

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia

Programa de Pós-Graduação em Física

Termodinâmica de Modelos Integráveis

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos para obtenção do título de mestre. Área de concentração: Física Estatística.

Thiago Silva Tavares

São Carlos, 05 de dezembro de 2013

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

T231tm

Tavares, Thiago Silva.
Termodinâmica de modelos integráveis / Thiago Silva
Tavares. -- São Carlos : UFSCar, 2014.
74 f.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São
Carlos, 2014.

1. Física estatística. 2. Termodinâmica. 3. Modelos
integráveis. 4. Matriz de transferência quântica. 5. Ansatz de
Bethe. I. Título.

CDD: 530.13 (20ª)

THIAGO SILVA TAVARES

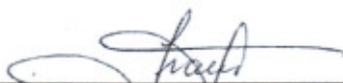
Dissertação de mestrado submetida à Coordenação do Programa de Pós-Graduação em Física, da Universidade Federal de São Carlos, como requisito parcial para a obtenção do título de mestre em física.

Aprovado em: 20 de Janeiro de 2014

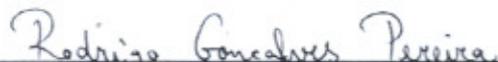
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Giuliano Augustus Pavan Ribeiro (Orientador)
Universidade Federal de São Carlos - DF



Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz
Universidade de São Paulo - IFSC



Prof. Dr. Rodrigo Gonçalves Pereira
Universidade de São Paulo - IFSC

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, Giuliano Augustus Pavan Ribeiro, por me guiar desde a iniciação científica e me fortalecer nos caminhos da perseverança.

Agradeço aos meus pais, Angela Fatima Silva Tavares e Paulo Eugênio Tavares, pelo amor, apoio e carinho indeléveis.

Agradeço ao meu irmão, Paulo André Tavares, pelo carinho, amizade, pelos diversos momentos de descontração e pelas conversas que tantas vezes me mantiveram em equilíbrio. Agradeço também pela “cunhada”, Mirelle Mafeis, e as suas deliciosas sobremesas.

Agradeço a todos os meus amigos de graduação, tanto da Física como da Engenharia Física, pela amizade que muito significa para mim. Particularmente gostaria de agradecer ao Victor Bittencourt pelas discussões em física e por me ajudar em questões pessoais.

Agradeço também aos meus amigos Natália Lumi, Samuel Lima, Otacílio Matosa dos Santos e a todos meus amigos de Limeira por contaminar a minha vida com momentos alegres.

Agradeço profundamente a todos os professores que contribuíram na minha formação em todos os níveis de ensino.

Agradeço à FAPESP pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta dissertação de mestrado estudamos propriedades termodinâmicas de cadeias de spin integráveis, como o modelo de Heisenberg e suas generalizações de spin- s e com interações competitivas. Para a obtenção das propriedades termodinâmicas utilizamos o método da matriz de transferência quântica(QTM). A partir das propriedades de analiticidade do maior auto-valor da QTM e de funções auxiliares apropriadamente definidas, obtivemos um conjunto finito de equações integrais não lineares que descrevem a termodinâmica dos modelos em questão. Estudamos transições de fases quânticas nestes modelos variando os parâmetros h (campo magnético) e ω_j , que acopla as diferentes interações competitivas.

Abstract

In this work we study the thermodynamics of integrable spin chains, like the Heisenberg model and its spin- s generalization with competing interactions. We have used the quantum transfer matrix approach and obtained a finite set of non-linear integral equations in each case. From the numerical solution of these equations we plotted phase diagrams by varying the parameters \mathfrak{h} (external magnetic field) and ω_j , which couples the different competitive interactions.

Sumário

1	Modelos de Vértices e Cadeias de Spin Integráveis	7
1.1	Modelos de Vértices	7
1.1.1	Integrabilidade de Yang-Baxter	9
1.1.2	Modelo de Seis Vértices Simétrico	11
1.1.3	Modelo de Heisenberg e Generalizações Integráveis	12
1.2	Hierarquia de Fusão	17
2	Matriz de Transferência Quântica Spin-$\frac{1}{2}$	21
2.1	Decomposição de Trotter-Suzuki	21
2.1.1	Matriz de Transferência Quântica: Caso Homogêneo	22
2.1.2	Matriz de Transferência Quântica: Caso Heterogêneo	25
2.2	Propriedades de Analiticidade e Equações Integrais Não Lineares	28
3	Matriz de Transferência Quântica Spin-s	43
3.1	Hierarquia de Fusão para Matriz de Transferência Quântica	43
3.1.1	Hierarquia de Fusão	44
3.1.2	Sistema T e Sistema Y	47
3.2	Propriedades de Analiticidade e Equações Integrais Não Lineares	49
4	Anisotropia Uniaxial Spin-$\frac{1}{2}$	53
4.1	$0 \leq \Delta = \cos(\gamma) < 1$	53
4.2	$\Delta = \cosh(\gamma) > 1$	56
5	Diagrama de Fases	59
5.1	Resultados	59

Lista de Figuras

1.1	Ilustração de uma rede retangular de N linhas e L colunas onde destacamos a representação da matriz de transferência linha a linha a), na qual estão definidos os pesos de Boltzmann associados a cada vértice b).	8
2.1	Modelo de vértices, linhas alternadas; e Matriz de Transferência Quântica.	24
2.2	Modelo de vértices linhas alternadas $M = 3$; e Matriz de Transferência Quântica.	27
2.3	Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 48$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$.	31
2.4	Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 24$, $M = 2$, $\theta_1 = 0.5$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$	31
2.5	Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 16$, $M = 3$, $\theta_1 = 0.32$, $\theta_2 = 0.77$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$	31
2.6	Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 48$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 0.25$	32
2.7	Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 48$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 5.0$ e $\beta = 1$	32
2.8	Zeros(vermelho) e pólos(azul) da função \mathfrak{b} . $N = 48$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$. Admitindo que este padrão prevaleça para N arbitrário, podemos tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica da função \mathfrak{b} . O mesmo é válido para a função $\bar{\mathfrak{b}}$	35
2.9	Trajetórias para o cálculo da transformada de Fourier via teorema dos resíduos. Esquerda $k < 0$. Direita $k \geq 0$	36
2.10	Relacionando transformadas de Fourier de funções analíticas numa faixa do plano complexo.	37
2.11	Gráfico de $\frac{1}{ \lambda(x+\alpha i) }$, $\alpha = 0, \frac{1}{2}, 1$ com $N = 24$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$. Os picos assinalam a existência de zeros do maior auto-valor com parte imaginária próxima a 1.	39
5.1	Entropia $S(\mathfrak{h}, \theta)$ para $T = 0.03$, spin $s = 1/2, 1, 3/2, 2$ e $M = 2$	60

5.2	Calor específico como função da temperatura para $M = 2$, $\theta = 1.5$, $\mathfrak{h} =$ 0, 0.5, 1, 1.5, 2, 3 e spin $s = 1/2, 1, 3/2, 2$	61
5.3	Entropia $S(\mathfrak{h}, \theta)$ para $T = 0.03$, spin $s = 1/2$ e $M = 3, 4$	62
5.4	Entropia $S(\mathfrak{h}, \theta)$ para $T = 0.03$, $s = \frac{1}{2}$, $M = 2$ e $\Delta = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	62

Lista de Tabelas

2.1	Diagonalização direta e ansatz de Bethe: Estrutura de zeros associada ao maior auto-valor. $M = 1, \beta = 1, \mathfrak{h} = 0$	29
2.2	Diagonalização direta e ansatz de Bethe: Estrutura de zeros associada ao maior auto-valor. $M = 2, \beta = 1, \mathfrak{h} = 0$	30
2.3	Diagonalização direta e ansatz de Bethe: Estrutura de zeros associada ao maior auto-valor. $M = 3, \beta = 1, \mathfrak{h} = 0$	30

Introdução

O interesse em cadeias de spin surgiu com a busca de uma explicação plausível para o comportamento magnético da matéria.

Já era conhecido que a mecânica clássica era incapaz de descrever o comportamento magnético da matéria [1, 2]. Com isto, buscava-se encontrar um modelo que contivesse os ingredientes fundamentais para descrever o ferromagnetismo.

Neste contexto, Lenz propôs em 1920 um modelo com interação entre momentos de dipólo magnético atômicos [3]. Este modelo foi resolvido por Ising em uma dimensão, que mostrou não haver transições de fase nesta situação e concluiu, erroneamente, o mesmo para dimensões maiores.

Em 1928 Heisenberg propôs que o ferromagnetismo tinha origem eletrostática. Com a conjugação da interação de Coulomb entre elétrons e o princípio de exclusão de Pauli, ele mostrou que o Hamiltoniano poderia ser representado em termos de um modelo efetivo que levasse em conta a interação entre os spins dos diferentes átomos de uma rede.

Uma forma simples de representar isto é

$$H_1 = \sum_{\langle i,j \rangle}^L J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

sendo que a soma sobre $\langle i, j \rangle$ denota a soma sobre todos os pares de átomos. Note que este Hamiltoniano é invariante por rotação e ignora completamente as simetrias específicas da rede de átomos. Isto é um reflexo do fato do Hamiltoniano de muitos corpos original, que representa a rede, ser independente de spin. Outros possíveis Hamiltonianos que possuem tal propriedade são

$$H_2 = \sum_{\langle ijk \rangle}^L \alpha_{ijk} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k + \sum_{\langle ij \rangle}^L J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2)$$

$$H_3 = \sum_{\langle ij \rangle}^L J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + c_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2, \quad (3)$$

sendo que $\langle ijk \rangle$ denota a soma sobre todas as trincas de átomos. Note que em H_3 estamos assumindo a possibilidade de spin $s > \frac{1}{2}$, pois para o caso $s = \frac{1}{2}$ a contribuição extra

acoplada aos c_{ij} 's pode ser reescrita nos levando a uma simples translação de (1) e uma redefinição dos valores de J_{ij} . Nos Hamiltonianos H_1 e H_2 também poderíamos pensar que cada operador de spin atua em um espaço de spin s .

Existem também Hamiltonianos que não possuem invariância por rotação como

$$H_{xyz} = \sum_{\langle ij \rangle}^L J_{ij}^x S_i^x S_j^x + J_{ij}^y S_i^y S_j^y + J_{ij}^z S_i^z S_j^z, \quad (4)$$

$$H_{\mathfrak{h}} = \sum_{\langle ij \rangle}^L J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathfrak{h} \sum_i^L S_i^z, \quad (5)$$

evidentemente se estes Hamiltonianos podem ser vistos como modelos efetivos na mesma perspectiva que (1), então o Hamiltoniano original deve conter termos dependentes de spin, eventualmente um acoplamento de spin-órbita justificando a anisotropia em H_{xyz} ou interação com campo externo, justificando $H_{\mathfrak{h}}$.

Mesmo com tamanha simplificação do problema de muitos corpos original, a extração do espectro de (1) bem como a obtenção de propriedades termodinâmicas permanece altamente não trivial. H. Bethe deu o primeiro passo neste sentido[5]. Considerando uma cadeia unidimensional com condições periódicas de contorno e interação entre primeiros vizinhos, isto é

$$H = J \sum_{i=1}^L \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (6)$$

Bethe propôs uma função de onda de muitos corpos que interagem através de uma sequência de espalhamentos fatorizáveis dois-a-dois[5, 6]. Esta hipótese, genericamente conhecida como ansatz de Bethe, fornece os auto-valores e auto-vetores uma vez resolvido um sistema de equações não lineares, que são as equações de Bethe.

Uma grande surpresa veio quando, em 1967, E. Lieb diagonaliza a matriz de transferência do modelo de seis vértices totalmente simétrico pelo ansatz de Bethe[7]. De fato, a matriz de transferência do modelo de seis vértices simétrico comuta com o modelo de Heisenberg[8] de modo que podemos escolher uma base comum de auto-estados.

A solubilidade do modelo de Heisenberg nos abre a novas perguntas: “Quais outros modelos quânticos seriam exatamente solúveis? Qual é o critério de solubilidade/integrabilidade?” Deve-se dizer que até os dias presentes existe apenas uma resposta parcial destas perguntas.

A razão disto é porque o teorema de Liouville, da mecânica clássica, nos diz que se o espaço de fase com $2n$ graus de liberdade de um dado sistema possui n quantidades conservadas independentes em involução, então o sistema é dito integrável e a solução

pode ser obtida por quadraturas.

$$\{I_i, I_j\} = 0 \quad i, j = 1, \dots, n, \quad (7)$$

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i \nabla_{\mathbf{q}, \mathbf{p}} I_i = 0 \iff \lambda_i = 0 \quad \forall i. \quad (8)$$

A transcrição mais plausível deste critério seria trocar parênteses de Poisson por comutadores. Esta proposta apresenta sérias dificuldades. Por exemplo, devemos nos perguntar: “O que seriam quantidades independentes neste caso? Como obter auto-estados e auto-valores?” Enquanto a resposta da primeira pergunta permanece totalmente aberta, uma sucessão de fatos responde parcialmente a segunda.

Baxter em 1972 mostrou que, se os pesos de Boltzmann do modelo de vértices satisfizerem uma restrição, então chamada de relação triângulo-estrela, era possível diagonalizar a respectiva matriz de transferência[9]¹. Encontrando ainda uma parametrização adequada destes pesos, Baxter mostrou a comutatividade de uma família de matrizes de transferência, comutatividade esta que implica na existência de quantidades conservadas:

$$[T(\lambda), T(\mu)] \Rightarrow [T^{(n)}(\lambda_0), T^{(m)}(\mu_0)] = 0, \quad (9)$$

para todos os pontos λ_0 e μ_0 onde $T(\lambda)$ é analítica. Vemos uma notável semelhança entre o par (7) e (9), (clássico \leftrightarrow quântico).

A então chamada relação triângulo-estrela, apareceu anteriormente na solução proposta por Yang para um gás de Fermi com interação repulsiva do tipo delta[6], motivo pelo qual ela é conhecida nos dias atuais como equação de Yang-Baxter.

Isto abriu espaço para que Faddeev e colaboradores (Escola de Leningrado) desenvolvessem o método do espalhamento inverso quântico[10]. Este método está baseado na chamada relação fundamental, uma condição suficiente para a comutatividade das matrizes de transferência do modelo de vértices. Esta relação fundamental permitiu formular o ansatz de Bethe em termos essencialmente algébricos. Além disto, o método do espalhamento inverso quântico proporcionou a descoberta de novos modelos exatamente solúveis, como cadeias de spin- s [11].

Com o advento do método do espalhamento inverso quântico, as idéias de matriz de transferência, ansatz de Bethe e equação de Yang-Baxter foram interligadas. Isto sedimentou a idéia de que a equação de Yang-Baxter constitui a base fundamental de modelos integráveis, sendo utilizada na solução de uma variedade de modelos clássicos e quânticos.

¹Isto foi feito particularmente no caso do modelo de oito vértices.

O passo seguinte ao cálculo do espectro seria a obtenção de propriedades termodinâmicas das cadeias de spin integráveis. Yang e Yang foram os primeiros a criar um procedimento para esta finalidade, não sendo utilizado, contudo, para uma cadeia de spin, mas para o gás de bósons com interação do tipo delta[12]. Este procedimento, que ficou conhecido por ansatz de Bethe Termodinâmico (TBA), foi estendido independentemente por Gaudin e Takahashi na obtenção das propriedades termodinâmicas do modelo de Heisenberg spin- $\frac{1}{2}$ [13, 14].

A extensão do TBA para o modelo de Heisenberg encontrou, no entanto, dificuldades práticas. No TBA assume-se que as raízes de Bethe que caracterizam estados excitados admitem certos padrões (strings), tanto mais evidentes quanto mais aproximamos do limite termodinâmico. No limite termodinâmico estes padrões são caracterizados por densidades de n -strings e n -holes. Impondo a minimização do funcional da energia-livre, encontrou-se uma infinidade de equações integrais não-lineares para descrever a termodinâmica. Por causa do número infinito de equações, torna-se necessário escolher um número finito de equações relevantes na obtenção de resultados numéricos, visto que não dispomos de métodos analíticos para a solução de equações integrais não lineares como estas.

Como alternativa ao TBA, Klümper introduziu um método para o cálculo das propriedades termodinâmicas[15, 16]. As idéias fundamentais por trás do método de Klümper são a decomposição de Trotter-Suzuki[17, 18, 19, 20] e a estreita relação existente entre propriedades de analiticidade do auto-valor e ansatz de Bethe. A decomposição de Trotter-Suzuki nada mais é que um mapeamento da função de partição do Hamiltoniano quântico na função de partição de um modelo de vértices com linhas alternadas. Com isto a energia-livre do modelo quântico pode ser dada apenas em termos do maior auto-valor de uma nova matriz de transferência, a chamada matriz de transferência quântica(QTM).

O que torna esta abordagem interessante é o fato de que deste método resulta um número finito de equações integrais não lineares a serem resolvidas para certas funções auxiliares.

A determinação destas funções auxiliares no método QTM ainda é feita de forma fenomenológica, ou seja, ainda não existe uma regra que permite inferir tais funções a partir do modelo (Yang-Baxter) integrável. Não obstante, tamanha é a eficiência do método, fora ele utilizado na descrição de diversos modelos integráveis[16, 21, 22, 23, 24, 25].

No entanto, o método QTM ainda não foi totalmente explorado na descrição das propriedades termodinâmicas de cadeias de spin com interações competitivas[26, 27, 28]. Estas interações competitivas podem ser introduzidas de algumas formas[29, 30, 31, 32,

33, 34, 35]. Em [29, 30, 31] as várias interações competitivas resultam das derivadas logarítmicas de mais alta ordem da matriz de transferência. Todavia, nesta dissertação, consideramos a idéia contida em [32, 33, 34, 35] onde as diferentes interações competitivas se devem à introdução de heterogeneidade na matriz de transferência. Com isto conseguimos reproduzir a termodinâmica de cadeias de spin integráveis, como [24, 25, 26]:

$$\mathcal{H}(\theta) = \frac{1}{4 + 4\theta^2} \left[\sum_{j=1}^{2L} -2 - \theta^2 + 2\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} + (-1)^j \theta \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} \times \vec{\sigma}_{j+2} + \theta^2 \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+2} \right], \quad (10)$$

$$\mathcal{H}^{(1)} = \left[\sum_{i=1}^L \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 \right], \quad (11)$$

e generalizações[36]. Se compararmos (2) e (3) com (10) e (11), vemos uma clara distinção no que se refere à generalidade dos coeficientes que acoplam as interações. A integrabilidade certamente impõe vínculos entre estes coeficientes sendo, portanto, um caso especial. No entanto, são exatamente estes modelos que nos permitem executar cálculos exatos, possibilitando uma melhor compreensão, não apenas do caso integrável, mas também dos demais. Deve-se dizer que sistemas de bicadeias com interações parecidas a (10) foram sintetizados recentemente[37], o que torna atrativo o estudo de cadeias de spin unidimensionais com interações tão gerais quanto possível.

Nos capítulos que seguem aplicaremos o método QTM para diversos modelos com interações competitivas. Para tanto, estruturamos esta dissertação da seguinte forma:

No capítulo 1 revisamos conceitos como modelos de vértices, integrabilidade de Yang-Baxter, hierarquia de fusão e a relação destes com as cadeias quânticas de spin integráveis. Ao final deste capítulo o leitor terá conhecimento dos modelos que estaremos interessados nesta dissertação.

No capítulo 2 apresentamos o método da matriz de transferência quântica, aplicando-o ao caso dos modelos integráveis de spin- $\frac{1}{2}$ isotrópico e com diversas interações competitivas. Este capítulo tem caráter mais pedagógico, onde exibimos um número maior de detalhes com relação às hipóteses de analiticidade e à derivação das equações integrais não lineares. A seção 2.1, onde mostramos a decomposição de Trotter-Suzuki, tem caráter geral e é aplicável, sem grandes modificações, às situações abordadas nos capítulos seguintes.

