{(N-n+1)}} \right] \right). \end{aligned} \quad (4.77)$$

Por definição, $Z_N H_N^{(r)} = A_N^{(r)} + D_N^{(r)} \gtrsim D_N^{(r)}$ uma vez que ambos os termos são positivos, o que faz com o que o argumento do logaritmo em (4.77) esteja no intervalo $(0, 1)$. Por isso, sua contribuição pode ser desprezada no limite $N \rightarrow \infty$. Impondo $\partial \mathcal{S} / \partial \chi|_{\{\chi_0, \zeta_0\}} = 0$, $\partial \mathcal{S} / \partial \zeta|_{\{\chi_0, \zeta_0\}} = 0$, obtemos

$$0 = 2 \log \left[\frac{2\chi_0}{2\chi_0 - \zeta_0} \right] + \frac{d}{d\chi} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log H_N^{(N-n+1)} \Big|_{\chi=\chi_0}, \quad (4.78)$$

$$0 = \log \left[\frac{2(2\chi_0 - \zeta_0)(u - \zeta_0)}{\zeta_0^2} \right], \quad (4.79)$$

onde usamos $a = 1/\sqrt{2}$. Com a finalidade de obter o comportamento assintótico de $H_N^{(N-n+1)}$, voltaremos para a sua função geradora $h_N(z)$. No limite termodinâmico, já vimos que podemos reescrever (2.86) como uma integral da forma

$$h_N(z) \propto \int e^{Np(\chi)} d\chi, \quad p(\chi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log H_N^{(N-n+1)} + (1 - \chi) \log z. \quad (4.80)$$

A contribuição mais significativa para o integrando vem do ponto máximo de $p(\chi)$. Impondo $p'(\chi) = 0$, obtemos

$$\left. \frac{d}{d\chi} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log H_N^{(N-n+1)} \right|_{\chi_0} = \log z. \quad (4.81)$$

Veja que $p''(\chi) = (d/d\chi)^2 \log H_N^{(N-n+1)}$, logo, o sinal da segunda derivada de $p(\chi)$ é o mesmo que de $\log H_N^{(r)}$. Como função de χ , a correlação $H_N^{(r)}$ assume valores no intervalo $(0, 1]$, e portanto seu logaritmo é uma função côncava de χ com máximo no ponto de contato. Consequentemente, $p''(\chi_0) < 0$ e χ_0 é um ponto de máximo.

Com o resultado (4.81), podemos resolver o sistema de equações (4.78)–(4.79), cujas soluções são

$$\zeta_0^{(\pm)} = \pm \frac{2u\sqrt{z}}{1 \pm \sqrt{z}}, \quad \chi_0^{(\pm)} = \pm \frac{u\sqrt{z}}{1 - z}, \quad (4.82)$$

com sinais iguais tomado simultaneamente. Note que devemos escolher o par de soluções de forma que ζ_0 e χ_0 sejam positivos, o que depende se $z > 1$ ou não. Fazendo $z = \gamma(\omega)$ (dado por (3.124) com $\lambda = \pi/4$), segue que $z \in (0, +\infty)$ no intervalo $\omega \in (-\pi/4, \pi/4)$ com $z = 1$ em $\omega = 0$. Portanto, as soluções adequadas e seus respectivos intervalos são

$$(\chi_0, \zeta_0) = \begin{cases} (\chi_0^{(+)}, \zeta_0^{(+)}) & \omega \in (-\pi/4, 0) \\ (\chi_0^{(-)}, \zeta_0^{(-)}) & \omega \in (0, \pi/4) \end{cases}. \quad (4.83)$$

Por outro lado, podemos obter a constante χ_0 pela derivada do valor assintótico da integral (4.80) com respeito a z . De fato, nesta situação $h_N(z) \propto e^{Np(\chi_0)}$, e então

$$v(z) = \frac{dp(\chi_0)}{dz} \implies \chi_0 = 1 - z v(z), \quad (4.84)$$

em que

$$v(z) = \frac{d}{dz} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log h_N(z)}{N}. \quad (4.85)$$

Substituindo χ_0/u (4.83) e χ_0 (4.84) em (4.68), chegamos a duas possibilidades para a função $U_u(x, y; z)$, cada uma correspondendo diferentes envelopes de linhas retas dependendo do intervalo de z . A fim de obter a porção noroeste da curva ártica, devemos escolher $z < 1$, o que nos leva a

$$U_u(x, y; z) = y - \frac{2\sqrt{z}}{1 - z} x - 2(1 - v(z)). \quad (4.86)$$

Finalmente, impondo $U_u = (d/dz)U_u = 0$ e resolvendo para $x(z)$, $y(z)$, obtemos as coordenadas paramétricas da curva $\tilde{\Gamma}_{NW}$,

$$x(z) = \frac{2\sqrt{z}(1-z)^2[v(z) + zv'(z)]}{1+z}, \quad (4.87)$$

$$y(z) = \frac{2(1+z) + 2z(1-3z)v(z) + 4z^2(1-z)v'(z)}{1+z}, \quad z \in (0, 1), \quad (4.88)$$

que, em termos de ω , são reescritas de forma muito mais intuitiva,

$$x(\omega) = 1 - \cos(2\omega), \quad y(\omega) = 1 - \sin(2\omega), \quad \omega \in \left(-\frac{\pi}{4}, 0\right). \quad (4.89)$$

Como explicado no início deste Capítulo, a porção $\tilde{\Gamma}_{SW}$ é obtida do resultado acima através das transformações $\mu \rightarrow -\mu$, $x \rightarrow x$, $y \rightarrow 2 - y$ em (4.89). Com isto, a curva ártica em $\Delta = 0$, $\mu = 0$, $\lambda = \pi/4$ é um semi-círculo centrado em $(1, 1)$ com raio unitário. Vale ressaltar que este resultado é consistente com resultados numéricos obtidos via simulações de Monte Carlo [61] e coincide com a porção oeste da curva ártica do modelo de seis vértices com condição de contorno DWBC em uma rede quadrada de dimensões $2N \times 2N$ [45].

4.3.2.2 Caso $a \neq b$

Embora seja interessante a conexão entre a função de partição da parte estendida da rede e o problema combinatorial de contagem ponderada de caminhos direcionados, ela não é essencial para o cálculo de $Z_k^{(1)}$. A seguir, obteremos esta função de partição diretamente, usando o método do espalhamento inverso quântico discutido na Seção 1.1.

No que segue, voltaremos a utilizar a formulação do modelo em termos das setas (Figura 3). Considere o domínio $\Lambda_k^{(1)}$, ilustrado na Figura 29(a). Suas linhas podem ser interpretadas como entradas das matrizes de monodromia $\mathcal{T}^{(1)}$ e $\check{\mathcal{T}}^{(1)}$, definidas como

$$\mathcal{T}^{(1)}(\lambda_j) = \mathcal{L}_{j,N+L}(\lambda_j - \mu_{N+L}) \dots \mathcal{L}_{jN}(\lambda_j - \mu_N) = \begin{bmatrix} A^{(1)}(\lambda_j) & B^{(1)}(\lambda_j) \\ C^{(1)}(\lambda_j) & D^{(1)}(\lambda_j) \end{bmatrix}, \quad (4.90)$$

$$\check{\mathcal{T}}^{(1)}(\lambda_j) = \check{\mathcal{L}}_{jN}(\lambda_j + \mu_N) \dots \check{\mathcal{L}}_{j,N+L}(\lambda_j + \mu_{N+L}) = \begin{bmatrix} \check{A}^{(1)}(\lambda_j) & \check{B}^{(1)}(\lambda_j) \\ \check{C}^{(1)}(\lambda_j) & \check{D}^{(1)}(\lambda_j) \end{bmatrix}, \quad (4.91)$$

no caso de um modelo heterogêneo, sendo que as linhas ímpares, $k = 2n - 1$, correspondem a elementos da matriz $\mathcal{T}^{(1)}(\lambda_r)$, enquanto que as linhas pares, $k = 2n$, correspondem a elementos da matriz $\check{\mathcal{T}}^{(1)}(\lambda_r)$, com $r = N - n + 1$, $n = 1, \dots, N$.