No capítulo 3 aplicamos o método da matriz de transferência quântica a modelos de spin- s integráveis obtidos a partir do processo de fusão. Neste capítulo mostramos a hierarquia de fusão para as matrizes de transferência quântica, bem como os chamados sistemas T e Y , que fornecem relações importantes para definição das funções auxiliares apropriadas na obtenção das equações integrais não lineares.

No capítulo 4 o método da matriz de transferência quântica é aplicado a modelos de spin- $\frac{1}{2}$ integráveis com anisotropia uniaxial e diversas interações competitivas.

No capítulo 5 mostramos os resultados obtidos da solução numérica das equações integrais previamente estabelecidas. O enfoque é dado à identificação das fases quânticas pelo diagrama de fases obtido a baixa temperatura, mas não nula. Em seguida tecemos uma breve conclusão.

Capítulo 1

Modelos de Vértices e Cadeias de Spin Integráveis

Neste capítulo introduzimos os modelos de vértices formulados em uma rede bidimensional e retangular. Discutimos como cálculo da função de partição destes modelos pode, sob certas circunstâncias, ser colocado em termos da diagonalização de uma matriz, a chamada matriz de transferência linha-a-linha. No entanto, a efetiva diagonalização desta matriz é ainda um problema muito complicado, o que requer um critério de integrabilidade e um método de solução, seção 1.1.1. Na seção 1.1.2 exibimos explicitamente as parametrizações do modelo seis vértices simétrico que satisfazem a condição de integrabilidade. Da condição de integrabilidade adotada resulta que a matriz de transferência pertence a uma família de operadores comutantes. Na seção 1.1.3 mostramos que pertencem também a esta família operadores de interações locais, os quais identificamos como Hamiltonianos de cadeias quânticas de spin- $\frac{1}{2}$. Para finalizar mostramos na seção 1.2 um processo de fusão que permite obter modelos de vértices cuja matriz de transferência comuta com Hamiltonianos de cadeias quânticas de spin- s .

1.1 Modelos de Vértices

Considere a versão bidimensional e retangular do modelo de vértices com N linhas e L colunas como na Figura 1.1.

Cada vértice ${}^j_i\mathcal{L}$ da rede contribui com uma energia local ou um peso de Boltzmann na função de partição, sendo que o peso (${}^j_i\mathcal{L} = e^{-\beta\mathcal{E}_{ij}}$) depende da configuração particular em que o vértice se encontra. A configuração se dá quando atribuímos valores aos graus de liberdade associados às arestas do vértice. Os γ 's estão associados às arestas horizontais e os α 's às arestas verticais. No caso mais simples podemos imaginar que todos α_i^j 's e γ_i^j 's

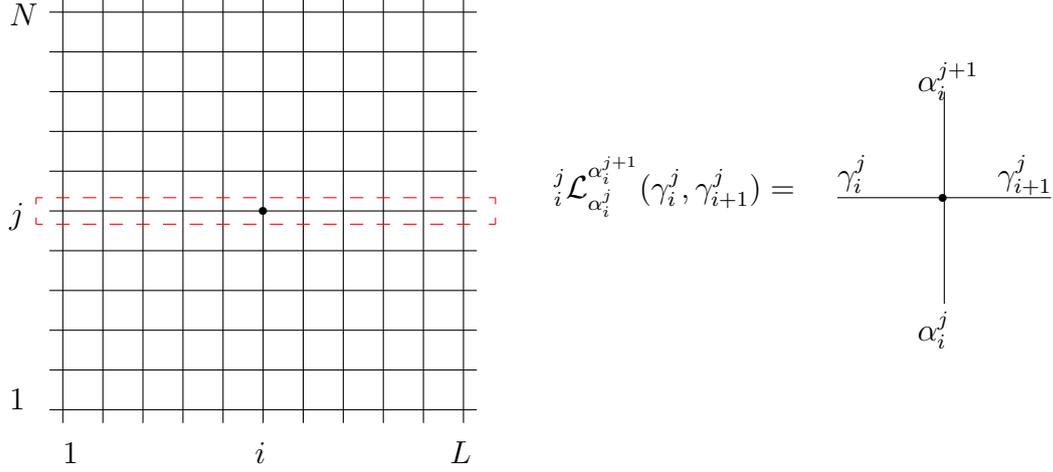


Figura 1.1: Ilustração de uma rede retangular de N linhas e L colunas onde destacamos a representação da matriz de transferência linha a linha a), na qual estão definidos os pesos de Boltzmann associados a cada vértice b).

possuem o mesmo número de possíveis valores, sendo que a cada um deles podemos, por exemplo, atribuir os valores $+1$ e -1 . Para um vértice haveria um total de 2^4 configurações possíveis. Entretanto para o estado global não temos 2^{4NL} possíveis configurações já que vértices vizinhos compartilham uma aresta. Temos, portanto, um problema combinatorial para o cálculo da função de partição.

No caso mais geral os α_i^j 's não precisam ter o mesmo número de possíveis valores. Por exemplo, $\alpha_1^1 = -1, 1$ e $\alpha_2^1 = -1, 0, 1$. O mesmo acontece com os γ_i^j 's. Cada um podendo assumir $q_{\alpha_i^j}$ e $q_{\gamma_i^j}$ valores. Mesmo no caso em que $q_{\alpha_i^j} = q_{\gamma_i^j} = n$ para todo i e j , o problema pode ser heterogêneo no sentido que

$${}^j\mathcal{L}_a^b(c, d) \neq {}^n\mathcal{L}_a^b(c, d) \quad \text{se } (i, j) \neq (m, n). \quad (1.1)$$

A função de partição deste modelo de vértices é dada por

$$Z = \sum_{\langle \alpha \rangle} \sum_{\langle \gamma \rangle} \prod_{i=1}^L \prod_{j=1}^N {}^j\mathcal{L}_{\alpha_i^j}^{\alpha_i^{j+1}}(\gamma_i^j, \gamma_{i+1}^j), \quad (1.2)$$

$$= \sum_{\langle \alpha \rangle} \prod_{j=1}^N \left[\sum_{\langle \gamma^j \rangle} \prod_{i=1}^L {}^j\mathcal{L}_{\alpha_i^j}^{\alpha_i^{j+1}}(\gamma_i^j, \gamma_{i+1}^j) \right], \quad (1.3)$$

onde os símbolos $\langle \alpha \rangle$ e $\langle \gamma \rangle$ denotam os possíveis valores que todos os α_i^j 's e γ_i^j 's podem assumir. A última equação se deve ao fato de que a soma sobre valores das arestas horizontais pode ser realizada independentemente das arestas verticais. A quantidade entre colchetes pode ser vista como um operador T_j cujo elemento de matriz $T_{\alpha_1^j, \dots, \alpha_L^j}^{\alpha_1^{j+1}, \dots, \alpha_L^{j+1}}$

é especificado uma vez que atribuímos os valores aos α^j 's e α^{j+1} 's. Assumindo condições periódicas de contorno na vertical, isto é, $\alpha_i^{N+1} = \alpha_i^1$, temos

$$Z = \sum_{\langle \alpha \rangle} \prod_{j=1}^N T_j = \text{Tr} \left[\prod_{j=1}^N T_j \right]. \quad (1.4)$$

Para o caso em que temos homogeneidade vertical ${}^j\mathcal{L} = {}^k\mathcal{L}$, teremos $T_j = T_k = T$ de modo que

$$Z = \text{Tr} [T^N] = \sum_{k=1}^{\#} \Lambda_k^N \approx \Lambda_{max}^N \quad \text{para } N \gg 1, \quad (1.5)$$

sendo $\# = \prod_{i=1}^L q_{\alpha_i}^j$ a dimensão da matriz de transferência. Se impusermos condições periódicas de contorno na horizontal e $q_{\gamma_i^j} = q_{\gamma_m^j}$ para todos os pares (i, m) , podemos reescrever T da seguinte forma

$$T = \sum_{\langle \gamma \rangle} \prod_{i=1}^L {}_i\mathcal{L}_{\alpha_i^j}^{\alpha_i^{j+1}}(\gamma_i^j, \gamma_{i+1}^j) = \text{Tr}_A [\mathcal{L}_{AL} \mathcal{L}_{AL-1} \dots \mathcal{L}_{A1}] = \text{Tr}_A [\mathcal{T}_A], \quad (1.6)$$

sendo que Tr_A denota o traço no espaço horizontal, também chamado de espaço auxiliar, e

$$\mathcal{L}_{Ak} = \sum_{a,b,c,d} {}_k\mathcal{L}_d^c(a, b) e_{ab}^{(A)} \otimes e_{cd}^{(k)}, \quad (1.7)$$

onde as matrizes e_{ab} são as matrizes de Weyl com seus elementos dados por $(e_{ab})_{ij} = \delta_{a,i} \delta_{b,j}$. A matriz T fornece a contribuição de uma linha na função de partição do modelo de vértices, uma vez definido os valores de $(\alpha_1^j, \dots, \alpha_L^j)$ e $(\alpha_1^{j+1}, \dots, \alpha_L^{j+1})$ veja o destaque em vermelho da Figura 1.1. Desta forma, vemos que para obter a função de partição do modelo de vértices bidimensional (um modelo estatístico clássico) devemos diagonalizar uma matriz T que atua em um espaço unidimensional. A matriz T é a chamada matriz de transferência (linha a linha). Esta matriz é obtida tomando o traço no espaço auxiliar da matriz \mathcal{T}_A , chamada de matriz de monodromia.

1.1.1 Integrabilidade de Yang-Baxter

Para encontrar a função de partição devemos resolver um problema de diagonalização ainda bastante complicado. Vamos então nos restringir a uma classe de problemas. Como a matriz T depende dos pesos de Boltzmann com que cada vértice pode contribuir, espera-se em geral que seus auto-valores e auto-vetores também dependam destes pesos. Estes pesos podem ser reunidos numa curva parametrizada em $\vec{\lambda}$ que chamaremos simplesmente de λ , de modo que $T = T(\lambda)$. Imaginemos agora um conjunto de modelos que possuam

os mesmos auto-vetores, independentemente de seus respectivos parâmetros. Estes auto-vetores seriam universais. Se as matrizes de transferência possuem o mesmo conjunto de auto-vetores para diferentes parâmetros λ , então elas devem comutar [9]:

$$[T(\lambda), T(\mu)] = 0, \quad \forall \lambda, \mu. \quad (1.8)$$

Uma condição suficiente para que (1.8) seja satisfeita é a existência de uma matriz inversível $R_{AB}(\lambda, \mu)$ que satisfaz a seguinte propriedade

$$R_{AB}(\lambda, \mu) \mathcal{L}_{Ak}(\lambda) \mathcal{L}_{Bk}(\mu) = \mathcal{L}_{Bk}(\mu) \mathcal{L}_{Ak}(\lambda) R_{AB}(\lambda, \mu) \quad \forall k, \quad (1.9)$$

pela aplicação sucessiva desta equação podemos obter facilmente que

$$R_{AB}(\lambda, \mu) \mathcal{T}_A(\lambda) \mathcal{T}_B(\mu) R_{AB}^{-1}(\lambda, \mu) = \mathcal{T}_B(\mu) \mathcal{T}_A(\lambda), \quad (1.10)$$

tomando a transformação de similaridade pelo permutador P_{AB} temos

$$P_{AB} R_{AB}(\lambda, \mu) \mathcal{T}_A(\lambda) \mathcal{T}_B(\mu) R_{AB}^{-1}(\lambda, \mu) P_{AB} = \mathcal{T}_A(\mu) \mathcal{T}_B(\lambda), \quad (1.11)$$

de onde podemos tomar o traço no espaço AB para obter (1.8). A equação (1.10) nos mostra que existe uma transformação de similaridade pelo operador $R_{AB}(\lambda, \mu)$ que troca a ordem do produto $\mathcal{T}_A(\lambda) \mathcal{T}_B(\mu) \rightarrow \mathcal{T}_B(\mu) \mathcal{T}_A(\lambda)$. Logo se trocarmos novamente a ordem do produto utilizando a transformação de similaridade por $R_{BA}(\mu, \lambda)$ devemos ter o produto inicial. Para que isto seja consistente é suficiente que

$$R_{BA}(\mu, \lambda) R_{AB}(\lambda, \mu) = \text{Id}, \quad (1.12)$$

esta é a relação de unitariedade. Note que para o caso em que $\lambda = \mu$ as matrizes de transferência comutam automaticamente. Neste caso desejamos que $R_{AB}(\lambda, \lambda)$ seja regular, isto é

$$R_{AB}(\lambda, \lambda) = P_{AB}. \quad (1.13)$$

Para obter (1.10) de (1.9), assumimos que o produto de pesos de Boltzmann, e consequentemente, $\mathcal{T}_A(\lambda) \mathcal{T}_B(\mu) \mathcal{T}_C(\gamma)$ é associativo. Em outras palavras isto é equivalente a requerer que

$$R_{AB}(\lambda, \mu) R_{AC}(\lambda, \gamma) R_{BC}(\mu, \gamma) = R_{BC}(\mu, \gamma) R_{AC}(\lambda, \gamma) R_{AB}(\lambda, \mu), \quad (1.14)$$

que é a famosa relação de Yang-Baxter [6, 9].

Uma vez encontrada uma solução para a matriz R que satisfaça a unitariedade, regularidade e Yang-Baxter, resta ainda dizer que tipo de modelos de vértices são integráveis. Uma possível solução pode ser facilmente obtida para o caso em que todos os espaços

verticais k são isomorfos aos espaços auxiliares A e B . Comparando (1.9) e (1.14) vemos que uma possível solução é dada por

$$\mathcal{L}_{Ak}(\lambda) = R_{Ak}(\lambda, \nu_k) =: \mathcal{L}_{Ak}(\lambda, \nu_k). \quad (1.15)$$

Estes modelos são os chamados modelos fundamentais.

1.1.2 Modelo de Seis Vértices Simétrico

Entre os possíveis modelos fundamentais, estaremos interessados no modelo de seis vértices simétrico. Considere $q_{\alpha_i}^j = q_{\gamma_i}^j = 2$. A princípio temos um total de $2^4 = 16$ possíveis pesos de Boltzmann para cada vértice. Entretanto no modelo de seis vértices apenas seis são não nulos $\mathcal{L}_{\alpha}^{\alpha'}(\gamma, \gamma') \neq 0$ se $\alpha + \gamma = \alpha' + \gamma'$: $\mathcal{L}_+^+(+, +)$, $\mathcal{L}_-^-(-, -)$, $\mathcal{L}_+^+(+, -)$, $\mathcal{L}_+^-(-, +)$, $\mathcal{L}_+^+(-, -)$, $\mathcal{L}_-^-(+, +)$.

Ainda se a energia associada a cada configuração for invariante pela troca $+ \leftrightarrow -$ temos:

$$\mathcal{L}_+^+(+, +) = \mathcal{L}_-^-(-, -) = a, \quad (1.16)$$

$$\mathcal{L}_+^+(-, -) = \mathcal{L}_-^-(+, +) = b, \quad (1.17)$$

$$\mathcal{L}_+^+(+, -) = \mathcal{L}_+^-(-, +) = c, \quad (1.18)$$

sendo assim a matriz \mathcal{L}_{AB} associada ao seis vértices simétrico fica:

$$\mathcal{L}_{AB} = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{cc} a & 0 \\ 0 & b \end{array} \right]_B \\ \left[\begin{array}{cc} 0 & c \\ 0 & 0 \end{array} \right]_B \\ \left[\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & a \end{array} \right]_B \end{array} \right]_A \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ c & 0 \end{array} \right]_B \\ \left[\begin{array}{cc} b & 0 \\ 0 & a \end{array} \right]_B \end{array} \right]_B. \quad (1.19)$$

Como temos um modelo fundamental $\mathcal{L}(\lambda, \mu) = R(\lambda, \mu)$, a unitariedade e a equação de Yang-Baxter implicam em vínculos para estes pesos. A unitariedade implica nas seguintes relações

$$a(\lambda, \mu)a(\mu, \lambda) = 1, \quad (1.20)$$

$$b(\lambda, \mu)b(\mu, \lambda) + c(\lambda, \mu)c(\mu, \lambda) = 1, \quad (1.21)$$

$$b(\lambda, \mu)c(\mu, \lambda) + c(\lambda, \mu)b(\mu, \lambda) = 0. \quad (1.22)$$

A Yang-Baxter por sua vez fornece

$$ac'a'' - bc'b'' - ca'a'' = 0, \quad (1.23)$$

$$-cc'b'' + (ab' - ba')c'' = 0, \quad (1.24)$$

$$cb'a'' - ca'b'' - bc'c'' = 0, \quad (1.25)$$

onde as letras sem linha são parametrizadas por (λ, μ) , as letras com uma linha são parametrizadas por (λ, η) e as letras com duas linhas são parametrizadas por (μ, η) . Este conjunto de equações pode ser visto como um sistema homogêneo nas letras com duas linhas. Para que este sistema tenha solução não trivial, o determinante dos coeficientes deve ser igual a zero, o que implica em

$$\frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} = \frac{a'^2 + b'^2 - c'^2}{2a'b'}, \quad (1.26)$$

logo a quantidade

$$\Delta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab}, \quad (1.27)$$

é um invariante, pois independe da parametrização particular dos pesos de Boltzmann em relação aos parâmetros espectrais. Neste trabalho estamos particularmente interessados nas soluções do tipo

$$\mathcal{L}_{AB}(\lambda, \mu) = \mathcal{L}_{AB}(\lambda - \mu, 0) =: \mathcal{L}_{AB}(\lambda - \mu), \quad (1.28)$$

que depende da diferença dos parâmetros espectrais. Algumas soluções da diferença que satisfazem a Yang-Baxter e a unitariedade são:

$$a(\lambda) = 1 \quad b(\lambda) = \frac{\lambda}{1 + \lambda} \quad c(\lambda) = \frac{1}{1 + \lambda} \quad \Rightarrow \Delta = 1, \quad (1.29)$$

$$a(\lambda) = 1 \quad b(\lambda) = \frac{\sin(\lambda)}{\sin(\lambda + \gamma)} \quad c(\lambda) = \frac{\sin(\gamma)}{\sin(\lambda + \gamma)} \quad \Rightarrow \Delta = \cos(\gamma), \quad (1.30)$$

$$a(\lambda) = 1 \quad b(\lambda) = \frac{\sinh(\lambda)}{\sinh(\lambda + \gamma)} \quad c(\lambda) = \frac{\sinh(\gamma)}{\sinh(\lambda + \gamma)} \quad \Rightarrow \Delta = \cosh(\gamma). \quad (1.31)$$

1.1.3 Modelo de Heisenberg e Generalizações Integráveis

Na seção anterior vimos que a solução da equação de Yang-Baxter do modelo de seis vértices nos permite definir modelos integráveis com heterogeneidade ao longo das linhas. A matriz de transferência destes é dada por

$$T(\lambda) = \text{Tr}_A \mathcal{T}_A(\lambda) = \text{Tr}_A [\mathcal{L}_{AL}(\lambda, \nu_1) \mathcal{L}_{AL-1}(\lambda, \nu_2) \dots \mathcal{L}_{A1}(\lambda, \nu_L)], \quad (1.32)$$

de modo que a matriz de transferência possui dependência implícita com $\vec{\nu}$. Se $\nu_i \neq \nu_j$ temos um modelo de vértices heterogêneo ao longo das linhas. Expandindo (1.8) em série de Taylor nos parâmetros espectrais, encontramos

$$[T^{(n)}(\lambda_0), T^{(m)}(\mu_0)] = 0, \quad (1.33)$$

de onde vemos que existem quantidades conservadas associadas às derivadas de T para cada ponto em que a expansão é factível¹. Também são conservadas quantidades da forma

$$\mathcal{J}^{(n)} = \left(\frac{d^n \ln T(\lambda)}{d\lambda^n} \right)_{\lambda=\lambda_0}. \quad (1.34)$$

No caso mais simples teremos $\vec{\nu} = 0$, que resulta no modelo homogêneo. Para este caso particular, se calcularmos quantidades como (1.34) com $\lambda_0 = 0$, teremos operadores locais. Para $n = 1$ teremos interações entre primeiros vizinhos apenas

$$\mathcal{J}^{(1)} = \sum_{j=1}^L P_{j-1,j} \mathcal{L}'_{j-1,j}(0), \quad (1.35)$$

e usando a parametrização (1.29), temos

$$\mathcal{H} = \mathcal{J}^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^L (\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} - 1), \quad (1.36)$$

que é o Hamiltoniano de Heisenberg (XXX) a menos de uma translação trivial no zero de energia. Se continuarmos calculando $\mathcal{J}^{(n)}$ para n maior, encontraremos operadores com interações menos locais a medida que aumentamos o número n . Mais geralmente se escolhermos $a(\lambda)$, $b(\lambda)$ e $c(\lambda)$ tal que a equação do invariante (1.27) seja satisfeita, então o Hamiltoniano derivado fica

$$\mathcal{H}(\Delta) = \mathcal{J}^{(1)} = \frac{L}{2} \frac{\dot{a}(0) + \dot{c}(0)}{a(0)} + \frac{1}{2} \frac{\dot{b}(0)}{a(0)} \sum_{j=1}^L [\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z], \quad (1.37)$$

que é o modelo de Heisenberg com anisotropia uniaxial (XXZ). Este modelo muda de comportamento na medida que variamos o parâmetro de anisotropia Δ . Suponhamos $J = \frac{\dot{b}(0)}{a(0)} > 0$, para $\Delta = 0$ temos um comportamento antiferromagnético típico do modelo XX. Se $\Delta \gg 1$ o termo relevante se torna $\Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z$ de onde surge um comportamento antiferromagnético típico do modelo de Ising. Para $\Delta \ll -1$ teremos, analogamente, um comportamento ferromagnético típico do modelo de Ising. Por conta destas mudanças de comportamento espera-se que exista mudanças abruptas nas propriedades termodinâmicas não associadas aos efeitos térmicos, isto é, “podem” ocorrer em $T = 0$, devido a efeitos quânticos. Isto é o que chamamos de transição de fase quântica [38]. De fato estas transições ocorrem em $\Delta = \pm 1$ [39].