Levando em consideração a mudança do sentido da leitura dos vértices após a reflexão (Fig. 15), as linhas do domínio $\Lambda_k^{(1)}$ são corretamente identificadas como na Figura 29(b). Com isto, segue que a função de partição para $k = 2n$ e $k = 2n - 1$ são escritas

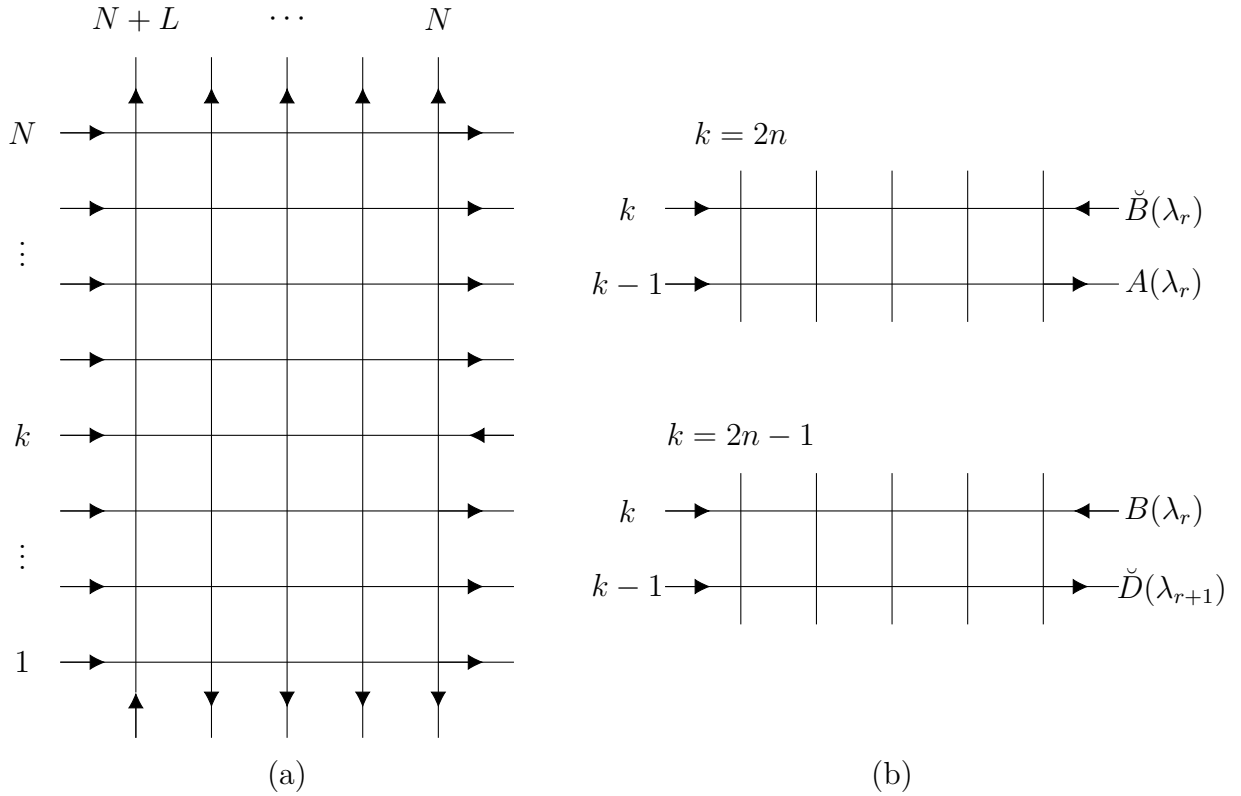


Figura 29 – (a) Domínio $\Lambda_k^{(1)}$, com $N = k = L = 4$. (b) Interpretação das linhas da rede $\Lambda_k^{(1)}$ em termos dos elementos das matrizes de monodromia \mathcal{T} e $\check{\mathcal{T}}$. Fonte: elaborada pela autora.

como

$$Z_{2n}^{(1)} = \langle \bar{0} | A(\lambda_N) \check{D}(\lambda_N) \dots A(\lambda_{r+1}) \check{D}(\lambda_{r+1}) A(\lambda_r) \check{B}(\lambda_r) A(\lambda_{r-1}) \check{D}(\lambda_{r-1}) \dots A(\lambda_1) \check{D}(\lambda_1) | 0 \rangle, \quad (4.92)$$

$$Z_{2n-1}^{(1)} = \langle \bar{0} | A(\lambda_N) \check{D}(\lambda_N) \dots A(\lambda_{r+1}) \check{D}(\lambda_{r+1}) B(\lambda_r) \check{D}(\lambda_r) A(\lambda_{r-1}) \check{D}(\lambda_{r-1}) \dots A(\lambda_1) \check{D}(\lambda_1) | 0 \rangle, \quad (4.93)$$

em que os estados $|0\rangle$ e $|\bar{0}\rangle$ são dados por

$$|0\rangle = |\uparrow \uparrow \dots \uparrow\rangle, \quad |\bar{0}\rangle = |\uparrow \dots \uparrow \downarrow\rangle, \quad (4.94)$$

Note que nas expressões (4.92) e (4.93), omitimos o índice “(1)” dos operadores dados pelas equações (4.90) e (4.91). Prosseguiremos assim daqui em diante.

Uma forma de calcular $Z_{2n}^{(1)}$ ($Z_{2n-1}^{(1)}$) começa trazendo o operador $\check{B}(\lambda_r)$ ($B(\lambda_r)$) para a esquerda a fim de atuá-lo sobre o estado $|\bar{0}\rangle$, transformando-o em alguma combinação linear de estados que leve $|0\rangle$. Como os operadores $A(\lambda)$ e $\check{D}(\lambda)$ preservam o estado ferromagnético $|0\rangle$, o produto interno restante é computado facilmente. Logo, precisamos das relações de comutação entre as entradas de $\mathcal{T}^{(1)}$ e $\check{\mathcal{T}}^{(1)}$.

Da relação fundamental (1.8), com a matriz R dada pela (3.8) (e parametrização (3.9)), obtemos as relações

$$[A(\lambda), \check{D}(\mu)] = [A(\lambda), A(\mu)] = [\check{D}(\lambda), \check{D}(\mu)] = 0, \quad (4.95)$$

$$A(\mu)B(\lambda) = \frac{a(\lambda - \mu)}{b(\lambda - \mu)}B(\lambda)A(\mu) - \frac{c}{b(\lambda - \mu)}B(\mu)A(\lambda), \quad (4.96)$$

$$A(\lambda)\check{B}(\mu) = \frac{b(\lambda + \mu)}{a(\lambda + \mu)}\check{B}(\mu)A(\lambda) - \frac{c}{a(\lambda + \mu)}B(\lambda)\check{D}(\mu), \quad (4.97)$$

$$\check{D}(\mu)\check{B}(\lambda) = \frac{a(\mu - \lambda)}{b(\mu - \lambda)}\check{B}(\lambda)\check{D}(\mu) - \frac{c}{b(\mu - \lambda)}\check{B}(\mu)\check{D}(\lambda), \quad (4.98)$$

$$\check{D}(\mu)B(\lambda) = \frac{c}{a(\lambda + \mu)}\check{B}(\mu)A(\lambda) + \left[\frac{a^2(\lambda + \mu) - c^2}{a(\lambda + \mu)b(\lambda + \mu)} \right] B(\lambda)\check{D}(\mu), \quad (4.99)$$

lembrando que $\check{T}(\lambda) \propto [\mathcal{T}(-\lambda)]^{-1}$.

Primeiro, vamos calcular $Z_{2n}^{(1)}$. Por (4.95), é verdade que

$$A(\lambda_N)\check{D}(\lambda_N) \dots A(\lambda_{r+1})\check{D}(\lambda_{r+1})A(\lambda_r)\check{B}(\lambda_r) = \left[\prod_{j=r}^N A(\lambda_j) \prod_{j=r+1}^N \check{D}(\lambda_j) \right] \check{B}(\lambda_r). \quad (4.100)$$

Para obter $\check{B}(\lambda)$ passando pelo produto de operadores $\check{D}(\lambda_j)$, o raciocínio é análogo ao cálculo de (1.22). De fato, usando (4.98), chegamos a

$$\begin{aligned} \left[\prod_{j=r+1}^N \check{D}(\lambda_j) \right] \check{B}(\lambda) &= \left[\prod_{j=r+1}^N \frac{a(\lambda_j - \lambda)}{b(\lambda_j - \lambda)} \right] \check{B}(\lambda) \prod_{j=r+1}^N \check{D}(\lambda_j) + \\ &+ \sum_{j=r+1}^N \frac{c}{b(\lambda - \lambda_j)} \left[\prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \frac{a(\lambda_k - \lambda_j)}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \right] \check{B}(\lambda_j)\check{D}(\lambda) \prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \check{D}(\lambda_k). \end{aligned} \quad (4.101)$$

Por outro lado, para obtermos $\check{B}(\lambda)$ passando pelo produto de $A(\lambda_j)$, temos de usar as relações (4.96) e (4.97). Segue que

$$\begin{aligned} \left[\prod_{j=r}^N A(\lambda_j) \right] \check{B}(\lambda) &= \left[\prod_{j=r}^N \frac{b(\lambda_j + \lambda)}{a(\lambda_j + \lambda)} \right] \check{B}(\lambda) \prod_{j=r}^N A(\lambda_j) - \\ &- \sum_{j=r}^N \frac{c}{a(\lambda_j + \lambda)} \left[\prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{a(\lambda_j - \lambda_k)}{b(\lambda_j - \lambda_k)} \right] B(\lambda_j)\check{D}(\lambda) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N A(\lambda_k). \end{aligned} \quad (4.102)$$

Fazendo $\lambda = \lambda_r$ em (4.101), podemos passar o termo da primeira linha para dentro do somatório, notando que $a(\lambda_r - \lambda_r) = a(0) = c$. Depois, usando (4.102) para cada termo

da soma resultante, obtemos

$$\begin{aligned}
 \left[\prod_{j=r}^N A(\lambda_j) \prod_{j=r+1}^N \check{D}(\lambda_j) \right] \check{B}(\lambda_r) &= \sum_{j=r}^N \left[\left(\frac{c}{a(\lambda_r - \lambda_j)} \prod_{k=r}^N \frac{b(\lambda_j + \lambda_k)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{a(\lambda_k - \lambda_j)}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \right) \times \right. \\
 &\times \check{B}(\lambda_j) \prod_{k=r}^N A(\lambda_k) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \check{D}(\lambda_k) - \left(\frac{c}{a(\lambda_r + \lambda_j)} \prod_{k=r+1}^N \frac{a(\lambda_j + \lambda_k + 2\eta)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{a(\lambda_j - \lambda_k)}{b(\lambda_j - \lambda_k)} \right) \times \\
 &\left. \times B(\lambda_j) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N A(\lambda_k) \prod_{k=r}^N \check{D}(\lambda_k) \right], \tag{4.103}
 \end{aligned}$$

onde foi preciso usar a relação

$$\begin{aligned}
 \sum_{l=r}^N \frac{\sin^2(2\eta)}{\sin(\lambda_j + \lambda_l + 2\eta) \sin(\lambda_r - \lambda_l + 2\eta)} \prod_{\substack{k=r \\ k \neq l}}^N \frac{\sin(\lambda_k - \lambda_l + 2\eta)}{\sin(\lambda_k - \lambda_l)} &= \frac{\sin(2\eta)}{\sin(\lambda_j + \lambda_r + 2\eta)} \times \\
 &\times \prod_{k=r+1}^N \frac{\sin(\lambda_j + \lambda_k + 4\eta)}{\sin(\lambda_j + \lambda_k + 2\eta)}, \tag{4.104}
 \end{aligned}$$

a fim de escrever (4.103) apenas em termos de somas simples, eliminando a soma dupla que surge graças ao segundo termo de (4.102).

Como dito acima, $A(\lambda)$ e $\check{D}(\lambda)$ não mudam o estado $|0\rangle$. De fato,

$$A(\lambda) |0\rangle = \left[\prod_{k=N}^{N+L} a(\lambda - \mu_k) \right] |0\rangle, \quad \check{D}(\lambda) |0\rangle = \left[\prod_{k=N}^{N+L} b(\lambda + \mu_k) \right] |0\rangle. \tag{4.105}$$

Ao mesmo tempo, $\check{B}(\lambda)$ leva $|\bar{0}\rangle$ em uma combinação linear de estados. Em virtude de (4.105), os únicos termos desta combinação que trarão contribuição não nula a $Z_{2n}^{(1)}$ quando substituirmos (4.103) em (4.92) são aqueles proporcionais a $|0\rangle$. Por isso, iremos decompor as matrizes de monodromia $\mathcal{T}^{(1)}$ e $\check{\mathcal{T}}^{(1)}$ (de forma análoga ao que já foi feito nas Seções 2.3 e 3.3 no tratamento das correlações), a fim de separar a ação no espaço \mathcal{V}_{N+L} dos demais. Segue que

$$B(\lambda) = cD_1(\lambda)\sigma_{N+L}^- + B_1(\lambda)A_{N+L}(\lambda), \tag{4.106}$$

$$\check{B}(\lambda) = c\check{A}_1(\lambda)\sigma_{N+L}^- + \check{B}_1(\lambda)\check{D}_{N+L}(\lambda), \tag{4.107}$$

com B_1 , \check{B}_1 , D_1 , \check{A}_1 operadores que atuam no espaço $\mathcal{V}_N \otimes \cdots \otimes \mathcal{V}_{N+L-1}$, sendo que

$$\check{A}_1(\lambda) |0\rangle_1 = \left[\prod_{k=N}^{N+L-1} a(\lambda + \mu_k) \right] |0\rangle_1, \quad D_1(\lambda) |0\rangle_1 = \left[\prod_{k=N}^{N+L-1} b(\lambda - \mu_k) \right] |0\rangle_1, \tag{4.108}$$

com $|0\rangle_1 = \otimes_{k=N}^{N+L-1} |\uparrow\rangle_k$, e B_1, \check{B}_1 levam $|0\rangle_1$ em outro estado. Usando (4.105)–(4.108), temos que

$$\langle \bar{0} | \check{B}(\lambda_j) \prod_{k=1}^N A(\lambda_k) \prod_{k \neq j}^N \check{D}(\lambda_k) | 0 \rangle = \frac{c}{a(\lambda_j + \mu_{N+L})} \prod_{l=N}^{N+L} \left[\frac{a(\lambda_j + \mu_l)}{b(\lambda_j + \mu_l)} \prod_{k=1}^N a(\lambda_k - \mu_l) b(\lambda_k + \mu_l) \right], \quad (4.109)$$

$$\langle \bar{0} | B(\lambda_j) \prod_{k \neq j}^N A(\lambda_k) \prod_{k=1}^N \check{D}(\lambda_k) | 0 \rangle = \frac{c}{b(\lambda_j - \mu_{N+L})} \prod_{l=N}^{N+L} \left[\frac{b(\lambda_j - \mu_l)}{a(\lambda_j - \mu_l)} \prod_{k=1}^N a(\lambda_k - \mu_l) b(\lambda_k + \mu_l) \right]. \quad (4.110)$$

Finalmente, obtemos a função de partição $Z_{2n}^{(1)}$,

$$\begin{aligned} Z_{2n}^{(1)} &= \prod_{l=N}^{N+L} \prod_{k=1}^N a(\lambda_k - \mu_l) b(\lambda_k + \mu_l) \sum_{j=r}^N \left[\frac{c}{a(\lambda_r - \lambda_j) a(\lambda_j - \mu_{N+L})} \prod_{k=r}^N \frac{b(\lambda_j + \lambda_k) a(\lambda_k - \lambda_j)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \times \right. \\ &\times \prod_{l=N}^{N+L} \frac{a(\lambda_j + \mu_l)}{b(\lambda_j + \mu_l)} - (-1)^{N-r} \frac{c}{a(\lambda_r + \lambda_j) b(\lambda_j - \mu_{N+L})} \prod_{k=r+1}^N \frac{a(\lambda_j + \lambda_k + 2\eta)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \prod_{k=r}^N a(\lambda_j - \lambda_k) \times \\ &\left. \times \prod_{l=N}^{N+L} \frac{b(\lambda_j - \mu_l)}{a(\lambda_j - \mu_l)} \right] \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)}. \end{aligned} \quad (4.111)$$

Queremos tomar o limite homogêneo $\lambda_1, \dots, \lambda_N \rightarrow \lambda$, $\mu_N, \dots, \mu_{N+L} \rightarrow \mu$ da função de partição $Z_{2n}^{(1)}$ e, em seguida, fixar $\mu = 0$. Os limites em μ_k , $k = N, \dots, N+L$ podem ser tomados diretamente, e portanto

$$\begin{aligned} Z_{2n}^{(1)} &= \prod_{k=1}^N [a(\lambda_k) b(\lambda_k)]^{L+1} \sum_{j=r}^N \left[\frac{c}{a(\lambda_r - \lambda_j)} \prod_{k=r}^N \frac{b(\lambda_j + \lambda_k) a(\lambda_k - \lambda_j)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \frac{[a(\lambda_j)]^L}{[b(\lambda_j)]^{L+1}} - \right. \\ &\left. - (-1)^{N-r} \frac{c}{a(\lambda_r + \lambda_j)} \prod_{k=r+1}^N \frac{a(\lambda_j + \lambda_k + 2\eta)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \prod_{k=r}^N a(\lambda_j - \lambda_k) \frac{[b(\lambda_j)]^L}{[a(\lambda_j)]^{L+1}} \right] \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)}. \end{aligned} \quad (4.112)$$

Já o limite homogêneo nos $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ deve ser tratado com maior cuidado, devido ao produto de termos $b(\lambda_k - \lambda_j) = \sin(\lambda_k - \lambda_j)$ no denominador. Considere o termo entre colchetes em (4.112). Podemos substituí-lo pela função

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_j(\lambda_j; \lambda) &= \frac{c}{a(\lambda - \lambda_j)} \left[\frac{b(\lambda_j + \lambda) a(\lambda - \lambda_j)}{a(\lambda_j + \lambda)} \right]^{N-r+1} \frac{[a(\lambda_j)]^L}{[b(\lambda_j)]^{L+1}} - (-1)^{N-r} a(\lambda_j - \lambda) \times \\ &\times \frac{c}{a(\lambda + \lambda_j)} \left[\frac{a(\lambda_j + \lambda + 2\eta) a(\lambda_j - \lambda)}{a(\lambda_j + \lambda)} \right]^{N-r} \frac{[b(\lambda_j)]^L}{[a(\lambda_j)]^{L+1}}, \end{aligned} \quad (4.113)$$

como um passo intermediário antes de tomar o limite homogêneo completo. Isto porque este termo pode ser visto somente como função de λ_j , com $\lambda_r, \dots, \lambda_N$ constantes que igualaremos a λ . Feito isto, a soma (4.112) pode ser escrita de forma bastante compacta,

$$Z_{2n}^{(1)} = [a(\lambda) b(\lambda)]^{N(L+1)} \sum_{j=r}^N \mathcal{A}_j(\lambda_j) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)}. \quad (4.114)$$

que, por sua vez, é igual ao determinante de uma matriz $(N - r + 1) \times (N - r + 1)$,

$$\sum_{j=r}^N \mathcal{A}_j(\lambda_j) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)} = \prod_{r \leq j < k \leq N} \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \begin{vmatrix} \mathcal{A}_r(\lambda_r) & \mathcal{A}_{r+1}(\lambda_{r+1}) & \cdots & \mathcal{A}_N(\lambda_N) \\ \psi_{2,m}(\lambda_r) & \psi_{2,m}(\lambda_{r+1}) & \cdots & \psi_{2,m}(\lambda_N) \\ \psi_{3,m}(\lambda_r) & \psi_{3,m}(\lambda_{r+1}) & \cdots & \psi_{3,m}(\lambda_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{m+2,m}(\lambda_r) & \psi_{m+2,m}(\lambda_{r+1}) & \cdots & \psi_{m+2,m}(\lambda_N) \end{vmatrix}, \quad (4.115)$$

em que $m = N - r - 1$ e $\psi_{j,m}(\lambda) = [\sin(\lambda)]^{j-2} [\cos(\lambda)]^{m-j+2}$. O determinante em (4.115) pode ser encontrado por inspeção direta da soma do lado esquerdo da equação, calculando-a diretamente para pequenos valores de r e N com o auxílio de identidades trigonométricas. Agora, basta que tomemos o limite homogêneo deste determinante seguindo o método da Seção 2.2. No final, obtemos

$$Z_{2n}^{(1)} = \frac{[a(\lambda)b(\lambda)]^{N(L+1)}}{\prod_{j=r}^N j!} \begin{vmatrix} \mathcal{A}(\xi) & \partial_\xi \mathcal{A}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^{m+1} \mathcal{A}(\xi) \\ \psi_{2,m}(\xi) & \partial_\xi \psi_{2,m}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^{m+1} \psi_{2,m}(\xi) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{m+2,m}(\xi) & \partial_\xi \psi_{m+2,m}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^{m+1} \psi_{m+2,m}(\xi) \end{vmatrix}_{\xi=\lambda}, \quad (4.116)$$

$$= [a(\lambda)b(\lambda)]^{N(L+1)} \mathfrak{D}_{m+2}^{(A)}, \quad (4.117)$$

em que $\mathcal{A}(\xi) \equiv \mathcal{A}_j(\xi; \lambda)$, dada pela (4.113).