Consideremos agora efeitos de heterogeneidade como em (1.32). Esta matriz de transferência não pode produzir interações locais no caso mais geral com todos ν_j 's diferentes.

¹No Apêndice A mostramos como obter um conjunto comum de auto-estados destas quantidades conservadas, bem como do espectro da matriz de transferência, por meio do ansatz de Bethe algébrico.

Isto é consequência da perda da simetria de translação cíclica na cadeia. Portanto vamos destruir a simetria de translação apenas parcialmente. Iniciemos com $\nu_{2k} = i\omega_1$ e $\nu_{2k-1} = i\omega_2$ para todo inteiro k e consideremos uma cadeia com $2L$ sítios. Logo a matriz de transferência (1.32) possui simetria de translação por dois sítios na cadeia. A matriz de monodromia neste caso é um produtório de operadores \mathcal{L} 's com pontos regulares alternados; ora em $i\omega_1$ e ora em $i\omega_2$. Por conveniência, introduziremos duas matrizes de transferência trivialmente relacionadas:

$$T_1(\lambda) = T(\lambda + i\omega_1) = \text{Tr}_A \prod_{i=1}^{\widehat{L}} \mathcal{L}_{A2i}(\lambda + i\omega_1, i\omega_1) \mathcal{L}_{A2i-1}(\lambda + i\omega_1, i\omega_2), \quad (1.38)$$

$$T_2(\lambda) = T(\lambda + i\omega_2) = \text{Tr}_A \prod_{i=1}^{\widehat{L}} \mathcal{L}_{A2i}(\lambda + i\omega_2, i\omega_1) \mathcal{L}_{A2i-1}(\lambda + i\omega_2, i\omega_2), \quad (1.39)$$

Se calcularmos a derivada logarítmica de $T_1(\lambda)$ em $\lambda = 0$, encontraremos

$$\mathcal{J}_1^{(1)} = \sum_{i=1}^L \left\{ \mathcal{L}_{2i+1,2i}(i\omega_2, i\omega_1) P_{2i+2,2i} \left(\frac{d}{d\lambda} \mathcal{L}_{2i,2i+2}(\lambda + i\omega_1, i\omega_2) \right)_{\lambda=0} \mathcal{L}_{2i,2i+1}(i\omega_1, i\omega_2) + \mathcal{L}_{2i+1,2i}(i\omega_2, i\omega_1) \left(\frac{d}{d\lambda} \mathcal{L}_{2i,2i+1}(\lambda + i\omega_1, i\omega_2) \right)_{\lambda=0} \right\}, \quad (1.40)$$

onde temos interações de até segundos vizinhos para os sítios pares e primeiros vizinhos para os ímpares. Este estranho efeito em que sítios pares e ímpares não parecem estar em pé de igualdade também ocorre em $\mathcal{J}_2^{(1)}$ com os papéis trocados. $\mathcal{J}_2^{(1)}$ pode ser facilmente obtido de $\mathcal{J}_1^{(1)}$ se notarmos a seguinte relação entre as matrizes $T_1(\lambda)$ e $T_2(\lambda)$

$$T_2(\lambda; i\omega_1, i\omega_2) = e^{-i\mathcal{P}} T_1(\lambda; i\omega_2, i\omega_1) e^{i\mathcal{P}}, \quad (1.41)$$

onde se fez necessário explicitar a dependência com $\vec{\omega}$ e $e^{i\mathcal{P}}$ é a translação cíclica de um sítio para a direita. É conveniente definir o produto

$$t(\lambda) = T_1(\lambda)T_2(\lambda) = \text{Tr}_{AB} \left[\prod_{i=1}^{\widehat{L}} \mathcal{L}_{A2i}(\lambda + i\omega_1, i\omega_1) \mathcal{L}_{A2i-1}(\lambda + i\omega_1, i\omega_2) \times \prod_{i=1}^{\widehat{L}} \mathcal{L}_{B2i}(\lambda + i\omega_2, i\omega_1) \mathcal{L}_{B2i-1}(\lambda + i\omega_2, i\omega_2) \right], \quad (1.42)$$

da qual obtemos um Hamiltoniano de interações locais a partir de

$$\mathcal{H}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{2} \left(\frac{d \ln t(\lambda)}{d\lambda} \right)_{\lambda=0}. \quad (1.43)$$

Para $\Delta = 1$ temos

$$\mathcal{H}(\theta) = \frac{1}{4 + 4\theta^2} \sum_{j=1}^{2L} \left[-2 - \theta^2 + 2\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} + (-1)^j \theta \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1} \times \vec{\sigma}_{j+2} + \theta^2 \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+2} \right], \quad (1.44)$$

sendo $\theta = \omega_2 - \omega_1$. Note que a escolha de ω_i real (ν_i imaginário) implica em um operador Hermitiano que pode, de fato, ser visto como um Hamiltoniano. Além disso o fator meio na definição (1.43) implica que o Hamiltoniano (1.44) tende a (1.36) no limite $\omega_2 \rightarrow \omega_1$. Para $\theta = 0$ temos o regime antiferromagnético usual, que promove o alinhamento antiparalelo dos spins vizinhos. Entretanto para valores maiores de θ a interação entre segundos vizinhos começa a competir com a de primeiros vizinhos, provocando frustração no sistema. Além disso, existe a interação quiral (produto misto) que promove o alinhamento perpendicular dos três spins vizinhos, mas não é preponderante nos limites de pequenos e grandes valores de θ . Neste modelo também esperamos a ocorrência de transições de fases quânticas [26, 31, 32].

Para o caso $\Delta = \cos(\gamma)$, com γ real, reescalamos o parâmetro espectral $\lambda \rightarrow \lambda \sin(\gamma)$, de modo que (1.43) fornece o seguinte Hamiltoniano ($\Delta < 1$)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\gamma, \theta) = & \frac{1}{\cosh(2\theta \sin(\gamma)) - \cos(2\gamma)} \sum_{j=1}^{2L} \left\{ \frac{\cos(2\gamma) - \cosh^2(\theta \sin(\gamma))}{2} \cos(\gamma) + \right. \\ & + \cosh(\theta \sin(\gamma)) \sin^2(\gamma) \tau_j^\perp + \cos(\gamma) \sin^2(\gamma) \tau_j^z + \frac{\cos(\gamma) \sinh^2(\theta \sin(\gamma))}{2} \alpha_j + \\ & \left. + (-1)^j \sin(\gamma) \frac{\sinh(\theta \sin(\gamma))}{2} \left(\cos(\gamma) \eta_j^\perp + \cosh(\theta \sin(\gamma)) \eta_j^z \right) \right\}, \quad (1.45) \end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned} \tau_j^\perp &= \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y, \\ \tau_j^z &= \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z, \\ \alpha_j &= \sigma_j^x \sigma_{j+2}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+2}^y + \sigma_j^z \sigma_{j+2}^z, \\ \eta_j^\perp &= \sum_{k,n=1}^3 \sum_{m=1}^2 \varepsilon_{kmn} \sigma_j^k \sigma_{j+1}^m \sigma_{j+2}^n, \\ \eta_j^z &= \sum_{k,n=1}^3 \varepsilon_{k3n} \sigma_j^k \sigma_{j+1}^3 \sigma_{j+2}^n, \end{aligned} \quad (1.46)$$

já no caso $\Delta = \cosh(\gamma)$ reescalamos o parâmetro espectral $\lambda \rightarrow \lambda \sinh(\gamma)$, de modo que

obtemos o Hamiltoniano ($\Delta > 1$)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\gamma, \theta) = & \frac{1}{\cosh(2\gamma) - \cos(2\theta \sinh(\gamma))} \sum_{j=1}^{2L} \left\{ \frac{-\cosh(2\gamma) + \cos^2(\theta \sinh(\gamma))}{2} \cosh(\gamma) + \right. \\ & + \cos(\theta \sinh(\gamma)) \sinh^2(\gamma) \tau_j^\perp + \cosh(\gamma) \sinh^2(\gamma) \tau_j^z + \frac{\cosh(\gamma) \sin^2(\theta \sinh(\gamma))}{2} \alpha_j + \\ & \left. + (-1)^j \sinh(\gamma) \frac{\sin(\theta \sinh(\gamma))}{2} \left(\cosh(\gamma) \eta_j^\perp + \cos(\theta \sinh(\gamma)) \eta_j^z \right) \right\}. \end{aligned} \quad (1.47)$$

Para o caso geral em que temos M parâmetros $\nu_j = i\omega_j$, (1.32) pode ser escrita como

$$T(\lambda) = \text{Tr}_A \left[\prod_{i=1}^{\widehat{L}} \left[\prod_{k=1}^{\widehat{M}} \mathcal{L}_{A, (i-1)M+k}(\lambda, i\omega_{M+1-k}) \right] \right], \quad (1.48)$$

da qual podemos definir M matrizes trivialmente relacionadas $T_j(\lambda) = T(\lambda + i\omega_j)$. Estas satisfazem, novamente, a seguinte relação

$$T_q(\lambda; i\vec{\omega}) = e^{-i(q-r)\mathcal{P}} T_r(\lambda; i\vec{\omega}_{+(q-r)}) e^{i(q-r)\mathcal{P}}, \quad (1.49)$$

onde temos a notação

$$\vec{\omega}_{+q} = (\omega_{1+q}, \omega_{2+q}, \dots, \omega_{M+q}), \quad \vec{\omega} \equiv \vec{\omega}_{+0}, \quad \omega_{k+M} \equiv \omega_k.$$

Obtemos um Hamiltoniano a partir da matriz de transferência

$$t(\lambda) = \prod_{j=1}^M T_j(\lambda, i\vec{\omega}), \quad (1.50)$$

por

$$\mathcal{H}(\vec{\omega}) = \frac{1}{M} \left(\frac{d \ln t(\lambda)}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} = \frac{1}{M} \sum_{q=1}^M \mathcal{J}_q^{(1)} = \frac{1}{M} \sum_{q=0}^{M-1} e^{-iq\mathcal{P}} \mathcal{J}_1^{(1)}(\vec{\omega}_{+q}) e^{iq\mathcal{P}}, \quad (1.51)$$

sendo

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1^{(1)}(\vec{\omega}) = & \sum_{i=1}^L \sum_{k=1}^M \left[\prod_{n=1}^{M-k} \mathcal{L}_{Mi+n, Mi}(i\omega_{M+1-n}, i\omega_1) \right] \mathcal{L}_{M(i+1)-k+1, Mi}(i\omega_k, i\omega_1) \times \\ & \times \frac{d}{d\lambda} \mathcal{L}_{Mi, M(i+1)-k+1}(\lambda + i\omega_1, i\omega_k) \Big|_{\lambda=0} \left[\prod_{n=1}^{\widehat{M}-k} \mathcal{L}_{Mi, Mi+n}(i\omega_1, i\omega_{M+1-n}) \right]. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Explicitamente para o caso $M = 3$ e $\Delta = 1$, temos o Hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\theta_1, \theta_2) = & \sum_{i=1}^{3L} \xi_{0,i}(\theta_1, \theta_2) + \xi_{1,i}(\theta_1, \theta_2) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} + \xi_{2,i}(\theta_1, \theta_2) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+2} + \\ & \xi_{3,i}(\theta_1, \theta_2) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} \times \vec{\sigma}_{i+2} + \xi_{4,i}(\theta_1, \theta_2) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+3} + \xi_{5,i}(\theta_1, \theta_2) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} \times \vec{\sigma}_{i+3} + \\ & \xi_{6,i}(\theta_1, \theta_2) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+2} \times \vec{\sigma}_{i+3} + \xi_{7,i}(\theta_1, \theta_2) \vec{\sigma}_i \cdot (\vec{\sigma}_{i+1} \times (\vec{\sigma}_{i+2} \times \vec{\sigma}_{i+3})), \end{aligned} \quad (1.53)$$

sendo $\theta_1 = \omega_2 - \omega_1$ e $\theta_2 = \omega_3 - \omega_1$.

As funções $\xi_{k,i}$ possuem periodicidade $\xi_{k,i+3} = \xi_{k,i}$ e suas expressões são dadas no Apêndice B.

1.2 Hierarquia de Fusão

Nesta seção mostraremos como podemos obter modelos de vértices integráveis cuja matriz \mathcal{L} atua em um espaço de dimensão $(2s+1) \times (2s+1)$ a partir do modelo de seis vértices simétrico com $\Delta = 1$ [40, 41]. De modo análogo à seção 1.1.3, poderemos obter Hamiltonianos de spin- s integráveis. Iniciemos usando a parametrização (1.29). A matriz $\mathcal{L}(\lambda)$ do modelo de seis vértices é dada por

$$\mathcal{L}(\lambda) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\lambda}{1+\lambda} & \frac{1}{1+\lambda} & 0 \\ 0 & \frac{1}{1+\lambda} & \frac{\lambda}{1+\lambda} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (1.54)$$

que possui pontos singulares em $\lambda = \pm 1$. Em $\lambda = 1$ temos

$$\mathcal{L}(1) = \check{P}^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (1.55)$$

que é exatamente o projetor no subespaço de spin-1 na decomposição $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 0 \oplus 1$. Compare com a expressão geral do projetor no espaço de spin j na decomposição $s_1 \otimes s_2 = |s_1 - s_2| \oplus \dots \oplus s_1 + s_2$

$$\check{P}^j = \prod_{\substack{m \neq j \\ m=|s_1-s_2|}}^{s_1+s_2} \frac{2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + s_1(s_1+1) + s_2(s_2+1) - m(m+1)}{j(j+1) - m(m+1)}, \quad (1.56)$$

podemos ver também que

$$\lim_{\lambda \rightarrow -1} -\frac{(1+\lambda)}{2} \mathcal{L}(\lambda) = \check{P}^0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.57)$$

é projetor no subespaço de spin-0. Munidos destas informações, olhemos agora para a equação de Yang-Baxter

$$\mathcal{L}_{ab}(1) \mathcal{L}_{ac}(\lambda + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{bc}(\lambda - \frac{1}{2}) = \mathcal{L}_{bc}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ac}(\lambda + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ab}(1), \quad (1.58)$$

como $\check{P}^0\check{P}^1 = 0$, podemos atuar o projetor no subespaço de spin 0 pela esquerda obtendo

$$\check{P}_{ab}^0 \mathcal{L}_{bc}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ac}(\lambda + \frac{1}{2}) \check{P}_{ab}^1 = 0, \quad (1.59)$$

onde está explícito que os projetores na equação acima atuam nos sub-espacos a e b . A equação (1.59) nos informa que o produto $\mathcal{L}_{bc}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ac}(\lambda + \frac{1}{2})$ ao atuar em um estado de $\underbrace{1}_{ab} \otimes \underbrace{\frac{1}{2}}_c$ gera um estado de $\underbrace{1}_{ab} \otimes \underbrace{\frac{1}{2}}_c$, de modo que $\mathcal{L}_{bc}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ac}(\lambda + \frac{1}{2})$ possui uma representação no espaço $1 \otimes \frac{1}{2}$. Basta escolher uma base particular para obter a representação correspondente. Com efeito, temos

$$\mathcal{L}_{\alpha c}^{(\frac{1}{2})}(\lambda) := {}_1 B_{ab}^{(\frac{1}{2})t} \mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) {}_1 B_{ab}^{(\frac{1}{2})}, \quad (1.60)$$

sendo

$${}_1 B_{ab}^{(\frac{1}{2})} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (1.61)$$

a matriz dada pelos coeficientes de Clebsch-Gordan $s = 1$. Esta matriz satisfaz as seguintes relações

$$\begin{aligned} {}^i B_{ab}^{(\frac{1}{2})t} {}^i B_{ab}^{(\frac{1}{2})} &= \text{Id}_\alpha^i, & i = 0, 1 \\ {}^i B_{ab}^{(\frac{1}{2})} {}^i B_{ab}^{(\frac{1}{2})t} &= \check{P}_{ab}^i, & i = 0, 1 \\ {}^i B_{ab}^{(\frac{1}{2})t} {}^j B_{ab}^{(\frac{1}{2})} &= O, & i, j = 0, 1, \quad i \neq j, \end{aligned} \quad (1.62)$$

com

$${}_0 B_{ab}^{(\frac{1}{2})} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (1.63)$$

a matriz dos coeficientes de Clebsch-Gordan $s = 0$. A equação (1.60) é a fusão dos primeiros espacos $\underbrace{\frac{1}{2}}_a \otimes \underbrace{\frac{1}{2}}_b \rightarrow \underbrace{1}_\alpha$. Analogamente temos

$$\mathcal{L}_{a\alpha}^{(\frac{1}{2})}(\lambda) = {}_1 B_{bc}^{(\frac{1}{2})t} \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) {}_1 B_{bc}^{(\frac{1}{2})}, \quad (1.64)$$

que pode ser deduzido observando a equação de Yang-Baxter na forma

$$\mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2})}(1) = \mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2})}(1) \mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}). \quad (1.65)$$

Uma vez obtida estas novas matrizes, gostaríamos de saber se elas satisfazem alguma forma da equação de Yang-Baxter. De fato, no Apêndice C deduzimos a Yang-Baxter na forma

$$\mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu)\mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2}1)}(\lambda)\mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2}1)}(\mu) = \mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2}1)}(\mu)\mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2}1)}(\lambda)\mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu). \quad (1.66)$$

Usando exatamente as mesmas propriedades utilizadas nesta dedução, podemos mostrar também que

$$\mathcal{L}_{ab}^{(1\frac{1}{2})}(\lambda - \mu)\mathcal{L}_{ac}^{(1\frac{1}{2})}(\lambda)\mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu) = \mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu)\mathcal{L}_{ac}^{(1\frac{1}{2})}(\lambda)\mathcal{L}_{ab}^{(1\frac{1}{2})}(\lambda - \mu) \quad (1.67)$$

$$\mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}1)}(\lambda - \mu)\mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda)\mathcal{L}_{bc}^{(1\frac{1}{2})}(\mu) = \mathcal{L}_{bc}^{(1\frac{1}{2})}(\mu)\mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda)\mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}1)}(\lambda - \mu), \quad (1.68)$$

ainda, de (1.66) e (1.67), podemos definir

$$\mathcal{L}_{\alpha\beta}^{(11)}(\lambda) := \frac{1}{\beta}B_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})^t}\mathcal{L}_{\alpha\alpha}^{(1\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2})\mathcal{L}_{\alpha\beta}^{(1\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2})\frac{1}{\beta}B_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}, \quad (1.69)$$

$$= \frac{1}{\alpha}B_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})^t}\mathcal{L}_{b\beta}^{(\frac{1}{2}1)}(\lambda - \frac{1}{2})\mathcal{L}_{\alpha\beta}^{(\frac{1}{2}1)}(\lambda + \frac{1}{2})\frac{1}{\alpha}B_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}, \quad (1.70)$$

de modo que vale a equação de Yang-Baxter

$$\mathcal{L}_{ab}^{(j_1j_2)}(\lambda - \mu)\mathcal{L}_{ac}^{(j_1j_3)}(\lambda)\mathcal{L}_{bc}^{(j_2j_3)}(\mu) = \mathcal{L}_{bc}^{(j_2j_3)}(\mu)\mathcal{L}_{ac}^{(j_1j_3)}(\lambda)\mathcal{L}_{ab}^{(j_1j_2)}(\lambda - \mu), \quad (1.71)$$

onde, rigorosamente, devemos dizer que até este ponto $\frac{1}{2} \leq j_1, j_2, j_3 \leq 1$.