A obtenção de $Z_{2n-1}^{(1)}$ (4.93) é análoga. Primeiro, calculamos como o operador $B(\lambda_r)$ passa pelo produto de operadores $A(\lambda)$. Usando (4.96),

$$\begin{aligned} \left[\prod_{j=r+1}^N A(\lambda_j) \right] B(\lambda) &= \left[\prod_{j=r+1}^N \frac{a(\lambda - \lambda_j)}{b(\lambda - \lambda_j)} \right] B(\lambda) \prod_{j=r+1}^N A(\lambda_j) + \\ &+ \sum_{j=r+1}^N \frac{c}{b(\lambda_j - \lambda)} \left[\prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \frac{a(\lambda_j - \lambda_k)}{b(\lambda_j - \lambda_k)} \right] B(\lambda_j) A(\lambda) \prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N A(\lambda_k). \end{aligned} \quad (4.118)$$

Adicionalmente, para obter $B(\lambda)$ passando para a esquerda da multiplicação de $\check{D}(\lambda_j)$, precisamos combinar relações (4.98) e (4.99). Segue que

$$\begin{aligned} \left[\prod_{j=r+1}^N \check{D}(\lambda_j) \right] B(\lambda) &= \left[\prod_{j=r+1}^N \frac{a^2(\lambda + \lambda_j) - c^2}{a(\lambda + \lambda_j)b(\lambda + \lambda_j)} \right] B(\lambda) \prod_{j=r+1}^N \check{D}(\lambda_j) + \\ &+ \sum_{j=r+1}^N \frac{c}{a(\lambda + \lambda_j)} \left[\prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \frac{a(\lambda_k - \lambda_j)}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \right] \check{B}(\lambda_j) A(\lambda) \prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \check{D}(\lambda_k). \end{aligned} \quad (4.119)$$

Aplicando (4.119) sobre (4.118), mais o resultado

$$\begin{aligned} \sum_{l=r}^N \frac{\sin^2(2\eta)}{\sin(\lambda_l + \lambda_j + 2\eta) \sin(\lambda_l - \lambda_r + 2\eta)} \prod_{\substack{k=r \\ k \neq l}}^N \frac{\sin(\lambda_l - \lambda_k + 2\eta)}{\sin(\lambda_l - \lambda_k)} &= \frac{\sin(2\eta)}{\sin(\lambda_j + \lambda_r + 2\eta)} \times \\ &\times \prod_{k=r+1}^N \frac{\sin(\lambda_k + \lambda_j)}{\sin(\lambda_k + \lambda_j + 2\eta)}. \end{aligned} \quad (4.120)$$

obtemos

$$\begin{aligned} \left[\prod_{j=r+1}^N A(\lambda_j) \check{B}(\lambda_j) \right] B(\lambda_r) &= \sum_{j=r}^N \left(\frac{c}{a(\lambda_j - \lambda_r)} \prod_{k=r+1}^N \frac{a^2(\lambda_j + \lambda_k) - c^2}{a(\lambda_j + \lambda_k) b(\lambda_j + \lambda_k)} \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{a(\lambda_j - \lambda_k)}{b(\lambda_j - \lambda_k)} \right) \times \\ &\times B(\lambda_j) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N A(\lambda_k) \prod_{k=r+1}^N \check{D}(\lambda_k) + \sum_{j=r+1}^N \left(\frac{c}{a(\lambda_j + \lambda_r)} \prod_{k=r+1}^N \frac{b(\lambda_j + \lambda_k)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{a(\lambda_k - \lambda_j)}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \right) \times \\ &\times \check{B}(\lambda_j) \prod_{k=r}^N A(\lambda_k) \prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \check{D}(\lambda_k). \end{aligned} \quad (4.121)$$

Levando em conta (4.109) e (4.110), temos que a função de partição $Z_{2n-1}^{(1)}$ é dada por

$$\begin{aligned} Z_{2n-1}^{(1)} &= \prod_{l=N}^{N+L} \prod_{k=1}^N a(\lambda_k - \mu_l) b(\lambda_k + \mu_l) \left[\sum_{j=r}^N \left(\frac{c}{a(\lambda_j - \lambda_r) b(\lambda_j - \mu_{N+L})} \prod_{k=r}^N a(\lambda_j - \lambda_k) \times \right. \right. \\ &\times \prod_{k=r+1}^N \frac{a^2(\lambda_j + \lambda_k) - c^2}{a(\lambda_j + \lambda_k) b(\lambda_j + \lambda_k)} \prod_{l=N}^{N+L} \frac{b(\lambda_j - \mu_l)}{a(\lambda_j - \mu_l)} \left. \right) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_j - \lambda_k)} + \\ &+ \sum_{j=r+1}^N \left(\frac{c}{a(\lambda_j + \lambda_r) a(\lambda_j - \mu_{N+L})} \prod_{k=r+1}^N a(\lambda_k - \lambda_j) \prod_{k=r+1}^N \frac{b(\lambda_j + \lambda_k)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \prod_{l=N}^{N+L} \frac{a(\lambda_j + \mu_l)}{b(\lambda_j + \mu_l)} \right) \times \\ &\times \left. \prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \right], \end{aligned} \quad (4.122)$$

Fazendo $\mu_N = \dots = \mu_{N+L} = 0$, a expressão anterior se reduz a

$$\begin{aligned} Z_{2n-1}^{(1)} &= \prod_{k=1}^N [a(\lambda_k) b(\lambda_k)]^{L+1} \left[\sum_{j=r}^N \left(\frac{c}{a(\lambda_j - \lambda_r)} \prod_{k=r}^N a(\lambda_j - \lambda_k) \prod_{k=r+1}^N \frac{a^2(\lambda_j + \lambda_k) - c^2}{a(\lambda_j + \lambda_k) b(\lambda_j + \lambda_k)} \times \right. \right. \\ &\times \left. \frac{[b(\lambda_j)]^L}{[a(\lambda_j)]^{L+1}} \right) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_j - \lambda_k)} + \\ &+ \sum_{j=r+1}^N \left(\frac{c}{a(\lambda_j + \lambda_r)} \prod_{k=r+1}^N \frac{b(\lambda_j + \lambda_k) a(\lambda_k - \lambda_j)}{a(\lambda_j + \lambda_k)} \frac{[a(\lambda_j)]^L}{[b(\lambda_j)]^{L+1}} \right) \prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \left. \right], \end{aligned} \quad (4.123)$$

que, por sua vez, dá lugar a

$$Z_{2n-1}^{(1)} = \prod_{k=1}^N [a(\lambda_k)b(\lambda_k)]^{L+1} \left[\sum_{j=r}^N \mathcal{B}_j(\lambda_j) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_j - \lambda_k)} + \sum_{j=r+1}^N \mathcal{C}_j(\lambda_j) \prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \right], \quad (4.124)$$

com

$$\mathcal{B}_j(\lambda_j; \lambda) = c \left[\frac{a^2(\lambda_j + \lambda) - c^2}{a(\lambda_j + \lambda)b(\lambda_j + \lambda)} a(\lambda_j - \lambda) \right]^{N-r} \frac{[b(\lambda_j)]^L}{[a(\lambda_j)]^{L+1}}, \quad (4.125)$$

$$\mathcal{C}_j(\lambda_j; \lambda) = \frac{c}{a(\lambda_j + \lambda)} \left[\frac{b(\lambda_j + \lambda)a(\lambda - \lambda_j)}{a(\lambda_j + \lambda)} \right]^{N-r} \frac{[a(\lambda_j)]^L}{[b(\lambda_j)]^{L+1}}, \quad (4.126)$$

reconhecendo, mais uma vez, λ_j como a única variável dentro dos parênteses em (4.123). Observando a semelhança entre (4.114) e (4.124), concluímos que $Z_{2n-1}^{(1)}$ é a soma de dois determinantes, a saber

$$\sum_{j=r}^N \mathcal{B}_j(\lambda_j) \prod_{\substack{k=r \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_j - \lambda_k)} = (-1)^{N-r} \prod_{r \leq j < k \leq N} \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \begin{vmatrix} \mathcal{B}_r(\lambda_r) & \cdots & \mathcal{B}_N(\lambda_N) \\ \psi_{2,m}(\lambda_r) & \cdots & \psi_{2,m}(\lambda_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{m+2,m}(\lambda_r) & \cdots & \psi_{m+2,m}(\lambda_N) \end{vmatrix}, \quad (4.127)$$

$$\sum_{j=r+1}^N \mathcal{C}_j(\lambda_j) \prod_{\substack{k=r+1 \\ k \neq j}}^N \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)} = \prod_{r+1 \leq j < k \leq N} \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)} \begin{vmatrix} \mathcal{C}_{r+1}(\lambda_r) & \cdots & \mathcal{C}_N(\lambda_N) \\ \psi_{2,m-1}(\lambda_r) & \cdots & \psi_{2,m-1}(\lambda_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{m+1,m-1}(\lambda_r) & \cdots & \psi_{m+1,m-1}(\lambda_N) \end{vmatrix}. \quad (4.128)$$

Substituindo (4.127) e (4.128) em (4.124) e tomando os limites $\lambda_r, \dots, \lambda_N \rightarrow \lambda$, obtemos a expressão final

$$Z_{2n-1}^{(1)} = \frac{[a(\lambda)b(\lambda)]^{N(L+1)}}{\prod_{j=r}^N j!} \left(\begin{vmatrix} \mathcal{B}(\xi) & \partial_\xi \mathcal{B}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^{m+1} \mathcal{B}(\xi) \\ \psi_{2,m}(\xi) & \partial_\xi \psi_{2,m}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^{m+1} \psi_{2,m}(\xi) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{m+2,m}(\xi) & \partial_\xi \psi_{m+2,m}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^{m+1} \psi_{m+2,m}(\xi) \end{vmatrix}_{\xi=\lambda} + (N-r)! \times \right. \\ \left. \times \begin{vmatrix} \mathcal{C}(\xi) & \partial_\xi \mathcal{C}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^m \mathcal{C}(\xi) \\ \psi_{2,m-1}(\xi) & \partial_\xi \psi_{2,m-1}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^m \psi_{2,m-1}(\xi) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{m+1,m-1}(\xi) & \partial_\xi \psi_{m+1,m-1}(\xi) & \cdots & \partial_\xi^m \psi_{m+1,m-1}(\xi) \end{vmatrix}_{\xi=\lambda} \right), \quad (4.129)$$

$$= [a(\lambda)b(\lambda)]^{N(L+1)} (\mathfrak{D}_{m+2}^{(B)} + \mathfrak{D}_{m+1}^{(C)}), \quad (4.130)$$

com $\mathcal{B}(\xi) \equiv \mathcal{B}_j(\xi; \lambda)$, $\mathcal{C}(\xi) \equiv \mathcal{C}_j(\xi; \lambda)$ dados por (4.125) e (4.126), respectivamente. Especializando para $\eta = \lambda = \pi/4$, as expressões (4.117) e (4.130) concordam com o resultado (4.72) para a função de partição, obtido via contagem dos caminhos em [46].

Agora, podemos calcular a função de partição da rede completa, dada por (4.69): juntando os resultados (4.117), (4.130) com (4.70) e (4.71) referentes ao domínio $\Lambda_k^{(r)}$, temos

$$\begin{aligned} Z_{N,L} &= \frac{[a(\lambda)b(\lambda)]^{NL+1}}{cb(\lambda)} \sum_{n=1}^N \mathfrak{D}_n^{(A)} A_N^{(N-n+1)} + \left(\mathfrak{D}_n^{(B)} + \mathfrak{D}_{n-1}^{(C)} \right) D_N^{(N-n+1)}, \\ &= \frac{[a(\lambda)b(\lambda)]^{NL+1}}{cb(\lambda)} \sum_{n=1}^N \mathfrak{D}_n^{(A)} Z_N H_N^{(N-n+1)} \left[1 + \left(\frac{\mathfrak{D}_n^{(B)} + \mathfrak{D}_{n-1}^{(C)} - \mathfrak{D}_n^{(A)}}{\mathfrak{D}_n^{(A)}} \right) \frac{D_N^{(N-n+1)}}{Z_N H_N^{(N-n+1)}} \right]. \end{aligned} \quad (4.131)$$

$$(4.132)$$

Para estudar o comportamento assintótico de (4.132), transformaríamos esta soma em uma integral na qual aplicaríamos o método de Laplace. Espera-se que este integrando seja dado pela função

$$\mathcal{S}(\chi; u) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log \mathfrak{D}_n^{(A)}}{N} + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log H_N^{(N-n+1)}}{N}, \quad (4.133)$$

onde o logaritmo do termo entre colchetes em (4.132) é desprezado quando comparado a N , uma vez que os determinantes $\mathfrak{D}_n^{(A)}$, $\mathfrak{D}_n^{(B)}$ e $\mathfrak{D}_{n-1}^{(C)}$ têm a mesma ordem de grandeza e $Z_N H_N^{(N-n+1)} > D_N^{(N-n+1)}$.

Embora o segundo termo de (4.133) possa ser obtido por (4.81), ainda nos falta o conhecimento do comportamento do determinante $\mathfrak{D}_n^{(A)}$ (dado por (4.117)) para $n, N \gg 1$. Uma possível abordagem seria encontrar uma equação diferencial solucionada por este determinante usando a identidade de Sylvester (2.119), a exemplo do que foi feito nas Seções anteriores e nos trabalhos [28, 30, 45, 52]. Entretanto, diferentemente destes casos, falta-nos uma condição de contorno clara para fixar a constante de integração – o único ponto no qual conhecemos a função de partição $Z_{2n}^{(1)}$ é $\eta = \pi/4$, $a = b$, onde esta é dada por uma soma (Eq. (4.72)). Por isso, o problema de encontrar uma expressão analítica para a curva ártica do modelo de seis vértices com uma extremidade reflexiva no caso $a \neq b$ continua em aberto.

5 Considerações finais

Neste trabalho, dedicamo-nos ao estudo do modelo de seis vértices com condições de contorno do tipo parede de domínio e sua variante com uma extremidade reflexiva. Focamos, especialmente, na questão da separação de fases no regime desordenado. Como vimos, este fenômeno é causado pela regra do gelo, que induz a formação de regiões polarizadas na vizinhança das fronteiras ao escolhermos condições de contorno fixas. No limite contínuo da rede, as regiões congeladas têm dimensões da mesma ordem de grandeza que a região central desordenada, e elas são separadas pelas chamadas curvas árticas. Enquanto que as expressões analíticas para tais curvas no modelo de seis vértices com condição de contorno parede de domínio já haviam sido determinadas para quaisquer valores dos parâmetros espectrais, como fruto de uma série de trabalhos [44, 45, 56, 57], esta questão ainda estava em aberto para o caso da fronteira reflexiva.

Como ponto de partida, estudamos em detalhe a função de partição do modelo com condição de contorno DWBC, bem como três tipos de correlações: $H_N^{(r)}$, $G_N^{(r)}$, que definem as probabilidades na borda, e $F_N^{(r,s)}$, que é a probabilidade de haver um canto congelado na rede. A função de partição pode ser escrita em termos de um dos operadores da matriz de monodromia, bem como na forma do determinante de uma matriz, conhecido como determinante de Izergin-Korepin [25].

No que diz respeito às correlações, é possível estabelecer fórmulas de recorrência entre elas e a função de partição do modelo. Usando a fórmula de Izergin-Korepin, as recorrências dão lugar a representações determinantes para estas correlações, o que facilita o cálculo analítico do limite homogêneo destas funções. Estes determinantes são de matrizes $N \times N$, mesma dimensão da rede [56, 57]. Por outro lado, estas podem ser trocadas por matrizes de dimensões menores com o uso de algumas identidades que envolvem determinantes e polinômios ortogonais, bastando identificar a função peso adequada. Feito isto, $F_N^{(r,s)}$ passa a ser escrita em termos de um determinante $s \times s$ ($s < N$), enquanto $G_N^{(r)}$ e $H_N^{(r)}$, obtidas de $F_N^{(r,1)}$, são completamente reduzidas.

A representação de $F_N^{(r,s)}$ em termos de polinômios ortogonais é útil no estudo de separação de fases, sobretudo porque pode ser transformada em integrais múltiplas no plano complexo [56]. Esta representação, por sua vez, permite que encontremos as coordenadas paramétricas de uma porção da curva ártica pelo método do ponto de sela – as coordenadas (x, y) aparecem como constantes nas equações do ponto de sela, que são tratadas, reduzidas e desacopladas após a imposição da condensação de quase todas as raízes. As demais porções são obtidas por operações de simetria. Um ingrediente fundamental para expressar as correlações em termos de integrais é a função geradora de $H_N^{(r)}$, $h_N(z)$. Como ela aparece

nas equações do ponto de sela, foi necessário determinar seu comportamento assintótico no limite $N \rightarrow \infty$, o que foi feito relacionando esta função com a função de partição do modelo homogêneo e parcialmente heterogêneo [45]. Vale mencionar que, como passo intermediário, podemos determinar a posição dos pontos de contato entre a curva e as fronteiras pela aplicação do método do ponto de sela a representação integral de $G_N^{(r)}$, que é um caso especial de $F_N^{(r,s)}$.

Boa parte do roteiro descrito acima pode ser adaptado para o modelo com uma extremidade reflexiva. Contudo, por causa desta fronteira, é necessária a introdução de uma outra álgebra para tirar proveito da integrabilidade do modelo – enquanto vértices do volume satisfazem a equação de Yang-Baxter, os pesos da borda reflexiva satisfazem a equação de reflexão, proposta por Sklyanin [60].