De modo geral temos a seguinte relação de fusão

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{ac}^{(j+\frac{1}{2}j')}(\lambda) &= \frac{j+\frac{1}{2}}{\alpha}B_{ab}^{(\frac{1}{2}j)^t}\mathcal{L}_{bc}^{(jj')}(\lambda - \frac{1}{2})\mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2}j')}(\lambda + j)\frac{j+\frac{1}{2}}{\alpha}B_{ab}^{(\frac{1}{2}j)}, \\ \mathcal{L}_{\alpha\alpha}^{(j'j+\frac{1}{2})}(\lambda) &= \frac{j+\frac{1}{2}}{\alpha}B_{bc}^{(j\frac{1}{2})^t}\mathcal{L}_{ab}^{(j'j)}(\lambda - \frac{1}{2})\mathcal{L}_{\alpha\alpha}^{(j'\frac{1}{2})}(\lambda + j)\frac{j+\frac{1}{2}}{\alpha}B_{bc}^{(j\frac{1}{2})}, \end{aligned} \quad (1.72)$$

que produz operadores \mathcal{L} 's quais satisfazem a equação de Yang-Baxter (1.71) com j_1, j_2, j_3 pertencente a $\mathbb{Z}^+/2$. As relações (1.72) podem ser estendidas para $j = 0$ notando que $\frac{1}{2}B_{bc}^{(0\frac{1}{2})} = \text{Id}$ e que

$$\mathcal{L}_{\alpha\alpha}^{(j'\frac{1}{2})}(\lambda) = \frac{1}{\alpha}B_{bc}^{(0\frac{1}{2})^t}\mathcal{L}_{ab}^{(j'0)}(\lambda - \frac{1}{2})\mathcal{L}_{\alpha\alpha}^{(j'\frac{1}{2})}(\lambda)\frac{1}{\alpha}B_{bc}^{(0\frac{1}{2})}, \quad (1.73)$$

será automaticamente satisfeita se escolhermos $\mathcal{L}_{ab}^{(j'0)}(\lambda) = \text{Id}$. De modo geral, temos

$$\mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}j)}(\lambda) = \frac{1}{\lambda + (j + \frac{1}{2})} \left((\lambda + (j + \frac{1}{2}))\check{P}_{ab}^{j+\frac{1}{2}} + (\lambda - (j + \frac{1}{2}))\check{P}_{ab}^{j-\frac{1}{2}} \right), \quad (1.74)$$

$$\mathcal{L}_{ab}^{(ss)}(\lambda) = \sum_{l=0}^{2s} \prod_{j=l+1}^{2s} \left(\frac{\lambda - j}{\lambda + j} \right) \check{P}_{ab}^l. \quad (1.75)$$

A partir das matrizes $\mathcal{L}_{ab}^{(ss)}(\lambda)$ podemos obter os Hamiltonianos de spin- s trocando apenas $\mathcal{L}_{ab}(\lambda) \rightarrow \mathcal{L}_{ab}^{(ss)}(\lambda)$ em (1.52) e (1.51). A título de exemplo, temos no caso da matriz de transferência homogênea $M = 1$:

$$\mathcal{H}^{(s)} = \sum_{i=1}^L \left[-2 \sum_{j=0}^{2s} [\psi(2s+1) - \psi(j+1)] \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^{2s} \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - x_k}{x_j - x_k} \right], \quad (1.76)$$

sendo $x_k = \frac{1}{2} [k(k+1) - 2s(s+1)]$ e $\psi(x)$ a função digamma. Por exemplo, se $s = \frac{1}{2}$ temos o Hamiltoniano (1.36) e se $s = 1$ teremos

$$\mathcal{H}^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \right)^2 \right], \quad (1.77)$$

no caso da matriz de transferência heterogênea $M = 2$ e spin 1 teremos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{(1)}(\theta) = & \frac{1}{2(1+\theta^2)(4+\theta^2)} \sum_{i=1}^{2L} \left\{ -18\theta^2 + 2(2+4\theta^2)\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{5\theta^2 + \theta^4}{2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2} \right. \\ & + 2(-2+4\theta^2) \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \right)^2 + \frac{\theta^2}{2} (11-\theta^2) \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2} \right)^2 + \theta^2 \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}, \vec{S}_{i+1} \cdot \vec{S}_{i+2} \right]_+ \\ & - \frac{\theta^2}{2} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \vec{S}_{i+1} \cdot \vec{S}_{i+2} \right]_+ - \theta^2 \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}, \vec{S}_{i+1} \cdot \vec{S}_{i+2} \right]_+ \right. \\ & \left. + \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}, \vec{S}_{i+1} \cdot \vec{S}_{i+2} \right]_+ + \vec{S}_{i+1} \cdot \vec{S}_{i+2} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2} \right]_+ \right) \\ & \left. + (-1)^i \theta (1+\theta^2) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \times \vec{S}_{i+2} - (-1)^i \frac{3\theta}{2} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \vec{S}_{i+1} \cdot \vec{S}_{i+2}, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \times \vec{S}_{i+2} \right]_+ \right. \\ & \left. + (-1)^i \frac{\theta(1-2\theta^2)}{2} \left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \times \vec{S}_{i+2} \right]_+ \right\}, \quad (1.78) \end{aligned}$$

que obviamente se reduz ao caso anterior no limite $\theta \rightarrow 0$.

Capítulo 2

Matriz de Transferência Quântica Spin- $\frac{1}{2}$

Neste capítulo estabelecemos o método da matriz de transferência quântica utilizado na obtenção das propriedades termodinâmicas das cadeias de spin- $\frac{1}{2}$ integráveis. O cálculo da função de partição do modelo quântico é mapeado no cálculo da função de partição de um modelo de vértices específico pela chamada decomposição de Trotter-Suzuki, seção 2.1. Dividimos em dois casos: Na seção 2.1.1 abordamos o caso homogêneo, tendo um enfoque mais pedagógico. Na seção 2.1.2 abordamos o caso mais geral com M parâmetros de heterogeneidade. Com isto, mostramos na seção 2.1 que a função de partição do modelo quântico pode ser obtida conhecendo apenas o maior auto-valor da matriz de transferência quântica no limite do número de Trotter indo a infinito. Na seção 2.2 efetuamos este cálculo. Para isto obtemos um conjunto finito de equações integrais não lineares. Estas equações integrais não lineares só puderam ser obtidas mediante o estudo minucioso das propriedades de analiticidade das funções auxiliares relevantes.

2.1 Decomposição de Trotter-Suzuki

No capítulo anterior vimos que a matriz de transferência (linha-a-linha) pode ser vista como uma geradora de quantidades conservadas, entre as quais resulta da primeira derivada logarítmica um operador de interações locais que, por sua vez, pode ser visto como um Hamiltoniano. Exemplos deste caso, são as equações (1.37, 1.44, 1.45, 1.53, 1.76, 1.78). Por meio do ansatz de Bethe podemos encontrar os auto-estados e os auto-valores do Hamiltoniano, bem como da matriz de transferência associada; ver Apêndice A.

Desejamos agora obter propriedades termodinâmicas destes modelos. Para isto vamos discutir a Decomposição de Trotter-Suzuki, procedimento fundamental no método da

matriz de transferência quântica.

2.1.1 Matriz de Transferência Quântica: Caso Homogêneo

Passemos à formulação da matriz de transferência quântica para o caso de spin meio isotrópico. Iniciemos com o modelo de Heisenberg que provém da matriz de transferência linha-a-linha homogênea ($M = 1$)

$$\mathcal{H} = \left(\frac{d \ln T(\lambda)}{d\lambda} \right)_{\lambda=0}, \quad (2.1)$$

com

$$T(\lambda) = \text{Tr}_A [\mathcal{L}_{AL}(\lambda + i\omega_1, i\omega_1) \dots \mathcal{L}_{A1}(\lambda + i\omega_1, i\omega_1)], \quad (2.2)$$

$$= \text{Tr}_A [\mathcal{L}_{AL}(\lambda) \dots \mathcal{L}_{A1}(\lambda)]. \quad (2.3)$$

Como pode ser facilmente verificado, $T(0) = e^{i\mathcal{P}}$ é o operador de translação cíclica de um sítio para a direita. Desta forma, podemos escrever

$$T(\lambda) = e^{i\mathcal{P} + \lambda\mathcal{H} + \mathcal{O}(\lambda^2)}, \quad (2.4)$$

por outro lado sabemos que a extração de propriedades termodinâmicas no ensemble canônico pode ser feita a partir da função de partição. Esta, por sua vez, é obtida tomando o traço do operador de densidade, $\rho = e^{-\beta\mathcal{H}}$. Gostaríamos de obter o operador densidade a partir de manipulações sobre a equação (2.4). Para isto devemos eliminar as contribuições $\exp \mathcal{O}(\lambda^0)$ e $\exp \mathcal{O}(\lambda^2)$ em (2.4). Definimos, convenientemente a matriz $\bar{T}(\lambda)$ por

$$\bar{T}(\lambda) = \text{Tr}_A [\mathcal{L}_{1A}(i\omega_1, i\omega_1 - \lambda) \dots \mathcal{L}_{LA}(i\omega_1, i\omega_1 - \lambda)], \quad (2.5)$$

$$= \text{Tr}_A [\mathcal{L}_{LA}^{tA}(i\omega_1, i\omega_1 - \lambda) \dots \mathcal{L}_{1A}^{tA}(i\omega_1, i\omega_1 - \lambda)], \quad (2.6)$$

sendo t_A a transposição no espaço A , de onde podemos ver que $\bar{T}(0) = e^{-i\mathcal{P}}$, ainda

$$\bar{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^L P_{j,j-1} (\partial_\lambda \mathcal{L}_{jj-1}(i\omega_1, -\lambda + i\omega_1))_{\lambda=0} = \mathcal{H}, \quad (2.7)$$

que segue da relação de unitariedade

$$\mathcal{L}_{kj}(\lambda + i\omega_1, i\omega_1) \mathcal{L}_{jk}(i\omega_1, \lambda + i\omega_1) = \text{Id}, \quad (2.8)$$

derivando esta última equação em relação a λ , podemos mostrar que os dois Hamiltonianos são equivalentes. Desta forma temos

$$T(\lambda)\bar{T}(\lambda) = e^{2\lambda\mathcal{H} + \mathcal{O}(\lambda^2)}, \quad (2.9)$$

para eliminar o termo $\exp \mathcal{O}(\lambda^2)$ fazemos $\lambda = -\frac{\beta}{N} =: -\tau$ e tomamos o limite em que o número de Trotter N vai a infinito; ao mesmo tempo elevamos o produto anterior a $N/2$ para não perder a contribuição $\exp \mathcal{O}(\lambda)$. Obtemos desta forma

$$\left[T(-\tau) \bar{T}(-\tau) \right]^{\frac{N}{2}} = e^{-\beta \mathcal{H} + \mathcal{O}(1/N)} \rightarrow e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad \text{quando } N \rightarrow \infty, \quad (2.10)$$

que é a decomposição de Trotter-Suzuki. Desta forma temos,

$$Z_L = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} \left[\left(T(-\tau) \bar{T}(-\tau) \right)^{\frac{N}{2}} \right] =: \lim_{N \rightarrow \infty} Z_{NL}, \quad (2.11)$$

Note que estamos manipulando o produto de exponenciais de operadores como exponencial da soma de operadores livremente, uma vez que $[T^{(n)}(\lambda), T^{(m)}(\mu)] = 0$; o mesmo vale para a matriz $\bar{T}(\lambda)$ e em particular \mathcal{H} pertence às duas famílias de operadores comutantes.

A quantidade Z_{NL} em (2.11) pode ser vista como a função de partição de um modelo de vértices com linhas alternadas, veja a Figura 2.1. Podemos calcular a função de partição escolhendo a direção vertical para definir a matriz de transferência. Tal matriz de transferência é chamada de Matriz de Transferência Quântica e o novo espaço auxiliar, que está associado a um sítio da cadeia quântica, é chamado de espaço quântico. Assim definimos a matriz de transferência quântica como

$$t^{QTM}(x) = \text{Tr}_Q \left[\prod_{i=1}^{N/2} \mathcal{L}_{A^{2i-1}Q}(-\tau + i\omega_1, -ix) \mathcal{L}_{QA^{2i}}^{t_A}(-ix, \tau + i\omega_1) \right] = \text{Tr}_Q \left[\mathcal{T}_Q^{QTM}(x) \right]. \quad (2.12)$$

Daqui em diante iremos denotar $\mathcal{L}_{A^k Q}$ por \mathcal{L}_{kQ} . Uma vez obtida a quantidade $Z_{NL} = \text{Tr}(t^{QTM}(-\omega_1))^L = \sum_{j=1}^{\#} \Lambda_j^L(-\omega_1)$, podemos obter a energia-livre por sítio da cadeia quântica, pois

$$Z_L = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_{NL}, \quad \text{temos} \quad f = \lim_{L \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta L} \ln(Z_L). \quad (2.13)$$

Seja o maior auto-valor de $t^{QTM}(x)$, $\Lambda_{max}^{QTM}(x)$, não degenerado, então

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta} \ln[\Lambda_{max}(-\omega_1)], \quad (2.14)$$

onde estamos assumindo que é possível tomar o limite termodinâmico antes do limite do número de Trotter, veja [19]. A princípio poderíamos encontrar os maiores auto-valores associados às matrizes T e \bar{T} para obter a função de partição em (2.11). Entretanto para números de Trotter cada vez maiores, os auto-valores destas matrizes se tornam cada vez mais degenerados, impossibilitando escrever uma expressão que dependa apenas do maior auto-valor como em (2.14). Por diagonalização direta é possível mostrar que o

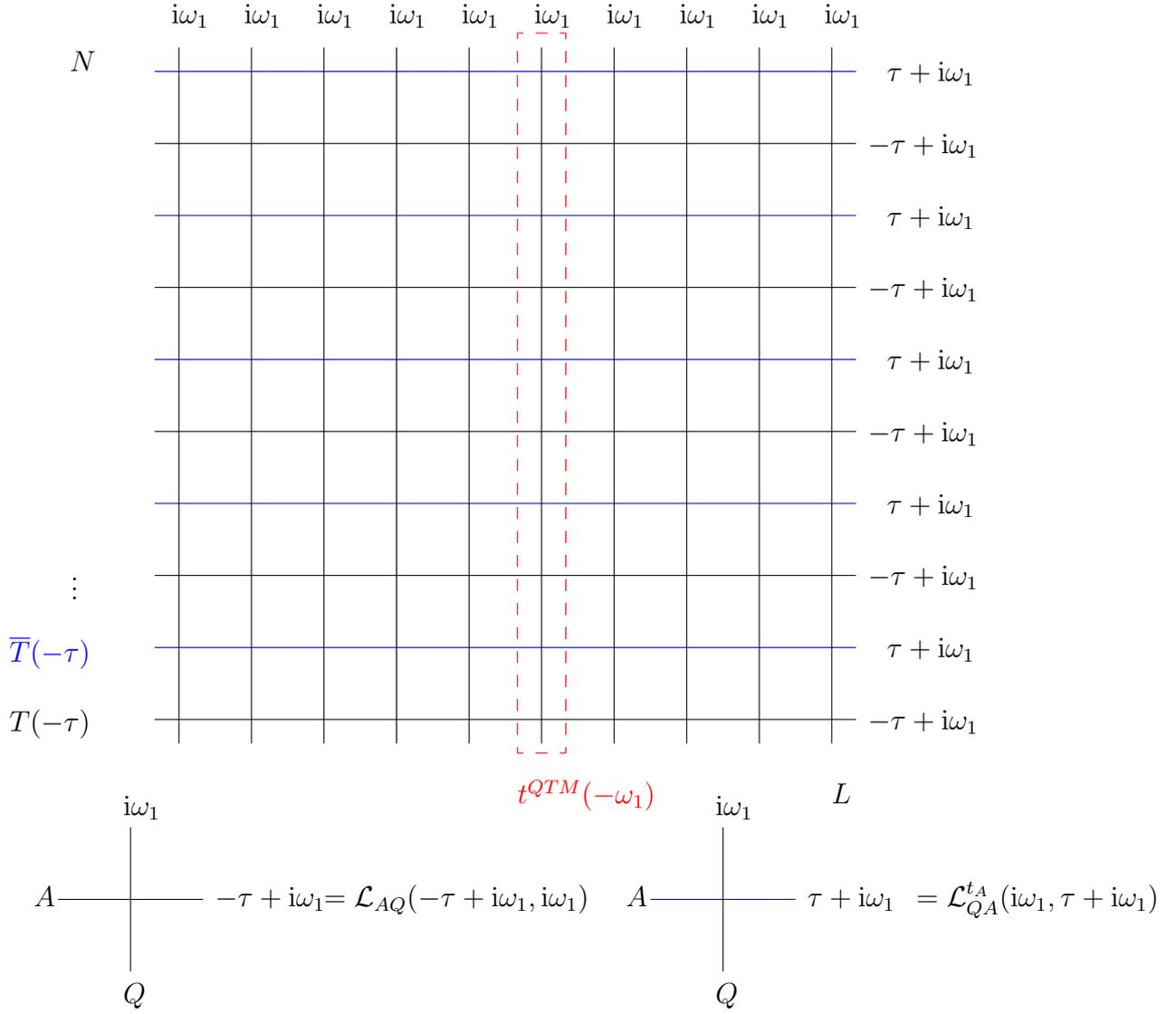


Figura 2.1: Modelo de vértices, linhas alternadas; e Matriz de Transferência Quântica.

maior auto-valor da QTM não é degenerado para valores finitos do número de Trotter. Assumimos que esta afirmação continue válida para $N \rightarrow \infty$.