Analogamente ao caso da fronteira parede de domínio, a função de partição pode ser escrita em termos do determinante de Tsuchiya [27]. Com isto, após encontrarmos as fórmulas de recorrência entre as novas correlações $H_N^{(r)}$, $G_N^{(r)}$ e $F_N^{(r,s)}$ e a função de partição deste modelo, pudemos escrevê-las em termos de determinantes de matrizes $N \times N$ (no caso em que a rede tem dimensões $2N \times N$). Tais determinantes são reduzidos com a aplicação de propriedades de polinômios bi-ortogonais [66], uma vez que agora necessariamente dependem de dois parâmetros espectrais (diferente do caso DWBC). Entretanto, não encontramos uma forma de usar esta representação para transformar $F_N^{(r,s)}$ em uma integral múltipla, o que frustra nossa tentativa de aplicar o método da EFP para obter as curvas árticas deste modelo [51].

Felizmente, uma abordagem alternativa para a obtenção analítica das curvas árticas no modelo de seis vértices foi desenvolvida – mais geométrica, vem da observação de que $\tilde{\Psi}(\xi; x, y) = 0$ (Eq. (4.40)), que vem do método do ponto de sela aplicado a representação integral da EFP (2.115), define uma família de linhas retas com respeito ao parâmetro ξ ; com isto, ao solucionar o sistema de equações $\tilde{\Psi} = \partial_\xi \tilde{\Psi} = 0$ para x e y , estamos determinando as coordenadas paramétricas de uma curva que é tangente a todas as linhas retas desta família. Assim, se pudessemos produzir tal conjunto de retas, a curva ártica sairia por consequência.

Para fazer isto, estende-se a rede original e modificam-se as condições de contorno, de modo que possam ser distinguidas duas subredes: uma delas terá fronteira que permita a emergência de uma região desordenada com dimensões similares a da rede original, e outra na qual a regra do gelo permita apenas um único caminho direcionado (Figura 4). Neste ponto, assume-se: 1) a região desordenada da primeira subrede é limitada pela mesma curva ártica que a da rede original; 2) o único caminho existente na segunda subrede torna-se uma linha reta no limite contínuo, tangente à curva ártica da primeira subrede. Os coeficientes que aparecem na equação destas retas podem ser encontrados pelo estudo do comportamento assintótico da função de partição da rede estendida, e dependem, mais uma

vez, da função geradora $h_N(z)$. Reproduzimos os resultados de [46] para a fronteira parede de domínio e, em seguida, adaptamos o método para o caso da fronteira reflexiva [52]. Em contraste com o primeiro caso, a contagem ponderada de caminhos no caso reflexivo requer maior refinamento devido a troca da interpretação dos vértices após o ponto de reflexão na fronteira direita. Contudo, no ponto especial $\Delta = 0$, $\mu = 0$, $\lambda = \pi/4$, os resultados do caso DWBC podem ser aplicados e a curva ártica foi extraída – trata-se de um semi-círculo, em concordância com os resultados numéricos [61].

Vale mencionar que os autores de [46] conjecturaram que a fórmula (4.67) pudesse ser diretamente aplicada para o modelo de seis vértices com qualquer condição de contorno – a única quantidade a ser calculada em cada caso seria a função $h_N(z)$. Comparando (4.67) e (4.86), vemos que elas são, de fato, similares se tomarmos $z \rightarrow \sqrt{z}$ na primeira.

Por outro lado, a contagem de caminhos não é imprescindível para o cálculo da função de partição da rede estendida – isto pode ser feito da maneira mais convencional, ou seja, interpretando as linhas da rede como elementos da matriz de monodromia e usando a álgebra de Yang-Baxter. Ao fazer isto, vimos que a função de partição para $\lambda \neq \pi/4$, mais uma vez, é escrita como um determinante – porém, a dificuldade agora é calcular o comportamento assintótico do mesmo para prosseguir com a aplicação do método da tangente. Outro obstáculo para a determinação da curva no caso geral é a função geradora, que só conhecemos em $\Delta = 0$, $\mu = 0$ (Eq. (3.143)).

Além disso, vale ressaltar que mesmo se conseguíssemos obter uma expressão analítica para a parte oeste da curva, não existem operações de simetria que possam mapeá-la na parte leste, em contato com a fronteira reflexiva. Ao mesmo tempo, não é possível estender a rede em outra direção de alguma forma que se possa aplicar o método da tangente diretamente a esta porção da curva. Isto é uma diferença marcante do caso DWBC, no qual a determinação de uma porção da curva leva ao conhecimento da curva completa. Portanto, o problema de obter a curva ártica no modelo de seis vértices com fronteira reflexiva no regime desordenado continua em aberto para valores arbitrários dos parâmetros espectrais.

APÊNDICES

A Polinômios ortogonais e bi-ortogonais

Nesta Seção, vamos introduzir os polinômios ortogonais [62] e bi-ortogonais [66] e expor, sem provar, alguns resultados aplicados no decorrer do texto.

Seja $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ um conjunto de polinômios em uma variável real, sendo $P_n(x)$ um polinômio de grau n . Dizemos que este conjunto é ortogonal com respeito a uma função peso $w(x)$ se

$$\int P_n(x)P_m(x)w(x)dx = I_n\delta_{nm}, \quad I_n \text{ constante}, \quad (\text{A.1})$$

em que a integral estende por toda a reta real e δ_{nm} é a delta de Kronecker. Considere, também, as constantes c_n , definidas como

$$c_n = \int x^n w(x)dx, \quad n = 0, 1, \dots \quad (\text{A.2})$$

Os c_n são chamados de momentos. Admitiremos que $P_n(x)$ sejam polinômios mônicos, isto é, o coeficiente de x^n é 1. Usando (A.1) e (A.2), pode-se verificar que

$$\begin{vmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_{n-1} \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_n \\ & & \ddots & \\ c_{n-1} & c_n & \cdots & c_{2n-2} \end{vmatrix} = I_0 I_1 \cdots I_{n-1}, \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{vmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_{n-2} & 1 \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_{n-1} & x \\ & & \ddots & & \\ c_{n-1} & c_n & \cdots & c_{2n-3} & x^{n-1} \end{vmatrix} = I_0 I_1 \cdots I_{n-2} P_{n-1}(x), \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{vmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & c_{n-k-1} & 1 & \cdots & 1 \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_{n-k} & x_1 & \cdots & x_k \\ & & \ddots & & & \ddots & \\ c_{n-1} & c_n & \cdots & c_{2n-k-2} & x_1^{n-1} & \cdots & x_k^{n-1} \end{vmatrix} = I_0 I_1 \cdots I_{n-k-1} \begin{vmatrix} P_{n-k}(x_1) & \cdots & P_{n-k}(x_k) \\ & \ddots & \\ P_{n-1}(x_1) & \cdots & P_{n-1}(x_k) \end{vmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

Relações análogas a (A.3)–(A.5) são válidas para os polinômios bi-ortogonais, que apresentaremos agora. Considere uma segunda sequência polinomial, $\{Q_m(y)\}_{m=0}^{\infty}$, $y \in \mathbb{R}$. Os conjuntos $\{P_n(x)\}$ e $\{Q_m(y)\}$ são ditos bi-ortogonais com respeito a $w(x, y)$ se satisfazem

$$\int P_n(x)Q_m(y)w(x, y)dxdy = J_n\delta_{nm}, \quad J_n \text{ constante}. \quad (\text{A.6})$$

Os bi-momentos, $c_{i,j}$, são uma generalização de (A.2),

$$c_{i,j} = \int x^i y^j w(x,y) dx dy, \quad i, j = 0, 1, \dots \quad (\text{A.7})$$

Assumindo que os Q_m também são polinômios mônicos, como P_n , são válidas

$$\begin{vmatrix} c_{0,0} & c_{0,1} & \cdots & c_{0,n-1} \\ c_{1,0} & c_{1,1} & \cdots & c_{1,n-1} \\ & & \vdots & \\ c_{n-1,0} & c_{n-1,1} & \cdots & c_{n-1,n-1} \end{vmatrix} = J_0 J_1 \dots J_{n-1}, \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{vmatrix} c_{0,0} & c_{0,1} & \cdots & c_{0,n-2} & 1 \\ c_{1,0} & c_{1,1} & \cdots & c_{1,n-2} & x \\ & & \vdots & & \\ c_{n-1,0} & c_{n-1,1} & \cdots & c_{n-1,n-2} & x^{n-1} \end{vmatrix} = J_0 J_1 \dots J_{n-2} P_{n-1}(x), \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{vmatrix} c_{0,0} & c_{0,1} & \cdots & c_{0,m-1} \\ c_{1,0} & c_{1,1} & \cdots & c_{1,n-1} \\ & & \vdots & \\ c_{m-2,0} & c_{m-2,1} & \cdots & c_{m-2,m-1} \\ 1 & y & \cdots & y^{m-1} \end{vmatrix} = J_0 J_1 \dots J_{n-2} Q_{n-1}(y), \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{vmatrix} c_{0,0} & c_{0,1} & \cdots & c_{0,n-k-1} & 1 & \cdots & 1 \\ c_{1,0} & c_{1,1} & \cdots & c_{1,n-k-1} & x_1 & \cdots & x_k \\ & & \vdots & & & \vdots & \\ c_{n-1,0} & c_{n-1,1} & \cdots & c_{n-1,n-k-1} & x_1^{n-1} & \cdots & x_k^{n-1} \end{vmatrix} = J_0 J_1 \dots J_{n-k-1} \begin{vmatrix} P_{n-k}(x_1) & \cdots & P_{n-k}(x_k) \\ \vdots & & \\ P_{n-1}(x_1) & \cdots & P_{n-1}(x_k) \end{vmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

B Método do ponto de sela

Estamos interessados no cálculo de integrais da forma

$$I(N) = \int_C g(z) e^{Nw(z)} dz, \quad z = x + iy, \quad (\text{B.1})$$

no limite assintótico $N \rightarrow \infty$, sendo $g(z)$ e $w(z)$ são funções analíticas ou com singularidades que preservam a convergência da integral. A ideia por trás do método do ponto de sela é a de que, com N grande, a contribuição predominante do integrando deve vir dos pontos estacionários de $w(z)$:

$$z = z_0 \quad \text{tal que} \quad \left. \frac{dw}{dz} \right|_{z=z_0} = 0. \quad (\text{B.2})$$

Para calcular a integral (B.1), deforma-se o contorno de integração C de modo a passar pelos pontos de sela, soluções de (B.2). Nestes pontos, $u(x, y) = \text{Re}[w(z)]$ passa por um extremo local e $v(x, y) = \text{Im}[w(z)]$ é aproximadamente constante ao longo do caminho. Expandindo $w(z)$ em torno de z_0 , supondo que as $n - 1$ primeiras derivadas se anulem, temos que

$$w(z) \approx w(z_0) + \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n w}{dz^n} \right|_{z_0} (z - z_0)^n, \quad (\text{B.3})$$

ou ainda, na forma polar,

$$\left. \frac{d^n w}{dz^n} \right|_{z_0} = r_0 e^{i\theta_0}, \quad z - z_0 = r e^{i\theta} \quad \implies \quad w(z) = w(z_0) + \frac{r_0 r^n}{n!} e^{i(\theta_0 + n\theta)}. \quad (\text{B.4})$$

Separando $w(z)$ nas partes real e imaginária, e impondo $v(x, y) \approx v(x_0, y_0)$, obtemos a relação que define a direção da curva de inclinação mais acentuada para $u(x, y)$:

$$\frac{r_0 r^n}{n!} \sin(\theta_0 + n\theta) = 0 \quad \implies \quad \theta = -\frac{\theta_0}{n} + \frac{p\pi}{n}, \quad p = 0, 1, \dots, n-1. \quad (\text{B.5})$$

Para que $u(x, y)$ tenha um máximo local em $z = z_0$, p deve ser ímpar. Estes são os caminhos de descida mais acentuada a partir de (x_0, y_0) , e são dados por

$$\theta_D = -\frac{\theta_0}{n} + (2l+1)\frac{\pi}{n}, \quad (\text{B.6})$$

$l \in \mathbb{Z}$. Se $n = 2$, apenas a primeira derivada de $w(z)$ se anula e o integrando de (B.1) pode ser aproximado para

$$g(z) e^{Nw(z)} \approx g(z_0) \exp\left(Nw(z_0) + \frac{Nr_0 r^2}{2} e^{i(2l+1)\pi}\right), \quad l = 0, 1, \quad (\text{B.7})$$

sendo que l deve ser escolhido para preservar o sentido do contorno C .

Deformando o contorno de integração a fim de passar pelo ponto de sela na direção definida por θ_D , e notando que os limites de integração em r podem ser tomados de $-\infty$ e ∞ sem alterar significativamente o valor da integral $I(N)$ quando $N \rightarrow \infty$, segue que

$$I(N) \approx g(z_0) e^{Nw(z_0)} \left[\frac{2\pi}{N|w''(z_0)|} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{i\theta_0}{2} + \frac{i\pi}{2}(2l+1) \right], \quad l = 0, 1, \quad (\text{B.8})$$

e $w''(z_0) \equiv dw/dz \Big|_{z_0}$. O estudo do método do ponto de sela em maior generalidade e rigor pode ser feito através da referência [73].

Referências

- 1 PAULING, L. The Structure and Entropy of Ice and of Other Crystals with Some Randomness of Atomic Arrangement. *Journal of the American Chemical Society*, v. 57, n. 12, p. 2680, 1935. Citado na página 1.
- 2 GIAUQUE, W. F.; STOUT, J. W. The Entropy of Water and the Third Law of Thermodynamics. The Heat Capacity of Ice from 15 to 273°K. *Journal of the American Chemical Society*, v. 58, n. 7, p. 1144, 1936. Citado na página 1.
- 3 SLATER, J. C. Theory of the transition in KH_2PO_4 . *The Journal of Chemical Physics*, v. 9, n. 1, p. 16, 1941. Citado na página 1.
- 4 WANG, R. F. et al. Artificial spin ice in a geometrically frustrated lattice of nanoscale ferromagnetic islands. *Nature*, v. 439, n. 19, p. 303, 2006. Citado na página 1.
- 5 GILBERT, I. et al. Emergent ice rule and magnetic charge screening from vertex frustration in artificial spin ice. *Nature Physics*, v. 10, p. 670, 2014. Citado na página 1.
- 6 JAUBERT, L. D. C.; MOESSNER, R. Multiferroicity in spin ice: Towards magnetic crystallography of $\text{Tb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ in a field. *Physical Review B*, v. 91, p. 214422, 2015. Citado na página 1.
- 7 LANTAGNE-HURTUBISE, E.; BHATTACHARJEE, S.; MOESSNER, R. Electric field control of emergent electrodynamics in quantum spin ice. *Physical Review B*, v. 96, p. 125145, 2017. Citado na página 1.
- 8 BRAMWELL, S. T.; GINGRAS, M. J. P. Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials. *Science*, v. 294, p. 1495, 2001. Citado na página 1.
- 9 HARRIS, M. J. et al. Geometrical frustration in the ferromagnetic pyrochlore $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$. *Physical Review Letters*, v. 79, n. 13, p. 2554, 1997. Citado na página 2.
- 10 LIEB, E. H. Exact solution of the problem of the entropy of two-dimensional ice. *Physical Review Letters*, v. 18, n. 17, p. 692, 1967. Citado na página 2.
- 11 LIEB, E. H. Exact solution of the two-dimensional Slater KDP model of a ferroelectric. *Physical Review Letters*, v. 19, n. 3, p. 108, 1967. Citado na página 2.
- 12 LIEB, E. H. Exact solution of the F model of an antiferroelectric. *Physical Review Letters*, v. 18, n. 24, p. 1046, 1967. Citado na página 2.
- 13 RYS, F. Über ein zweidimensionales klassisches Kronfigurationsmodell. *Helvetica Physics Acta*, v. 36, p. 537, 1963. Citado na página 2.
- 14 SUTHERLAND, B. Exact solution of a two-dimensional model for hydrogen-bonded crystals. *Physical Review Letters*, v. 19, n. 3, p. 103, 1967. Citado na página 2.
- 15 YANG, C. P. Exact solution of a model of two-dimensional ferroelectrics in an arbitrary electric field. *Physical Review Letters*, v. 19, n. 10, p. 586, 1967. Citado na página 2.

- 16 BETHE, H. Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. *Zeitschrift für Physik*, v. 71, n. 3, p. 205, 1931. Citado na página 2.
- 17 MCCOY, B. M.; WU, T. T. Hydrogen-bonded crystals and the anisotropic Heisenberg chain. *Nuovo Cimento B (1965–1970)*, v. 56, n. 2, p. 311, 1968. Citado na página 2.
- 18 BAXTER, R. J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. 2. ed. Londres, Reino Unido: Academic Press, 1982. Citado 4 vezes nas páginas 2, 5, 6 e 11.
- 19 KOREPIN, V. E.; BOGOLIUBOV, N. M.; IZERGIN, A. G. *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*. Cambridge, Reino Unido: Cambridge University Press, 1993. Citado 7 vezes nas páginas 2, 4, 5, 6, 8, 14 e 39.
- 20 BRASCAMP, H. J.; KUNZ, H.; WU, F. Y. Some rigorous results for the vertex model in statistical mechanics. *Journal of Mathematical Physics*, v. 14, p. 1927, 1973. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 11.
- 21 BATCHELOR, M. T. et al. Exact solution and interfacial tension of the six-vertex model with anti-periodic boundary conditions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 28, p. 2759, 1995. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 11.
- 22 FODA, O.; WHEELER, M. J. Partial domain wall partition functions. *Journal of High Energy Physics*, v. 2012, p. 186, 2012. Citado na página 2.
- 23 GALLEAS, W.; LAMERS, J. Reflection algebra and functional equations. *Nuclear Physics B*, v. 886, p. 1003, 2014. Citado na página 2.
- 24 BLEHER, P.; LIECHTY, K. Domain Wall Six-Vertex Model with Half-Turn Symmetry. *Constructive Approximation*, v. 47, p. 141, 2018. Citado na página 2.
- 25 IZERGIN, A. G.; COKER, D. A.; KOREPIN, V. E. Determinant formula for the six-vertex model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 25, n. 16, p. 4315, 1992. Citado 6 vezes nas páginas 2, 12, 14, 15, 18 e 92.
- 26 ZINN-JUSTIN, P. Six-vertex model with domain wall boundary conditions and one-matrix model. *Physical Review E*, v. 62, p. 3411, 2000. Citado na página 2.
- 27 TSUCHIYA, O. Determinant formula for the six-vertex model with reflecting end. *Journal of Mathematical Physics*, v. 39, n. 11, p. 5946, 1998. Citado 5 vezes nas páginas 2, 12, 39, 44 e 93.
- 28 RIBEIRO, G. A. P.; KOREPIN, V. E. Thermodynamic limit of the six-vertex model with reflecting end. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 48, n. 4, p. 045205, 2015. Citado 5 vezes nas páginas 2, 5, 13, 60 e 91.
- 29 TAVARES, T. S.; RIBEIRO, G. A. P.; KOREPIN, V. E. The entropy of the six-vertex model with variety of different boundary conditions. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2015, p. P06016, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 11.
- 30 KOREPIN, V. E.; ZINN-JUSTIN, P. Thermodynamic limit of the six-vertex model with domain wall boundary conditions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 33, n. 40, p. 7053, 2000. Citado 5 vezes nas páginas 2, 5, 12, 37 e 91.