A definição da QTM em (2.12) não é arbitrária, pois desejamos uma matriz de transferência integrável. De fato, da Yang-Baxter temos

$$R_{Q\bar{Q}}(ix, iy)\mathcal{T}_Q^{QTM}(x)\mathcal{T}_{\bar{Q}}^{QTM}(y) = \mathcal{T}_{\bar{Q}}^{QTM}(y)\mathcal{T}_Q^{QTM}(x)R_{Q\bar{Q}}(ix, iy), \quad (2.15)$$

logo

$$[t^{QTM}(x), t^{QTM}(y)] = 0. \quad (2.16)$$

Podemos incluir interação com campo magnético externo (no eixo z) com ligeira modificação da matriz de transferência quântica. Tal interação contribui na matriz densidade com $e^{\beta h S^z} = e^{\beta h \sum_{j=1}^L S_j^z}$. Multiplicando a equação (2.10) por esta contribuição e tomando

o traço, temos

$$Z_{NL} = \text{Tr} \left[e^{\beta \hbar \sum_{j=1}^L S_j^z} [T(-\tau) \bar{T}(-\tau)]^{\frac{N}{2}} \right] = \text{Tr} \left[e^{-\beta \mathcal{H}'} e^{\mathcal{O}(\frac{1}{N})} \right], \quad (2.17)$$

onde \mathcal{H}' inclui a interação com campo externo e o último traço é tomado sobre estados do espaço quântico $\prod_{i=1}^L V_i$ com $V_i \sim \mathcal{C}^2$. Lembrando que as matrizes de transferência linha-a-linha podem ser escritas como traço no espaço auxiliar das respectivas matrizes de monodromia, temos

$$Z_{NL} = \text{Tr} \text{Tr}_{A_1} \dots \text{Tr}_{A_N} \left[e^{\beta \hbar \sum_{j=1}^L S_j^z} \mathcal{T}_{A_1}(-\tau) \bar{\mathcal{T}}_{A_2}(-\tau) \dots \mathcal{T}_{A_{N-1}}(-\tau) \bar{\mathcal{T}}_{A_N}(-\tau) \right], \quad (2.18)$$

a operação $\text{Tr} \text{Tr}_{A_1} \dots \text{Tr}_{A_N}$ nada mais é que o traço total, que pode ser trocado por $\text{Tr} \text{Tr}_1 \dots \text{Tr}_N$ onde Tr_j denota o traço sobre o espaço quântico associado ao sítio j da cadeia e Tr é o traço sobre estados dos espaços auxiliares $\prod_{i=1}^N A_i$ com $A_i \sim \mathcal{C}^2$. Ainda rearranjando as matrizes \mathcal{L} 's do produto de matrizes de monodromia, podemos mostrar que

$$Z_{NL} = \text{Tr} \text{Tr}_1 \dots \text{Tr}_L \left[e^{-\beta \hbar S_L^z} \mathcal{T}_L^{QTM}(-\omega_1) e^{-\beta \hbar S_{L-1}^z} \mathcal{T}_{L-1}^{QTM}(-\omega_1) \dots e^{-\beta \hbar S_1^z} \mathcal{T}_1^{QTM}(-\omega_1) \right] \quad (2.19)$$

$$= \text{Tr} \left(\tilde{t}^{QTM}(-\omega_1) \right)^L, \quad (2.20)$$

sendo a nova matriz de transferência quântica $\tilde{t}^{QTM}(x)$ dada por

$$\tilde{t}^{QTM}(x) = \text{Tr}_Q \left[e^{\beta \hbar S_Q} \prod_{i=1}^{N/2} \mathcal{L}_{A^{2i-1}Q}(-\tau + i\omega_1, -ix) \mathcal{L}_{Q A^{2i}}^t(-ix, \tau + i\omega_1) \right] = \text{Tr}_Q \tilde{\mathcal{T}}_Q^{QTM}(x), \quad (2.21)$$

daqui em diante iremos fazer um abuso de linguagem e nos referir às matrizes $\tilde{t}^{QTM}(x)$ e $\tilde{\mathcal{T}}_Q^{QTM}(x)$ simplesmente como $t^{QTM}(x)$ e $\mathcal{T}_Q^{QTM}(x)$ respectivamente. Com esta nova definição, a equação (2.15) permanece válida, o que é uma consequência de

$$[R_{Q\bar{Q}}(\lambda, \mu), S_Q + S_{\bar{Q}}] = 0, \quad (2.22)$$

de modo que a integrabilidade não é destruída.

2.1.2 Matriz de Transferência Quântica: Caso Heterogêneo

O caso mais geral onde temos M parâmetros de heterogeneidade na matriz de transferência (1.48) segue de forma análoga. Podemos escrever a seguinte expansão

$$\prod_{j=1}^M T(\lambda - i\omega_j) = \prod_{j=1}^M T_j(\lambda) = \left[\prod_{j=1}^M T_j(0) \right] e^{\lambda M \mathcal{H}(\vec{\omega}) + \mathcal{O}(\lambda^2)} = e^{iM\mathcal{P} + \lambda M \mathcal{H}(\vec{\omega}) + \mathcal{O}(\lambda^2)}, \quad (2.23)$$

sendo $e^{iM\mathcal{P}}$ o operador de translação cíclica de M sítios. Para eliminar o termo $\exp \mathcal{O}(\lambda^0)$, definimos a matriz transferência $\bar{T}(\lambda)$ dada por

$$\bar{T}(\lambda) = \text{Tr}_A \left[\prod_{i=1}^{\hat{L}} \left[\prod_{k=1}^{\hat{M}} \mathcal{L}_{M(i-1)+k,A}^{t_A}(\mathrm{i}\omega_{M+1-k}, -\lambda) \right] \right], \quad (2.24)$$

e seja $\bar{T}_j(\lambda) = \bar{T}(\lambda - \mathrm{i}\omega_j)$, devido à relação de unitariedade podemos mostrar que

$$\bar{T}_j(0) = T_j^{-1}(0) \Rightarrow \prod_{j=1}^M \bar{T}_j(0) = e^{-\mathrm{i}M\mathcal{P}}, \quad (2.25)$$

$$\bar{\mathcal{H}}(\vec{\omega}) = \mathcal{H}(\vec{\omega}), \quad (2.26)$$

sendo

$$\bar{\mathcal{H}}(\vec{\omega}) = \frac{1}{M} \frac{\mathrm{d} \ln}{\mathrm{d} \lambda} \left[\prod_{j=1}^M \bar{T}_j(\lambda) \right]_{\lambda=0},$$

logo

$$\left[\prod_{j=1}^M T_j(\lambda) \right] \left[\prod_{j=1}^M \bar{T}_j(\lambda) \right] = e^{2M\lambda\mathcal{H}(\vec{\omega}) + \mathcal{O}(\lambda^2)}. \quad (2.27)$$

Podemos eliminar os termos $\exp(\mathcal{O}(\lambda^2))$ fazendo $\lambda = -\frac{\beta}{MN} = -\tau$ e elevando a $\frac{N}{2}$:

$$\left[\left[\prod_{j=1}^M T_j(-\tau) \right] \left[\prod_{j=1}^M \bar{T}_j(-\tau) \right] \right]^{\frac{N}{2}} = e^{-\beta\mathcal{H}(\vec{\omega}) + \mathcal{O}(\frac{1}{N})} \rightarrow e^{-\beta\mathcal{H}(\vec{\omega})}, \quad \text{quando } N \rightarrow \infty. \quad (2.28)$$

A quantidade

$$Z_{NL} = \text{Tr} \left[\left[\prod_{j=1}^M T_j(-\tau) \prod_{j=1}^M \bar{T}_j(-\tau) \right]^{\frac{N}{2}} \right], \quad (2.29)$$

pode ser vista como a função de partição de um modelo de vértices de ML linhas e MN colunas. Veja a Figura 2.2 com $M = 3$. Desta forma definimos a matriz de transferência quântica por

$$t^{QTM}(x) = \text{Tr}_Q \left[e^{\beta\mathfrak{h}S_Q^z} \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{M(2i-2)+j,Q}(-\tau + \mathrm{i}\omega_j, -\mathrm{i}x) \right] \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{Q,M(2i-1)+j}^{t_A}(-\mathrm{i}x, \tau + \mathrm{i}\omega_j) \right] \right], \quad (2.30)$$

onde já incluímos o campo externo e t_A denota a transposição parcial no espaço horizontal no qual o operador \mathcal{L} atua não trivialmente. A partir de (2.30) podemos obter a função de partição

$$Z_L = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} \left[\prod_{j=1}^M (t^{QTM}(-\omega_j))^L \right], \quad (2.31)$$

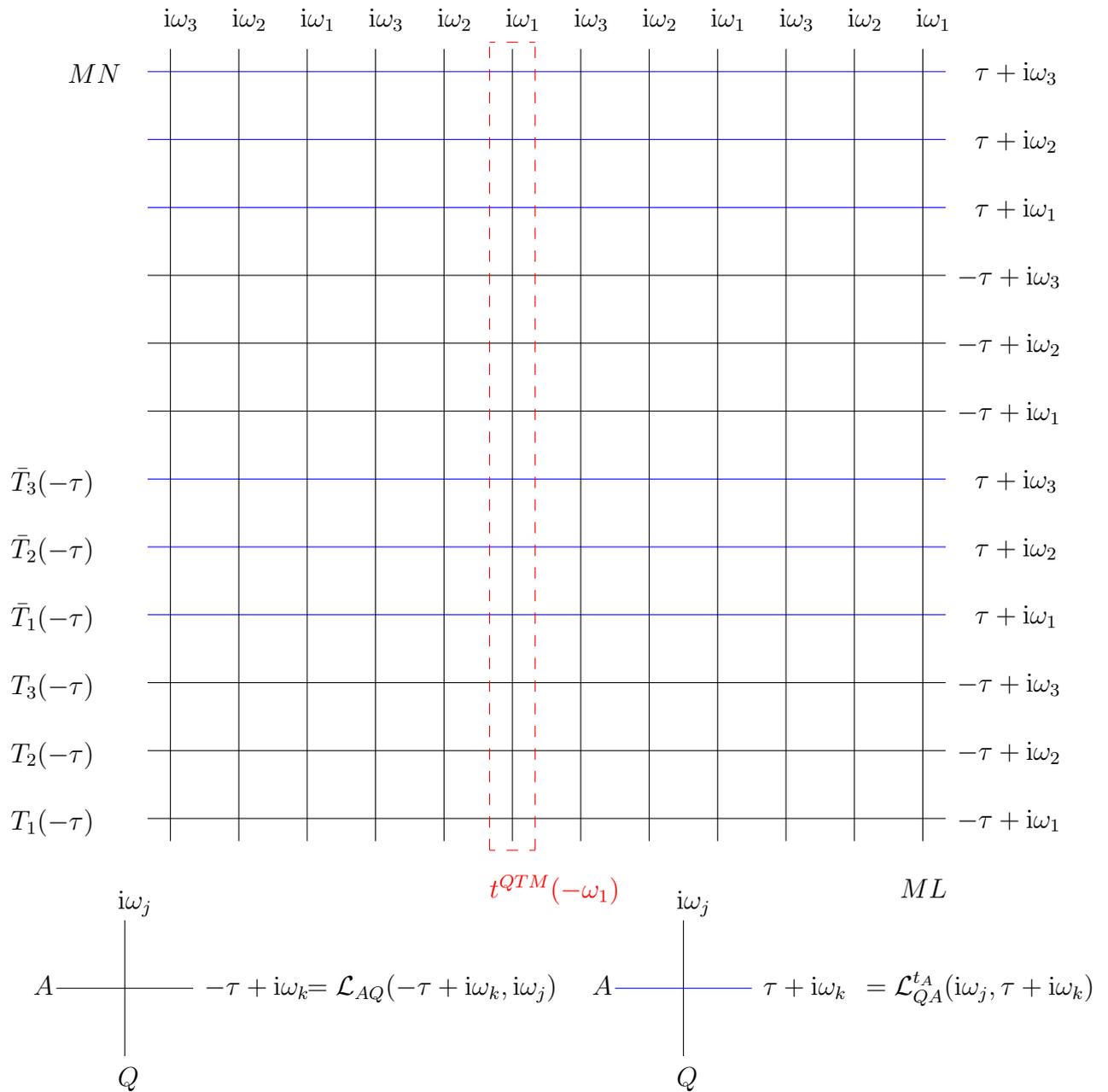


Figura 2.2: Modelo de vértices linhas alternadas $M = 3$; e Matriz de Transferência Quântica.

de modo que podemos escrever a energia livre apenas em termos do maior auto-valor $\Lambda_{max}^{QTM}(x)$

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{ML} \ln Z, \quad (2.32)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \ln \Lambda_{max}^{QTM}(-\omega_j). \quad (2.33)$$

2.2 Propriedades de Analiticidade e Equações Integrais Não Lineares

Na seção anterior mostramos que a energia-livre associada a um dado modelo quântico integrável pode ser obtida a partir do maior auto-valor da matriz de transferência quântica. Para continuar seguindo nesta direção, devemos ser capazes de calcular o maior auto-valor da QTM no limite $N \rightarrow \infty$. Iniciamos formulando o ansatz de Bethe para a QTM dada em (2.30) e coletamos algumas informações para valores de N finito.

Notando a alternância de operadores \mathcal{L}_{jQ} e \mathcal{L}_{Qj}^{tA} em (2.30), temos que um possível estado de referência será dado por

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[\prod_{j=1}^M \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_{M(2i-2)+j} \right] \left[\prod_{j=1}^M \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_{M(2i-1)+j} \right], \quad (2.34)$$

desta forma o ansatz de Bethe fornece

$$t^{QTM}(x)|\Psi(\vec{x})\rangle = \left(\alpha(x) \prod_{j=1}^n \frac{a}{b}(ix_k, ix) + \delta(x) \prod_{j=1}^n \frac{a}{b}(ix, ix_k) \right) |\Psi(\vec{x})\rangle, \quad (2.35)$$

sendo $\frac{a}{b}(x, y) := \frac{a(x, y)}{b(x, y)} = \frac{a(x-y)}{b(x-y)}$, $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$ e os x_j 's devem ser escolhidos tais que

$$\frac{\alpha}{\delta}(x_k) = \prod_{\substack{j \neq k \\ j=1}}^n \frac{a}{b}(ix_k, ix_j) \frac{b}{a}(ix_j, ix_k), \quad k = 1, \dots, n, \quad (2.36)$$

com

$$\alpha(x) = e^{\frac{\beta b}{2}} \left[\prod_{j=1}^M a(-\tau + i\omega_j, -ix) b(-ix, +\tau + i\omega_j) \right]^{\frac{N}{2}}, \quad (2.37)$$

$$\delta(x) = e^{\frac{-\beta b}{2}} \left[\prod_{j=1}^M b(-\tau + i\omega_j, -ix) a(-ix, +\tau + i\omega_j) \right]^{\frac{N}{2}}. \quad (2.38)$$

N	Auto-valor QTM	Raízes de Bethe
2 ($n = 1$)	6	$x_1 = 0$
4 ($n = 2$)	$\frac{2}{81} (89 + 32\sqrt{13})$	$x_{1,2} = \pm \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{3} (-5 + 2\sqrt{13})}$
6 ($n = 3$)	4.92772	$x_1 = 0, x_{2,3} = \pm 0.254405$

Tabela 2.1: Diagonalização direta e ansatz de Bethe: Estrutura de zeros associada ao maior auto-valor. $M = 1, \beta = 1, \mathfrak{h} = 0$.

Usando a parametrização (1.29), temos o auto-valor

$$\Lambda_n^{QTM}(x) = \underbrace{e^{\frac{\beta\mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_-(x)}{\Phi_-(x+i)} \frac{Q(x+i)}{Q(x)}}_{\lambda_1(x)} + \underbrace{e^{-\frac{\beta\mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_+(x)}{\Phi_+(x-i)} \frac{Q(x-i)}{Q(x)}}_{\lambda_2(x)}, \quad (2.39)$$

e as equações de Bethe

$$e^{\beta\mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x_k)\Phi_+(x_k-i)}{\Phi_-(x_k+i)\Phi_+(x_k)} = -\frac{Q(x_k-i)}{Q(x_k+i)}, \quad (2.40)$$

onde definimos as funções

$$\Phi_{\pm}(x) = \left[\prod_{j=1}^M x + \omega_j \pm i\tau \right]^{\frac{N}{2}}, \quad Q(x) = \prod_{j=1}^n (x - x_j). \quad (2.41)$$

Dentre todos estados de Bethe, queremos aquele que nos leva ao maior auto-valor. Isto implica em uma estrutura específica para a distribuição das raízes no plano complexo. Na Tabela 2.1 calculamos o maior auto-valor da QTM com $M = 1$ e $x = 0$ via diagonalização direta e encontramos a respectiva solução de Bethe. Adotamos arbitrariamente $\omega_1 = 0, \mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$. Se usássemos outro valor de ω_1 real, as raízes de Bethe seriam transladadas horizontalmente de $-\omega_1$ mas o auto-valor $\Lambda^{QTM}(-\omega_1)$ seria o mesmo. Como podemos ver, para $M = 1$ as raízes de Bethe se encontram sobre o eixo real e estão distribuídas simetricamente em torno da origem. Além disso o setor é $n = \frac{N}{2}$.

Passemos agora para situação em que $M = 2$, Tabela 2.2. Novamente adotamos $\omega_1 = 0$, visto que podemos mostrar uma equivalência entre $(\Lambda^{QTM}(-\omega_1), \Lambda^{QTM}(-\omega_2))$ e $(\Lambda^{QTM}(0), \Lambda^{QTM}(-\theta))$ com $\theta = \omega_2 - \omega_1$. Para isto as raízes de Bethe devem ser devidamente transladadas. Os valores de \mathfrak{h} e β foram mantidos os mesmos.

A primeira diferença que notamos em relação ao caso anterior é que o setor do maior auto-valor deixa de ser $n = \frac{N}{2}$ e passa a ser $n = N$. Logo propomos que, para M arbitrário, o setor será $n = \frac{MN}{2}$. Quanto à distribuição das raízes de Bethe, elas continuam sendo real mas passam a ter um novo centro de simetria: $-\frac{\theta}{2}$. Como será mostrado mais adiante, uma

N	Auto-valor QTM	Raízes de Bethe
2 ($n = 2$) $\theta = 0$	26	$x_{1,2} = \pm 0.288675$
2 ($n = 2$) $\theta = 0.27$	21.0569	$x_{1,2} = -0.135 \pm 0.309521$
2 ($n = 2$) $\theta = 1.27$	26.6955	$x_{1,2} = -0.635 \pm 0.657006$
4 ($n = 4$) $\theta = 0$	19.0165	$x_{1,2} = \pm 0.00926253$ $x_{3,4} = \pm 0.424422$
4 ($n = 4$) $\theta = 0.27$	16.5784	$x_{1,2} = -0.135 \pm 0.113948$ $x_{3,4} = -0.135 \pm 0.45533$
4 ($n = 4$) $\theta = 1.27$	6.86075	$x_{1,2} = -0.635 \pm 0.445562$ $x_{3,4} = -0.635 \pm 0.859361$

Tabela 2.2: Diagonalização direta e ansatz de Bethe: Estrutura de zeros associada ao maior auto-valor. $M = 2$, $\beta = 1$, $\mathfrak{h} = 0$.

N	Auto-valor QTM	Raízes de Bethe
2 ($n = 3$) $\theta_1 = 0$ $\theta_2 = 0$	119.648	$x_1 = 0$ $x_{2,3} = \pm 0.288675$
2 ($n = 3$) $\theta_1 = 0$ $\theta_2 = 1.27$	35.1029	$x_1 = -0.2607$, $x_2 = 0.2961$, $x_3 = -1.3054$
2 ($n = 3$) $\theta_1 = 0.27$ $\theta_2 = 1.27$	28.6765	$x_1 = -0.4042$, $x_2 = 0.1837$, $x_3 = -1.3194$
2 ($n = 3$) $\theta_1 = 1.27$ $\theta_2 = 1.27$	10.9065	$x_1 = -1.0093$, $x_2 = 0.0354$, $x_3 = -1.5661$

Tabela 2.3: Diagonalização direta e ansatz de Bethe: Estrutura de zeros associada ao maior auto-valor. $M = 3$, $\beta = 1$, $\mathfrak{h} = 0$.

visão mais adequada deste novo padrão é que as raízes se distribuem, aproximadamente, em torno de dois centros de simetria: um em 0 e outro em $-\theta$.

Vamos analisar agora o caso $M = 3$; mantivemos os mesmos valores de \mathfrak{h} e β , e estudamos em termos de $\theta_1 = \omega_2 - \omega_1$ e $\theta_2 = \omega_3 - \omega_1$, Tabela 2.3. Como podemos ver, o setor do maior auto-valor é dado por $n = \frac{MN}{2}$ comprovando nossa hipótese anterior. Além disto, as raízes de Bethe associadas continuam sobre o eixo real e se deformam em relação ao caso $M = 1$ criando, aproximadamente, M centros de distribuição. Assumindo este padrão, podemos proceder com a solução das equações de Bethe sem comparar com a diagonalização direta da QTM. Veja as Figuras 2.3, 2.4 e 2.5.

Além disto, nós observamos os efeitos devido à alteração de β e \mathfrak{h} . Quanto menor o valor de β , a distribuição tende a se concentrar mais em torno da origem; Figura 2.6. A presença do campo deforma o padrão de raízes, retirando-as do eixo real; Figura 2.7. Um fato que será usado mais adiante é que mesmo com campos tão fortes quanto $\mathfrak{h} = 5$, a parte imaginária das raízes de Bethe não passa de 0.5.

Já que precisamos do maior auto-valor no limite $N \rightarrow \infty$ para obter a energia livre, o

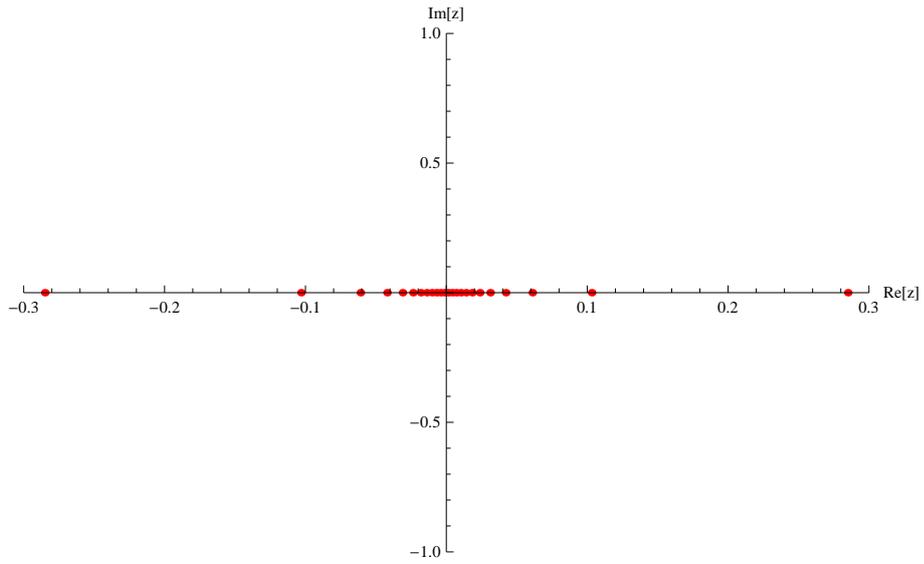


Figura 2.3: Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 48$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$.

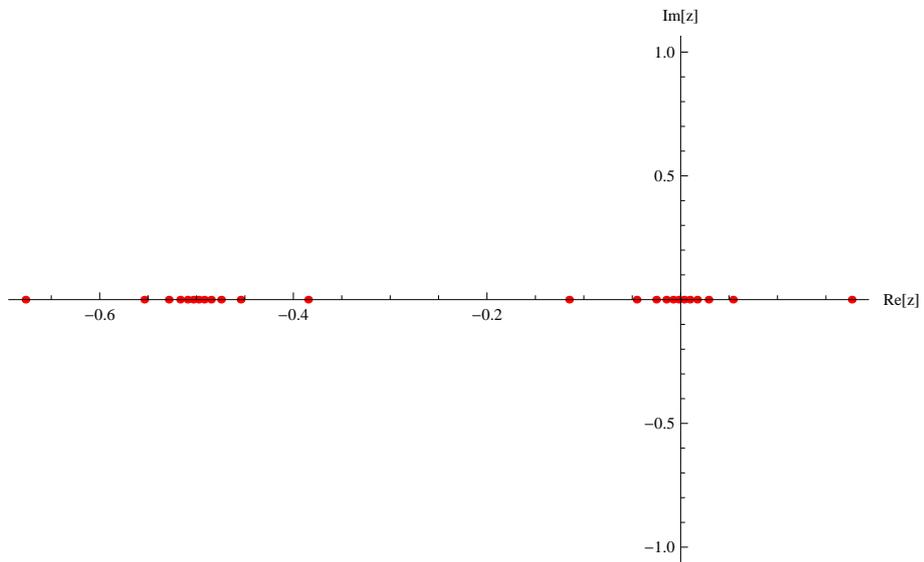


Figura 2.4: Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 24$, $M = 2$, $\theta_1 = 0.5$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$.

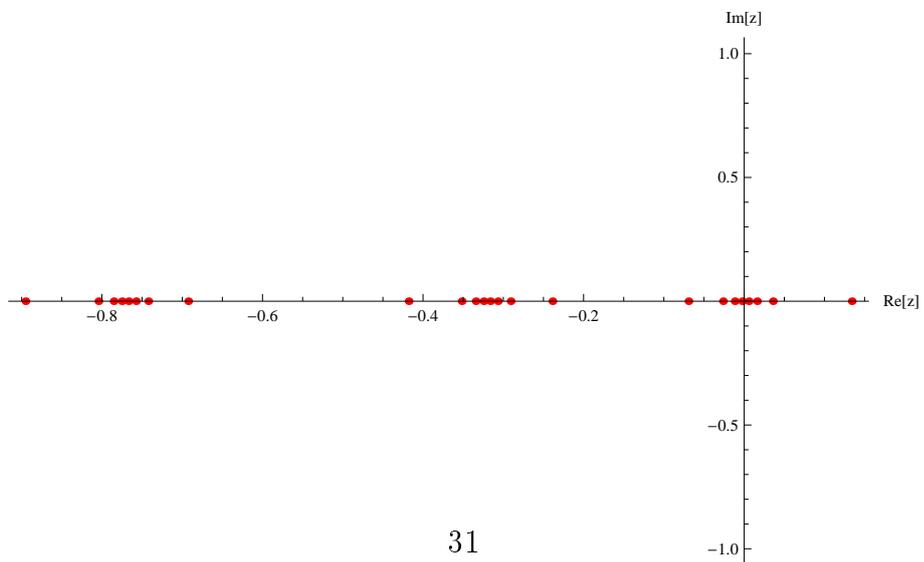


Figura 2.5: Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 16$, $M = 3$, $\theta_1 = 0.32$, $\theta_2 = 0.77$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$.

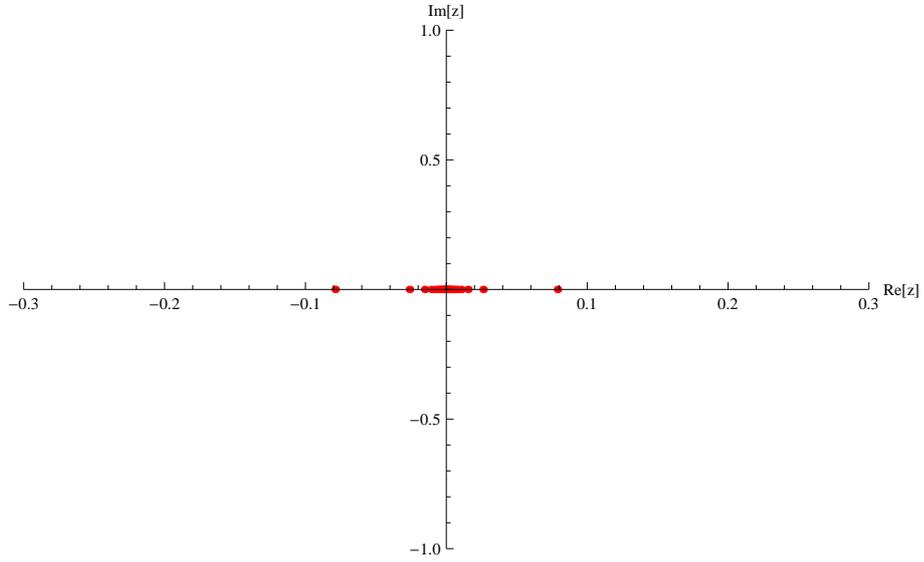


Figura 2.6: Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 48$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 0.25$.

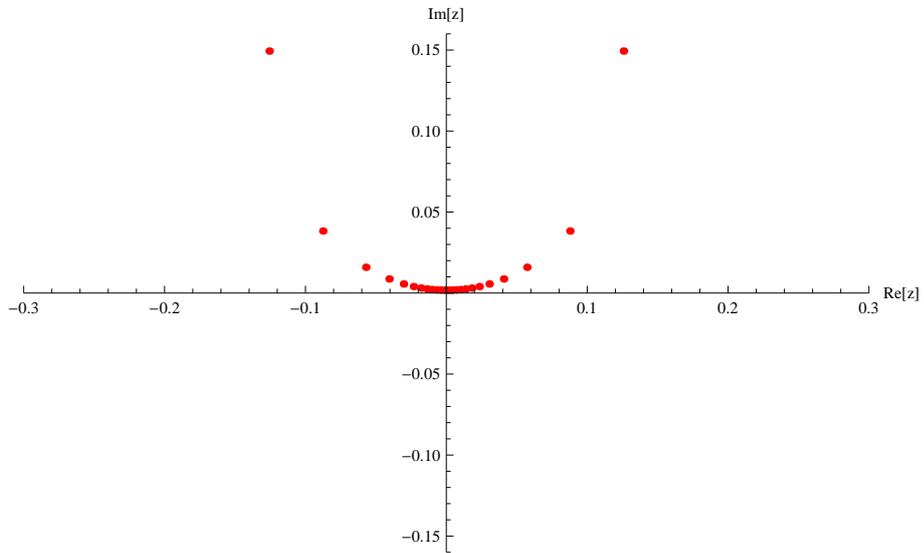


Figura 2.7: Raízes de Bethe para o maior auto-valor com $N = 48$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 5.0$ e $\beta = 1$.

procedimento mais ingênuo para isto seria resolver as equações de Bethe para N arbitrário de modo a fornecer o auto-valor como função de N e tomar $N \rightarrow \infty$. Este procedimento é impraticável por conta da natureza não linear das equações de Bethe; desde que não dispomos de métodos analíticos para resolver tais equações, o melhor cenário seria a solução numérica. Obviamente isto implica em N finito, o que pode fornecer um resultado insatisfatório quando comparado com o limite $N \rightarrow \infty$.

O primeiro resultado no sentido de obter exatamente o maior auto-valor da matriz de transferência, cuja matriz de monodromia associada é composta por uma infinidade de operadores \mathcal{L} 's, se deve a Hulthén[44]. O que cabe dizer aqui é que a abordagem devido a Hulthén se deve ao fato de que as raízes de Bethe associadas ao maior auto-valor se distribuem de modo a formar um contínuo. Isto nos permite definir uma densidade de raízes. O mesmo não ocorre com a QTM, veja a Figura 2.3.

Como podemos ver, a distribuição de raízes não tende a um contínuo. Ao invés disto, a origem se torna um ponto de acumulação e a distribuição deve se tornar discreta no limite $N \rightarrow \infty$. Tal efeito é agravado quanto menor o valor de β . Precisamos de um novo método para obter este limite.

Para contornar estas dificuldades, Klümper introduziu uma forma eficaz de se calcular o maior auto-valor da QTM no limite $N \rightarrow \infty$, que agora discorreremos sobre. O método baseia-se nas propriedades de analiticidade do auto-valor da QTM.

Se olharmos a expressão (2.39), veremos que o auto-valor é uma função racional em x e contém, possivelmente, pólos simples nas raízes de Bethe x_k 's. Impondo que o resíduo em torno de x_k seja zero, obtemos exatamente as equações de Bethe (2.40). Logo as equações de Bethe são vínculos que tornam a expressão do auto-valor analítica nos pontos x_k 's.

Quando uma função é analítica em determinado conjunto aberto do plano complexo, o teorema de Cauchy afirma que integrais em ciclos homólogos entre si serão iguais. Em particular se um ciclo, definido em um aberto, é homólogo a zero, então a integral será zero. Com estas propriedades podemos “transformar” definições em equações, como será exemplificado a seguir.

Defina as funções

$$\mathfrak{b}(x) := \frac{\lambda_1(x + i/2)}{\lambda_2(x + i/2)} = e^{\beta\mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x + i/2)\Phi_+(x - i/2)Q(x + 3i/2)}{\Phi_-(x + 3i/2)\Phi_+(x + i/2)Q(x - i/2)}, \quad (2.42)$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(x) := \frac{\lambda_2(x - i/2)}{\lambda_1(x - i/2)} = e^{-\beta\mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x + i/2)\Phi_+(x - i/2)Q(x - 3i/2)}{\Phi_-(x - i/2)\Phi_+(x - 3i/2)Q(x + i/2)}, \quad (2.43)$$

$$\mathfrak{B}(x) := 1 + \mathfrak{b}(x) = \frac{\Lambda(x + i/2)}{\lambda_2(x + i/2)} = e^{\beta\frac{\mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_+(x - i/2)Q(x + i/2)\Lambda(x + i/2)}{\Phi_+(x + i/2)Q(x - i/2)}, \quad (2.44)$$

$$\bar{\mathfrak{B}}(x) := 1 + \bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{\Lambda(x - i/2)}{\lambda_1(x - i/2)} = e^{-\beta\frac{\mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_-(x + i/2)Q(x - i/2)\Lambda(x - i/2)}{\Phi_-(x - i/2)Q(x + i/2)}, \quad (2.45)$$

onde estamos chamando $\Lambda(x) = \Lambda_{\frac{MN}{2}}^{QTM}(x)$ e assumindo a estrutura de zeros associada ao maior auto-valor, isto é, $\Lambda(x)$ é o maior auto-valor.

Como não conhecemos precisamente os zeros de Bethe em $Q(x)$, todas estas funções auxiliares e o auto-valor (2.39) são funções desconhecidas. Podemos pensar que temos seis funções incógnitas \mathfrak{b} , $\bar{\mathfrak{b}}$, \mathfrak{B} , $\bar{\mathfrak{B}}$, Q e Λ ; e cinco equações que são as definições (2.42, 2.43, 2.44, 2.45) e a expressão do maior auto-valor (2.39). Se soubéssemos resolver as equações de Bethe, poderíamos encontrar $Q(x)$, completando o conjunto necessário de equações para obter todas funções. Como não sabemos fazer isto, vamos tentar obter relações entre estas funções auxiliares, eliminando qualquer dependência explícita com Q . Podemos fazer isto da seguinte forma: Cada uma das funções acima definidas está escrita na forma de produto; tomando a derivada logarítmica podemos escrevê-las na forma de soma ¹. Não perdemos nenhuma informação ao tomar a derivada, pois conhecemos o limite $x \rightarrow \infty$ de cada uma destas funções

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \mathfrak{b}(x) = e^{\beta\mathfrak{h}}, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \bar{\mathfrak{b}}(x) = e^{-\beta\mathfrak{h}}, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \mathfrak{B}(x) = 1 + e^{\beta\mathfrak{h}}, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \bar{\mathfrak{B}}(x) = 1 + e^{-\beta\mathfrak{h}}, \quad (2.46)$$

e com isto podemos determinar as constantes de integração se desejarmos obter $\ln \mathfrak{b}(x)$ a partir de $\frac{d \ln \mathfrak{b}(x)}{dx}$, por exemplo.

Agora as diferentes translações da função $Q(x)$ que aparecem em (2.42, 2.43, 2.44, 2.45) podem ser colocadas sob uma mesma incógnita, ao tomarmos a transformada de Fourier. Por conta da transformada de Fourier, as translações no espaço real geram funções no espaço de Fourier(k) multiplicadas por fatores conhecidos. Podemos, de fato, tomar a transformada de Fourier das funções acima, pois nenhuma delas apresenta singularidades sobre o eixo real. As singularidades da derivada logarítmica de uma função meromorfa são os zeros e pólos da função. Na Figura 2.8 apresentamos os zeros e pólos de $\mathfrak{b}(x)$, assumindo o padrão de raízes de Bethe associado ao maior auto-valor.

¹Aqui a derivada logarítmica é um mnemônico para a função $f'(x)/f(x)$ que é uma função meromorfa se $f(x)$ é meromorfa. A “derivada logarítmica” tem a mesma propriedade funcional do logaritmo, entretanto não precisamos trabalhar com singularidades estendidas ou funções plurivalentes.

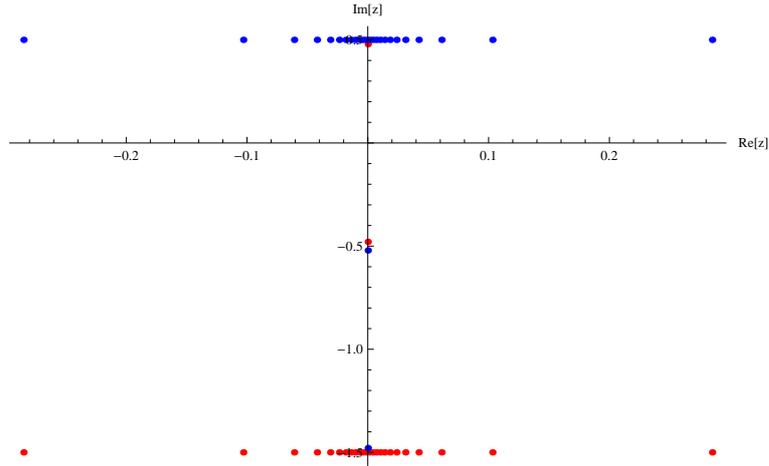


Figura 2.8: Zeros(vermelho) e pólos(azul) da função \mathfrak{b} . $N = 48$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$. Admitindo que este padrão prevaleça para N arbitrário, podemos tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica da função \mathfrak{b} . O mesmo é válido para a função $\bar{\mathfrak{b}}$.

As singularidades e pólos desta função podem ser obtidas trivialmente da definição (2.42). Os zeros de $\mathfrak{b}(x)$ são os zeros das funções $\Phi_-(x+i/2)$, $\Phi_+(x-i/2)$, $Q(x+3i/2)$ e os pólos são os zeros das funções $\Phi_-(x+3i/2)$, $\Phi_+(x+i/2)$, $Q(x-i/2)$. Do mesmo modo é fácil de ver que a função $\bar{\mathfrak{b}}(x)$ não possui zeros ou singularidades sobre o eixo real.

Note que no caso $M > 1$ as raízes de Bethe deformam apenas horizontalmente, em vista dos diferentes valores dos ω 's. Ainda quando $\mathfrak{h} \neq 0$, o deslocamento vertical não chega a ser $1/2$ (Figura 2.7) para um grande intervalo de campo. Logo podemos tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica de $\mathfrak{b}(x)$ e $\bar{\mathfrak{b}}(x)$ para uma grande faixa de campo, que inclui o intervalo $[0, 5]$.