- 31 FISHER, M. E. Walks, Walls, Wetting, and Melting. *Journal of Statistical Physics*, v. 34, n. 5-6, p. 667, 1984. Citado na página 3.
- 32 CERF, R.; KENYON, R. The Low-Temperature Expansion of the Wulff Crystal in the 3D Ising Model. *Communications in Mathematical Physics*, v. 222, p. 147, 2001. Citado na página 3.
- 33 FERRARI, P. L.; SPOHN, H. Step Fluctuations for a Faceted Crystal. *Journal of Statistical Physics*, v. 113, n. 1-2, p. 1, 2003. Citado na página 3.
- 34 JOCKUSCH, W.; PROPP, J.; SHOR, P. Random Domino Tilings and the Arctic Circle Theorem. 1998. ArXiv:math/9801068. Citado na página 3.
- 35 ELKIES, N. et al. Alternating-Sign Matrices and Domino Tilings (Part I). *Journal of Algebraic Combinatorics*, v. 1, p. 111, 1992. Citado na página 3.
- 36 STÉPHAN, J.-M. Extreme boundary conditions and random tilings. 2019. Notas de aula da escola SFT-Paris 2019. Citado na página 4.
- 37 KENYON, R.; OKOUNKOV, A.; SHEFFIELD, S. Dimers and amoebae. *Annals of Mathematics*, v. 163, p. 1019, 2006. Citado na página 4.
- 38 KENYON, R.; OKOUNKOV, A. Limit shapes and the complex Burgers equation. *Acta Mathematica*, v. 199, n. 2, p. 263, 2007. Citado na página 4.
- 39 KENYON, R. Height Fluctuations in the Honeycomb Dimer Model. *Communications in Mathematical Physics*, v. 281, p. 675, 2008. Citado na página 4.
- 40 BORODIN, A.; TONINELLI, F. Two-dimensional anisotropic KPZ growth and limit shapes. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2018, p. 083205, 2018. Citado na página 4.
- 41 GIER, J. de; KENYON, R.; WATSON, S. S. Limit shapes for the asymmetric five vertex model. 2018. ArXiv:1812.11934. Citado na página 4.
- 42 RESHETIKHIN, N.; SRIDHAR, A. Limit Shapes of the Stochastic Six Vertex Model. *Communications in Mathematical Physics*, v. 363, p. 741, 2018. Citado na página 4.
- 43 AGGARWAL, A. Limit Shapes and Local Statistics for the Stochastic Six-Vertex Model. *Communications in Mathematical Physics*, p. 1, 2019. Citado na página 4.
- 44 COLOMO, F.; PRONKO, A. G. The Arctic Circle revisited. *Contemporary Mathematics*, v. 458, p. 361, 2008. Citado 4 vezes nas páginas 4, 12, 78 e 92.
- 45 COLOMO, F.; PRONKO, A. G. The arctic curve of the domain-wall six-vertex model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 138, p. 662, 2010. Citado 13 vezes nas páginas 4, 12, 14, 24, 35, 57, 62, 65, 67, 83, 91, 92 e 93.
- 46 COLOMO, F.; SPORTIELLO, A. Arctic Curves of the Six-Vertex Model on Generic Domains: The Tangent Method. *Journal of Statistical Physics*, v. 164, n. 6, p. 1488, 2016. Citado 7 vezes nas páginas 4, 12, 62, 71, 72, 91 e 94.
- 47 AGGARWAL, A. Arctic Boundaries of the Ice Model on Three-Bundle Domains. *Inventiones Mathematicae*, p. 1, 2019. Citado na página 4.

- 48 COLOMO, F.; PRONKO, A. G.; SPORTIELLO, A. Arctic Curve of the Free-Fermion Six-Vertex Model in an L-Shaped Domain. *Journal of Statistical Physics*, v. 174, n. 1, p. 1, 2019. Citado na página 4.
- 49 ALLEGRA, N. et al. Inhomogeneous field theory inside the arctic circle. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2016, p. 053108, 2016. Citado na página 4.
- 50 STÉPHAN, J.-M. Return probability after a quench from a domain wall initial state in the spin-1/2 XXZ chain. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2017, p. 103108, 2017. Citado na página 4.
- 51 PASSOS, I. R.; RIBEIRO, G. A. P. Boundary correlations for the six-vertex model with reflecting end boundary condition. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2019, n. 8, p. 083101, 2019. Citado 5 vezes nas páginas 4, 13, 39, 46 e 93.
- 52 PASSOS, I. R.; RIBEIRO, G. A. P. Arctic curve of the free-fermion six-vertex model with reflecting end boundary condition. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2019, n. 11, p. 113103, 2019. Citado 7 vezes nas páginas 4, 13, 57, 65, 78, 91 e 94.
- 53 KOREPIN, V. E. Calculation of norms of Bethe wave functions. *Communications in Mathematical Physics*, v. 86, n. 3, p. 391, 1982. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 15.
- 54 ZINN-JUSTIN, P. The Influence of Boundary Conditions in the Six-Vertex Model. 2002. ArXiv:cond-mat/0205192. Citado na página 12.
- 55 ALLISON, D.; RESHETIKHIN, N. Numerical study of the 6-vertex model with domain wall boundary conditions. *Annales de l'Institut Fourier (Grenoble)*, v. 55, n. 6, p. 1847, 2005. Citado na página 12.
- 56 COLOMO, F.; PRONKO, A. G. Emptiness formation probability in the domain-wall six-vertex model. *Nuclear Physics B*, v. 798, n. 3, p. 340, 2008. Citado 6 vezes nas páginas 12, 14, 23, 28, 31 e 92.
- 57 BOGOLIUBOV, N. M.; PRONKO, A. G.; ZVONAREV, M. B. Boundary correlation functions of the six-vertex model. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 35, n. 27, p. 5525, 2002. Citado 5 vezes nas páginas 12, 14, 19, 23 e 92.
- 58 KITANINE, N. et al. Correlation functions of the open XXZ chain: I. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2007, n. 10, p. P10009, 2007. Citado na página 12.
- 59 KITANINE, N. et al. Correlation functions of the open XXZ chain: II. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2008, n. 07, p. P07010, 2008. Citado na página 12.
- 60 SKLYANIN, E. K. Boundary conditions for integrable quantum systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 21, p. 2375, 1988. Citado 4 vezes nas páginas 12, 39, 41 e 93.
- 61 LYBERG, I. et al. Phase separation in the six-vertex model with a variety of boundary conditions. *Journal of Mathematical Physics*, v. 59, p. 053301, 2018. Citado 4 vezes nas páginas 13, 64, 83 e 94.

- 62 CHIHARA, T. S. *An Introduction to Orthogonal Polynomials*. Nova York, Estados Unidos: Gordon and Breach, 1978. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 96.
- 63 BROWN, J. W.; CHURCHILL, R. V. *Complex Variables and Applications*. 7. ed. [S.l.]: McGraw Hill Higher Education, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 30 e 31.
- 64 KITANINE, N. et al. Spin-spin correlation functions of the XXX-1/2 Heisenberg chain in a magnetic field. *Nuclear Physics B*, v. 641, p. 487, 2002. Citado na página 31.
- 65 GANTMACHER, F. R. *The Theory of Matrices, Vol. I*. Nova York, Estados Unidos: Chelsea Publishing Company, 1960. Citado na página 36.
- 66 BERTOLA, M.; GEKHTMAN, M.; SZMIGIELSKI, J. Cauchy biorthogonal polynomials. *Journal of Approximation Theory*, v. 162, p. 832, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 39, 93 e 96.
- 67 DEBIN, B.; RUELLE, P. Tangent method for the arctic curve arising from freezing boundaries. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2019, p. 123105, 2019. Citado na página 62.
- 68 DEBIN, B.; FRANCESCO, P. D.; GUITTER, E. Arctic curves of the twenty-vertex model with domain wall boundaries. 2019. ArXiv:1910.06833. Citado na página 62.
- 69 FRANCESCO, P. D.; GUITTER, E. Arctic curves for paths with arbitrary starting points: a tangent method approach. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 51, p. 355201, 2018. Citado na página 62.
- 70 FRANCESCO, P. D.; GUITTER, E. A tangent method derivation of the arctic curve for q -weighted paths with arbitrary starting points. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, v. 52, p. 115205, 2019. Citado na página 62.
- 71 FRANCESCO, P. D.; GUITTER, E. The Arctic Curve for Aztec Rectangles with Defects via the Tangent Method. *Journal of Statistical Physics*, v. 176, n. 3, p. 639, 2019. Citado na página 62.
- 72 LAWRENCE, J. D. *A Catalog of Special Plane Curves*. Nova York, Estados Unidos: Dover Publications, Inc., 1972. Citado na página 74.
- 73 BLEISTEIN, N.; HANDELSMAN, R. A. *Asymptotic Expansions of Integrals*. 2. ed. Nova York, Estados Unidos: Dover Publications, 1986. Citado 2 vezes nas páginas 76 e 99.