Para tomar a transformada de Fourier de $\frac{d}{dx}(\ln(\mathfrak{b}))$, é necessário saber a transformada de $\frac{d}{dx}(\ln f(x))$ sendo $f(z)$ uma função do tipo $f(z) = (z - z_0)^m$ e m um inteiro qualquer. Desta forma temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} (\ln f(x)) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{m}{x - z_0} dx, \quad (2.47)$$

de modo que podemos executar os cálculo via teorema dos resíduos. Para $k < 0$ fazemos um caminho γ que fecha o caminho pelo eixo real com uma curva no infinito situada no semiplano superior, Figura 2.9. A integral na curva que se situa no infinito se anula, logo

$$\int_{\gamma} \frac{e^{-ikz}}{2\pi} \frac{d}{dz} (\ln f(z)) dz = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} (\ln f(x)) dx \quad (2.48)$$

Pelo teorema dos resíduos ($k < 0$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} (\ln f(x)) dx = \begin{cases} ime^{-ikz_0} & \text{se } z_0 \text{ está no semiplano superior} \\ 0 & \text{se } z_0 \text{ está no semiplano inferior} \end{cases}, \quad (2.49)$$

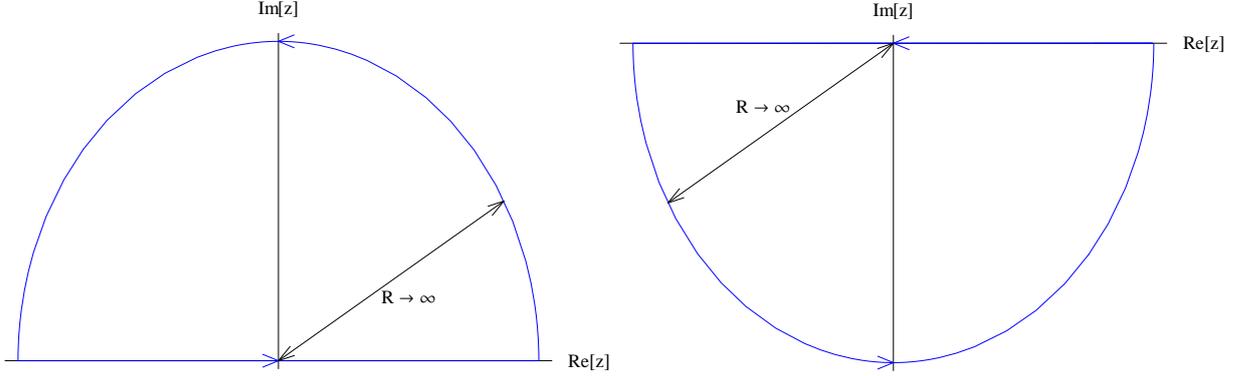


Figura 2.9: Trajetórias para o cálculo da transformada de Fourier via teorema dos resíduos. Esquerda $k < 0$. Direita $k \geq 0$.

para $k > 0$ fazemos um caminho γ que fecha o caminho pelo eixo real com uma curva no infinito situada o semiplano inferior, de modo que a integral nesta se anula, Figura 2.9.

Pelo teorema dos resíduos ($k > 0$)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} (\ln f(x)) dx = \begin{cases} 0 & \text{se } z_0 \text{ está no semiplano superior} \\ -ime^{-ikz_0} & \text{se } z_0 \text{ está no semiplano inferior} \end{cases}, \quad (2.50)$$

a partir de agora faremos uso da seguinte notação

$$\hat{\Phi}_{\pm}^p(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} \ln \Phi_{\pm}(x + i\epsilon) dx = -\frac{iN}{2} e^{\mp k\tau} \sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j}, \quad \text{se } k \geq 0, \quad (2.51)$$

$$\hat{\Phi}_{\pm}^m(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} \ln \Phi_{\pm}(x - i\epsilon) dx = \frac{iN}{2} e^{\mp k\tau} \sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j}, \quad \text{se } k < 0, \quad (2.52)$$

$$\hat{Q}^p(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} \ln Q(x + i\epsilon) dx = -i \sum_{j=1}^n e^{-ikx_j}, \quad \text{se } k \geq 0, \quad (2.53)$$

$$\hat{Q}^m(k) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} \ln Q(x - i\epsilon) dx = i \sum_{j=1}^n e^{-ikx_j}, \quad \text{se } k < 0, \quad (2.54)$$

onde assumimos sempre $\epsilon > \tau$, mas tomamos o limite $\epsilon \rightarrow 0$ após efetuar as integrais; e

$$\hat{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} (\ln f(x)) dx, \quad (2.55)$$

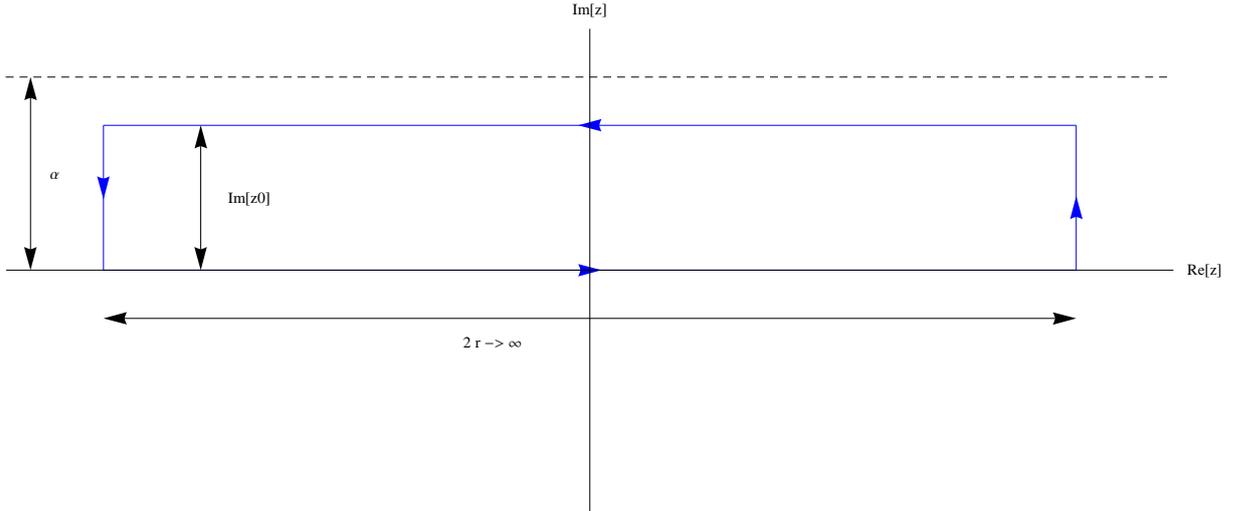


Figura 2.10: Relacionando transformadas de Fourier de funções analíticas numa faixa do plano complexo.

para as demais funções. Quando tomamos a transformada de Fourier de uma função transladada por um valor real x_0 , podemos relacionar esta transformada com a respectiva transformada da função sem translação. Temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} f(x + x_0) dx = e^{ikx_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} f(x) dx, \quad (2.56)$$

que pode ser obtida a partir de uma simples mudança de variável. A mesma relação considerando translações complexas nem sempre é válida. Entretanto, se houver uma região no plano complexo contendo a faixa $0 \leq \text{Im}[z] \leq \text{Im}[z_0]$ com $\text{Im}[z_0] > 0$ (ou contendo a faixa $\text{Im}[z_0] \leq \text{Im}[z] \leq 0$ se $\text{Im}[z_0] < 0$) onde função é analítica e a função se anula no limite $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x + si) = 0$ com $0 \leq s \leq \text{Im}[z_0]$ (ou $\text{Im}[z_0] \leq s \leq 0$). Temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} f(x + z_0) dx = e^{ikz_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} f(x) dx, \quad (2.57)$$

Isto pode ser facilmente provado ao aplicarmos o teorema de Cauchy no caminho da Figura 2.10.

Desta forma obtemos

$$\hat{\mathbf{b}}(k) = \begin{cases} -e^{k/2} \hat{Q}^m(k) + e^{k/2} \hat{\Phi}_+^m(k) & k < 0 \\ e^{-3k/2} \hat{Q}^p(k) - (e^{-3k/2} - e^{-k/2}) \hat{\Phi}_-^p(k) - e^{-k/2} \hat{\Phi}_+^p(k) & k \geq 0 \end{cases}, \quad (2.58)$$

$$\hat{\mathbf{b}}(k) = \begin{cases} e^{3k/2} \hat{Q}^m(k) - (e^{3k/2} - e^{k/2}) \hat{\Phi}_+^m(k) - e^{k/2} \hat{\Phi}_-^m(k) & k < 0 \\ -e^{-k/2} \hat{Q}^p(k) + e^{-k/2} \hat{\Phi}_-^p(k) & k \geq 0 \end{cases}, \quad (2.59)$$

Passemos agora a avaliar os zeros e pólos das funções \mathfrak{B} e $\bar{\mathfrak{B}}$. Os zeros de \mathfrak{B} são os zeros das funções $\Phi_+(x - i/2)$, $Q(x + i/2)$, $\Lambda(x + i/2)$ e os pólos são os zeros das funções $\Phi_+(x + i/2)$, $Q(x - i/2)$ adicionado dos pólos da função $\Lambda(x + i/2)$. Por conveniência, introduzimos o auto-valor auxiliar $\lambda(x) := \Phi_+(x - i)\Phi_-(x + i)\Lambda(x)$, de modo que as equações (2.44) e (2.45) passam a ser escritas na forma

$$\mathfrak{B}(x) = \frac{Q(x + i/2)\lambda(x + i/2)}{\Phi_-(x + 3i/2)\Phi_+(x + i/2)Q(x - i/2)}, \quad (2.60)$$

$$\bar{\mathfrak{B}}(x) = \frac{Q(x - i/2)\lambda(x - i/2)}{\Phi_+(x - 3i/2)\Phi_-(x - i/2)Q(x + i/2)}, \quad (2.61)$$

por conta das equações de Bethe, este auto-valor auxiliar $\lambda(x)$ tem a propriedade de ser uma função polinomial e, portanto, inteira. Basta agora estudar os zeros desta função. Para N finito, podemos verificar que os zeros de $\lambda(x)$ possuem parte imaginária próximo a ± 1 . Veja a Figura 2.11 onde expressamos $1/|\lambda(z)|$ ao longo de alguns eixos paralelos ao eixo real. Enquanto nos gráficos de $\frac{1}{|\Lambda(x)|}$ e $\frac{1}{|\Lambda(x+0.5i)|}$ a função se comporta de maneira bem suave, no gráfico de $\frac{1}{|\Lambda(x+i)|}$ vemos a presença de picos estreitos, assinalando proximidade de zeros. De modo geral, assumimos que os zeros da função $\lambda(x)$ estão próximos aos eixos $\text{Im}[z] = \pm 1$ e as deformações devido ao campo magnético são tais que estes zeros se encontram na região $|\text{Im}[z]| > \frac{1}{2}$. Desta forma podemos tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica das funções \mathfrak{B} e $\bar{\mathfrak{B}}$ e ainda relacionar facilmente as transformadas da derivada logarítmica de $\lambda(x \pm i/2)$ e $\lambda(x)$. Note que esta propriedade de relacionar transformadas do auto-valor $\lambda(x)$ é consequência direta das equações de Bethe e da estrutura de zeros assumida, qual seja a estrutura associada ao maior auto-valor. Temos

$$\hat{\mathfrak{B}}(k) = \begin{cases} -e^{k/2}\hat{Q}^m(k) + e^{-k/2}\hat{\lambda}(k) & k < 0 \\ e^{-k/2}\hat{Q}^p(k) + e^{-k/2}\hat{\lambda}(k) - e^{-3k/2}\hat{\Phi}_-^p(k) - e^{-k/2}\hat{\Phi}_+^p(k) & k \geq 0 \end{cases}, \quad (2.62)$$

$$\hat{\bar{\mathfrak{B}}}(k) = \begin{cases} e^{k/2}\hat{Q}^m(k) + e^{k/2}\hat{\lambda}(k) - e^{3k/2}\hat{\Phi}_+^m(k) - e^{k/2}\hat{\Phi}_-^m(k) & k < 0 \\ -e^{-k/2}\hat{Q}^p(k) + e^{k/2}\hat{\lambda}(k) & k \geq 0 \end{cases}, \quad (2.63)$$

Podemos usar as duas últimas equações para resolver para \hat{Q}^p , \hat{Q}^m e $\hat{\lambda}$ de modo que

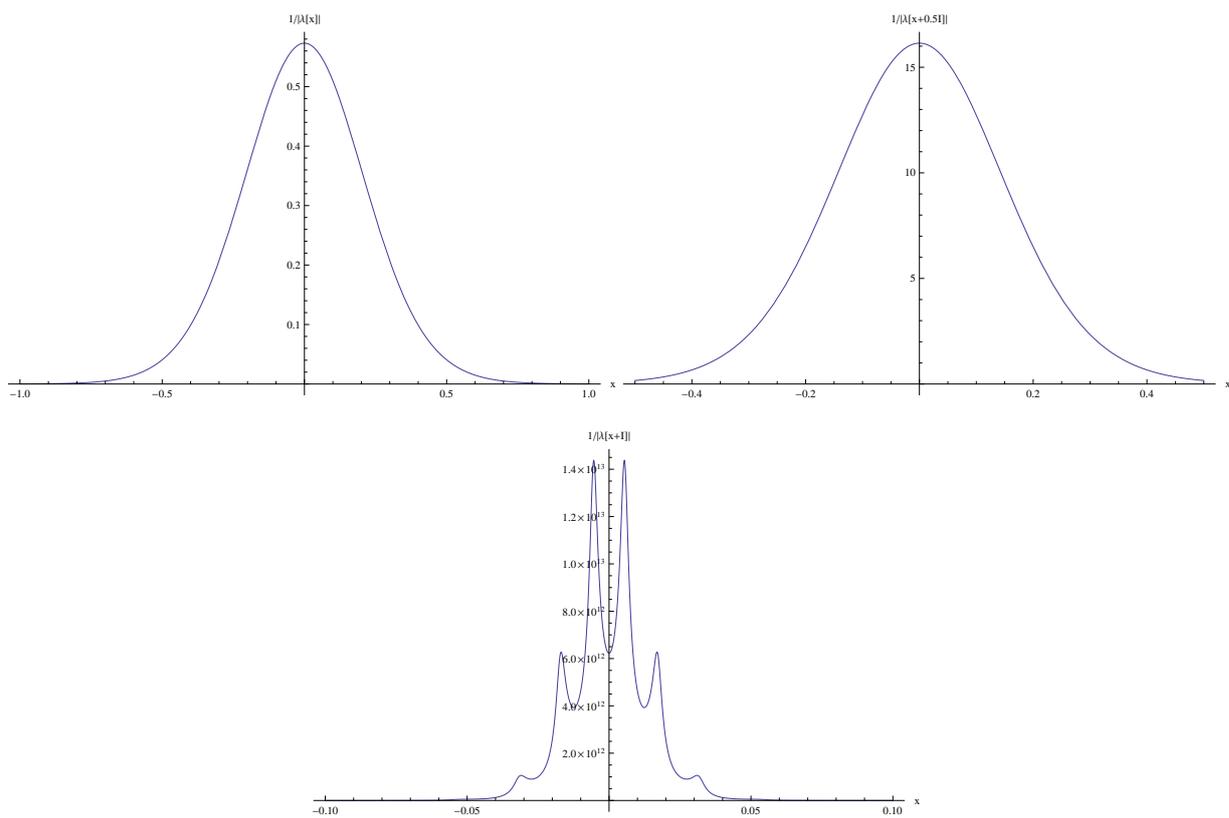


Figura 2.11: Gráfico de $\frac{1}{|\lambda(x+\alpha i)|}$, $\alpha = 0, \frac{1}{2}, 1$ com $N = 24$, $M = 1$, $\mathfrak{h} = 0$ e $\beta = 1$. Os picos assinalam a existência de zeros do maior auto-valor com parte imaginária próxima a 1.

obtemos

$$\hat{Q}^m(k) = \frac{1}{1+e^k} \left(\hat{\Phi}_-^m(k) + e^k \hat{\Phi}_+^m(k) - e^{k/2} \hat{\mathfrak{B}}(k) + e^{-k/2} \hat{\mathfrak{B}}(k) \right) \quad k < 0, \quad (2.64)$$

$$\hat{Q}^p(k) = \frac{1}{1+e^{-k}} \left(e^{-k} \hat{\Phi}_-^p(k) + \hat{\Phi}_+^p(k) + e^{k/2} \hat{\mathfrak{B}}(k) - e^{-k/2} \hat{\mathfrak{B}}(k) \right) \quad k \geq 0, \quad (2.65)$$

$$\hat{\lambda}(k) = \begin{cases} \frac{\hat{\Phi}_-^m(k) + e^k \hat{\Phi}_+^p(k)}{1+e^{-k}} + \frac{1}{2 \cosh(k/2)} \left(\mathfrak{B}(k) + \hat{\mathfrak{B}} \right) & k < 0 \\ \frac{\hat{\Phi}_+^p(k) + e^{-k} \hat{\Phi}_-^m(k)}{1+e^k} + \frac{1}{2 \cosh(k/2)} \left(\mathfrak{B}(k) + \hat{\mathfrak{B}} \right) & k \geq 0 \end{cases}. \quad (2.66)$$

Substituindo (2.64) e (2.65) em (2.58) e (2.59), obtemos uma relação que vincula as funções \mathfrak{b} 's com as \mathfrak{B} 's,

$$\hat{\mathfrak{b}}(k) = -i \frac{N \sinh(k\tau)}{2 \cosh(k/2)} \sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j} + \frac{1}{1+e^{|k|}} \hat{\mathfrak{B}}(k) - \frac{e^{-k}}{1+e^{|k|}} \hat{\mathfrak{B}}(k), \quad \forall k \quad (2.67)$$

$$\hat{\mathfrak{b}}(k) = -i \frac{N \sinh(k\tau)}{2 \cosh(k/2)} \sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j} - \frac{e^k}{1+e^{|k|}} \hat{\mathfrak{B}}(k) + \frac{1}{1+e^{|k|}} \hat{\mathfrak{B}}(k) \quad \forall k. \quad (2.68)$$

Diferentemente das equações (2.42, 2.43, 2.44, 2.45), que são apenas definições, as equações (2.67) e (2.68) não são triviais. A não trivialidade destas equações se deve ao fato de que assumimos as propriedades de analiticidade acima citadas, como estrutura de zeros associado ao maior auto-valor e a analiticidade da função $\lambda(x)$. Desta forma codificamos a informação devida às equações de Bethe.

Tomando o limite $N \rightarrow \infty$, vemos que

$$-i \frac{N \sinh(k\tau)}{2 \cosh(k/2)} \sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j} \rightarrow -\frac{\beta}{2} \frac{ik}{\cosh(k/2)} \sum_{j=1}^M \frac{e^{ik\omega_j}}{M} \quad \text{quando } N \rightarrow \infty, \quad (2.69)$$

de modo que não temos nenhuma divergência. O sistema de equações fica

$$\hat{\mathfrak{b}}(k) = -\frac{\beta}{2} \frac{ik}{\cosh(k/2)} \sum_{j=1}^M \frac{e^{ik\omega_j}}{M} + \frac{1}{1+e^{|k|}} \hat{\mathfrak{B}}(k) - \frac{e^{-k}}{1+e^{|k|}} \hat{\mathfrak{B}}(k), \quad (2.70)$$

$$\hat{\mathfrak{b}}(k) = -\frac{\beta}{2} \frac{ik}{\cosh(k/2)} \sum_{j=1}^M \frac{e^{ik\omega_j}}{M} - \frac{e^k}{1+e^{|k|}} \hat{\mathfrak{B}}(k) + \frac{1}{1+e^{|k|}} \hat{\mathfrak{B}}(k). \quad (2.71)$$

Tomando a transformada inversa, obtemos

$$\frac{d}{dx} \ln \mathfrak{b}(x) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x+\omega_j)} \frac{-\beta}{2} \frac{ik}{\cosh(k/2)} dk + \frac{d}{dx} [F * \ln \mathfrak{B}(x) - F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x+i)], \quad (2.72)$$

$$\frac{d}{dx} \ln \hat{\mathfrak{b}}(x) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x+\omega_j)} \frac{-\beta}{2} \frac{ik}{\cosh(k/2)} dk + \frac{d}{dx} [-F * \ln \mathfrak{B}(x-i) + F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x)], \quad (2.73)$$

onde $f * g(x)$ denota a convolução

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(s)g(x-s)ds, \quad (2.74)$$

e sendo $F(x)$ o “kernel” dado por

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{1}{1+e^{|k|}} dk, \quad (2.75)$$

ainda

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{-\beta}{2} \frac{ik}{\cosh(k/2)} dk = -\frac{\beta}{2} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{\cosh(k/2)} dx = \frac{d}{dx} \frac{-\beta\pi}{\cosh(\pi x)}, \quad (2.76)$$

Desta forma podemos integrar as equações (2.72) e (2.73) para obter

$$\ln \mathfrak{b}(x) = -\beta \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{\pi}{\cosh(\pi(x+\omega_j))} + F * \ln \mathfrak{B}(x) - F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x+i) + C_1, \quad (2.77)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = -\beta \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{\pi}{\cosh(\pi(x+\omega_j))} - F * \ln \mathfrak{B}(x-i) + F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x) + C_2, \quad (2.78)$$

as constantes podem ser determinadas avaliando o comportamento das funções auxiliares no limite $x \rightarrow \infty$. O limite das convoluções pode ser calculado da seguinte forma

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F * \ln \mathfrak{B}(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(s) \ln \mathfrak{B}(x-s) ds = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(s) ds \lim_{x \rightarrow \infty} \ln \mathfrak{B}(x), \quad (2.79)$$

mas

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} F(s) ds = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iks} F(s) ds \quad \text{quando } k=0, \quad (2.80)$$

assim

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F * \ln \mathfrak{B}(x) = \left(\frac{1}{1+e^{|k|}} \right)_{k=0} \lim_{x \rightarrow \infty} \ln \mathfrak{B}(x) = \frac{1}{2} \ln(1+e^{\beta\mathfrak{h}}), \quad (2.81)$$

e analogamente para as outras convoluções. Podemos verificar facilmente que $C_1 = -C_2 = \frac{\beta\mathfrak{h}}{2}$. Sendo assim temos

$$\ln \mathfrak{b}(x) = -\beta \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{\pi}{\cosh(\pi(x+\omega_j))} + F * \ln \mathfrak{B}(x) - F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x+i) + \frac{\beta\mathfrak{h}}{2}, \quad (2.82)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = -\beta \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{\pi}{\cosh(\pi(x+\omega_j))} - F * \ln \mathfrak{B}(x-i) + F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x) - \frac{\beta\mathfrak{h}}{2}, \quad (2.83)$$

$$\mathfrak{B}(x) = 1 + \mathfrak{b}(x), \quad (2.84)$$

$$\bar{\mathfrak{B}}(x) = 1 + \bar{\mathfrak{b}}(x), \quad (2.85)$$

um sistema de equações integrais não lineares do tipo convolução. Este conjunto de equações formam um sistema fechado que pode ser resolvido numericamente. Além disto, podemos expressar o auto-valor em termos destas funções. Tomando a transformada de Fourier na definição do auto-valor auxiliar, temos

$$\hat{\lambda}(k) = e^k \Phi_+^m(k) + \hat{\Lambda}(k) \quad \text{se } k < 0, \quad (2.86)$$

$$\hat{\lambda}(k) = e^{-k} \Phi_-^p(k) + \hat{\Lambda}(k) \quad \text{se } k \geq 0, \quad (2.87)$$

utilizando a equação (2.66), obtemos

$$\hat{\Lambda}(k) = iN \frac{\sinh(k\tau)}{1 + e^{|k|}} \sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j} + \frac{1}{2 \cosh(\frac{k}{2})} (\mathfrak{B}(k) + \hat{\mathfrak{B}}(k)), \quad \forall k, \quad (2.88)$$

e após tomar o limite no número de Trotter, tomar a transformada inversa, e obter a constante de integração, ficamos com

$$\ln \Lambda(x) = \beta r(x) + (K * \ln \mathfrak{B}\bar{\mathfrak{B}})(x), \quad (2.89)$$

sendo $r(x) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik(x+\omega_j)}}{1+e^{|k|}} dk$ e $K(x) = \frac{\pi}{\cosh(\pi x)}$. Logo a energia-livre (2.33) fica

$$f = e_0 - \frac{1}{M\beta} \sum_{j=1}^M (K * \ln \mathfrak{B}\bar{\mathfrak{B}})(-\omega_j), \quad (2.90)$$

sendo e_0 a energia do estado fundamental com $\mathfrak{h} = 0$ dada por

$$e_0 = - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{1 + e^{|k|}} \right] \left| \frac{\sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j}}{M} \right|^2 dk. \quad (2.91)$$

Devemos dizer que estas equações integrais para a descrição das propriedades termodinâmicas foram obtidas mediante a definição apropriada das funções auxiliares. Não existe, até os dias atuais, regra para a definição destas funções.

Capítulo 3

Matriz de Transferência Quântica Spin- s

Neste capítulo estendemos o método da matriz de transferência quântica a modelos de spin- s integráveis, derivados do operador $\mathcal{L}^{(ss)}$ da seção 1.2. Para tal finalidade, mostramos na seção 3.1.1 que o processo de fusão dos operadores \mathcal{L} 's implicam em uma hierarquia de fusão para as correspondentes matrizes de transferência[45]. Esta hierarquia nos permite expressar o auto valor de $t^{(s,s)}(x)$, a QTM de interesse, em termos do auto-valor da QTM elementar $t^{(s,\frac{1}{2})}(x)$, para a qual aplicamos o ansatz de Bethe diretamente. Posteriormente, na seção 3.1.2, introduzimos as relações funcionais dos sistemas T e Y , que serão de grande importância para a definição das funções auxiliares e para estabelecer relações entre estas[25]. Na seção 3.2 apresentamos a contribuição original do nosso trabalho, que se refere à obtenção de equações integrais não-lineares para descrever a termodinâmica de modelos integráveis de spin- s , similares ao modelo de Heisenberg, e com a generalização devida a introdução de M parâmetros de heterogeneidade na correspondente matriz de transferência linha-a-linha[36]. Isto só pôde ser realizado mediante o estudo prévio das propriedades de analiticidade das funções auxiliares relevantes.

3.1 Hierarquia de Fusão para Matriz de Transferência Quântica

Para todos efeitos, a decomposição de Trotter-Suzuki é essencialmente a mesma do caso spin- $\frac{1}{2}$, exceto pelo fato da matriz \mathcal{L} atuar no espaço de dimensão $(2s+1) \otimes (2s+1)$,

matriz esta que denotamos por $\mathcal{L}^{(s,s)}$. A matriz de transferência quântica será dada por

$$t^{(s,s)}(x) = \text{Tr}_Q \left[e^{\beta \hbar S_Q^z} \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{M(2i-2)+j,Q}^{(ss)}(-\tau + i\omega_j, -ix) \right] \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{Q,M(2i-1)+j}^{(ss)}(-ix, \tau + i\omega_j)^{t_A} \right] \right], \quad (3.1)$$

onde S_Q^z é a componente z do operador de spin s , e as matrizes $\mathcal{L}_{ab}^{(ss)}$ são obtidas a partir do processo de fusão, tal como explicado na seção 1.2. Esta matriz de transferência quântica obviamente não obedece a relação fundamental (1.10) com $R_{ab}(\lambda, \mu) = \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})}(\lambda, \mu)$. Basta notar a diferença entre as dimensões dos espaços envolvidos. Logo a formulação do ansatz de Bethe apresentada no Apêndice A não pode ser aplicada. Podemos evitar uma nova formulação do ansatz de Bethe notando que a relação de fusão das matrizes \mathcal{L} 's implica em uma hierarquia de fusão entre as matrizes de transferência $t^{(s,j)}(x)$, onde estaremos interessados em $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots, s$. Isto nos permitirá escrever o auto-valor da matriz (3.1) em termos do auto-valor mais elementar a ser obtido de:

$$t^{(s, \frac{1}{2})}(x) = \text{Tr}_Q \left[e^{\beta \hbar S_Q^z} \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{M(2i-2)+j,Q}^{(s, \frac{1}{2})}(-\tau + i\omega_j, -ix) \right] \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{Q,M(2i-1)+j}^{(\frac{1}{2}, s)}(-ix, \tau + i\omega_j)^{t_A} \right] \right], \quad (3.2)$$

sendo que S_Q^z denota a componente z do operador de spin $\frac{1}{2}$. Além disso, a hierarquia de fusão entre matrizes de transferência implica em relações funcionais conhecidas como sistema T e sistema Y . Estas relações estão intimamente ligadas à escolha de funções auxiliares na obtenção das equações integrais não lineares relevantes para a termodinâmica. Iniciemos, então, estabelecendo a hierarquia de fusão para matrizes de transferência.

3.1.1 Hierarquia de Fusão

Por hora vamos olhar o caso $M = 1$ e considere o seguinte produto entre matrizes de monodromia:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_q^{(\frac{1}{2})}(x + ij) \mathcal{T}_{\bar{q}}^{(j)}(x - \frac{i}{2}) &= \left[e^{\beta \hbar S_{\bar{q}}^z} \mathcal{L}_{1, \bar{q}}^{(s, \frac{1}{2})}(-\tau + i\omega_1 + ix - j) \mathcal{L}_{\bar{q}, 2}^{\frac{1}{2}s t_A}(-\tau - i\omega_1 - ix - j) \dots \right. \\ &\quad \left. \mathcal{L}_{N-1, \bar{q}}^{(s, \frac{1}{2})}(-\tau + i\omega_1 + ix - j) \mathcal{L}_{\bar{q}, N}^{(\frac{1}{2}s) t_A}(-\tau - i\omega_1 - ix - j) \right] \\ &\quad \left[e^{\beta \hbar S_{\bar{q}}^z} \mathcal{L}_{1, \bar{q}}^{(sj)}(-\tau + i\omega_1 + ix + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{\bar{q}, 2}^{(js) t_A}(-\tau - i\omega_1 - ix + \frac{1}{2}) \dots \right. \\ &\quad \left. \mathcal{L}_{N-1, \bar{q}}^{(sj)}(-\tau + i\omega_1 + ix + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{\bar{q}, N}^{(js) t_A}(-\tau - i\omega_1 - ix + \frac{1}{2}) \right], \quad (3.3) \end{aligned}$$

onde o operador S_q^z denota a componente z do operador de spin- $\frac{1}{2}$ e $S_{\bar{q}}^z$ a componente z do operador de spin j . Tomando o traço no espaço $q\bar{q}$, obtemos

$$t^{(s, \frac{1}{2})}(x+ij)t^{(s, j)}(x-\frac{i}{2}) = \text{Tr}_{q\bar{q}} \left[e^{\beta \mathfrak{h}(S_q^z + S_{\bar{q}}^z)} \mathcal{L}_{1, q}^{(s, \frac{1}{2})}(-\tau + i\omega_1 + ix - j) \mathcal{L}_{1, \bar{q}}^{(s, j)}(-\tau + i\omega_1 + ix + \frac{1}{2}) \dots \right. \\ \left. \mathcal{L}_{q, N}^{(\frac{1}{2}, s)^{tA}}(-\tau - i\omega_1 - ix - j) \mathcal{L}_{\bar{q}, N}^{(j, s)^{tA}}(-\tau - i\omega_1 - ix + \frac{1}{2}) \right]. \quad (3.4)$$

Ao tomar o traço no espaço $q\bar{q}$ podemos escolher uma base particular que possui spin total e componente z do spin total definido. Podemos usar a base de Clebsch-Gordan na decomposição $\frac{1}{2} \otimes j = j - \frac{1}{2} \oplus j + \frac{1}{2}$. Um vetor particular de $j \pm \frac{1}{2}$ na decomposição anterior pode ser escrito como

$$|j \pm \frac{1}{2}, m\rangle = \frac{j \pm \frac{1}{2}}{Q} B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}, j)} e_{(j \pm \frac{1}{2}) - m + 1}, \quad m = 1, \dots, 2(j \pm \frac{1}{2}) + 1. \quad (3.5)$$

sendo e_k uma matriz coluna cuja única entrada não nula situa na k -ésima linha. Logo o traço anterior pode ser escrito como

$$t^{(s, \frac{1}{2})}(x+ij)t^{(s, j)}(x-\frac{i}{2}) = \text{Tr}_Q \left[e^{\beta \mathfrak{h} S_Q^z} \frac{j + \frac{1}{2}}{Q} B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}, j)^t} \mathcal{L}_{1, q}^{(s, \frac{1}{2})}(-\tau + i\omega_1 + ix - j) \mathcal{L}_{1, \bar{q}}^{(s, j)}(-\tau + i\omega_1 + ix + \frac{1}{2}) \dots \right. \\ \left. \mathcal{L}_{q, N}^{(\frac{1}{2}, s)^{tA}}(-\tau - i\omega_1 - ix - j) \mathcal{L}_{\bar{q}, N}^{(j, s)^{tA}}(-\tau - i\omega_1 - ix + \frac{1}{2}) \frac{j + \frac{1}{2}}{Q} B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}, j)} \right] + \\ \text{Tr}_{\bar{Q}} \left[e^{\beta \mathfrak{h} S_{\bar{Q}}^z} \frac{j - \frac{1}{2}}{\bar{Q}} B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}, j)^t} \mathcal{L}_{1, q}^{(s, \frac{1}{2})}(-\tau + i\omega_1 + ix - j) \mathcal{L}_{1, \bar{q}}^{(s, j)}(-\tau + i\omega_1 + ix + \frac{1}{2}) \dots \right. \\ \left. \mathcal{L}_{q, N}^{(\frac{1}{2}, s)^{tA}}(-\tau - i\omega_1 - ix - j) \mathcal{L}_{\bar{q}, N}^{(j, s)^{tA}}(-\tau - i\omega_1 - ix + \frac{1}{2}) \frac{j - \frac{1}{2}}{\bar{Q}} B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}, j)} \right], \quad (3.6)$$

usando as propriedades listadas na seção 1.2, podemos mostrar que o traço no espaço Q é $t^{(s, j + \frac{1}{2})}(x)$, por definição do nosso processo de fusão. Por outro lado o traço em \bar{Q} não é exatamente $t^{(s, j - \frac{1}{2})}(x)$, pois em 1.2 nós não consideramos o efeito da fusão para a representação de spin menor, onde toma-se a representação no espaço de spin $j - \frac{1}{2}$ de $q\bar{q}$ no produto $\mathcal{L}_{k, q}^{(s, \frac{1}{2})}(\lambda - j) \mathcal{L}_{k, \bar{q}}^{(s, j)}(\lambda + \frac{1}{2})$. Temos

$$t^{(s, \frac{1}{2})}(x+ij)t^{(s, j)}(x-i/2) = t^{(s, j + \frac{1}{2})}(x) + \text{Tr}_{\bar{Q}} \left[\frac{j - \frac{1}{2}}{\bar{Q}} B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}, j)^t} \mathcal{T}_q^{(\frac{1}{2})}(x+ij) \mathcal{T}_{\bar{q}}^{(j)}(x-i/2) \frac{j - \frac{1}{2}}{\bar{Q}} B_{q\bar{q}}^{\frac{1}{2}, j} \right], \quad (3.7)$$

e desejamos obter o traço no espaço \bar{Q} . Note que a equação (3.7) vale para matrizes de transferência quântica para qualquer valor de M , apesar de termos iniciado a argumentação inicial com $M = 1$. Vamos olhar o caso $j = \frac{1}{2}$. Denotando

$$\mathcal{T}_c^{(\frac{1}{2})}(x) = \begin{bmatrix} A(x) & B(x) \\ C(x) & D(x) \end{bmatrix}_c, \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned}
\text{Tr}_{\bar{Q}} \left[\begin{array}{c} {}_0^0 B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})^t} \mathcal{T}_q^{(\frac{1}{2})}(x+i/2) \mathcal{T}_{\bar{q}}^{(\frac{1}{2})}(x-i/2) {}_0^0 B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})} \end{array} \right] = \\
\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^+A^- & A^+B^- & B^+A^- & B^+B^- \\ A^+C^- & A^+D^- & B^+C^- & B^+D^- \\ C^+A^- & C^+B^- & D^+A^- & D^+B^- \\ C^+C^- & C^+D^- & D^+C^- & D^+D^- \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix} \\
= \frac{1}{2} [D^+A^- - B^+C^- + A^+D^- - C^+B^-], \quad (3.9)
\end{aligned}$$

sendo $A^\pm = A(x \pm i/2)$ e etc. A expressão acima pode ser simplificada ainda mais se considerarmos as relações algébricas devido à relação fundamental na seguinte forma

$$\mathcal{T}_q(x+i/2) \mathcal{T}_{\bar{q}}(x-i/2) R_{q\bar{q}}(1) = R_{q\bar{q}}(1) \mathcal{T}_{\bar{q}}(x-i/2) \mathcal{T}_q(x+i/2), \quad (3.10)$$

lembrando que $R_{q\bar{q}}(1) = \mathcal{L}_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(1) = \check{P}_{q\bar{q}}^1$, encontramos as seguintes relações

$$\begin{aligned}
A^+A^- &= A^-A^+, & B^+B^- &= B^-B^+, & C^+C^- &= C^-C^+, & D^+D^- &= D^-D^+, \\
A^-B^+ &= B^-A^+ = \frac{(B^+A^- + A^+B^-)}{2}, \\
A^+C^- &= C^+A^- = \frac{(A^-C^+ + C^-A^+)}{2}, \\
D^+B^- &= B^+D^- = \frac{(B^-D^+ + D^-B^+)}{2}, \\
D^-C^+ &= C^-D^+ = \frac{(D^+C^- + C^+D^-)}{2}, \\
D^+A^- + C^+B^- &= A^-D^+ + C^-B^+ = B^-C^+ + D^-A^+ = B^+C^- + A^+D^-. \quad (3.11)
\end{aligned}$$

A última linha das relações (3.11) nos mostra que

$$\text{Tr}_{\bar{Q}} \left[\begin{array}{c} {}_0^0 B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})^t} \mathcal{T}_q^{(\frac{1}{2})}(x+i/2) \mathcal{T}_{\bar{q}}^{(\frac{1}{2})}(x-i/2) {}_0^0 B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})} \end{array} \right] = D^+A^- - B^+C^-, \quad (3.12)$$

esperamos que tal operador esteja relacionado com a matriz $t^{(s,0)}(x) = \text{Id}$. Com efeito, temos para todo estado de Bethe

$$(D^+A^- - B^+C^-) |\Psi_n\rangle = \delta(x+i/2) \alpha(x-i/2) |\Psi_n\rangle = \chi(x) |\Psi_n\rangle. \quad (3.13)$$

Logo $D^+A^- - B^+C^- = \chi(x) \text{Id}$. Esta quantidade é chamada de determinante quântico. Da expressão explícita das matrizes $\mathcal{L}^{(\frac{1}{2}s)}(\lambda)$, podemos obter facilmente o determinante quântico

$$\chi(x) = \prod_{j=1}^M \left[\frac{(x + \omega_j - i\tau - is)(x + \omega_j + i\tau + is)}{(x + \omega_j - i\tau + is)(x + \omega_j + i\tau - is)} \right]^{N/2} = \frac{\Phi_-(x-is)\Phi_+(x+is)}{\Phi_-(x+is)\Phi_+(x-is)}. \quad (3.14)$$

Desta forma, temos

$$t^{(s,1)}(x) = t^{(s,\frac{1}{2})}(x + i/2)t^{(s,\frac{1}{2})}(x - i/2) - \chi(x)t^{(s,0)}(x - i). \quad (3.15)$$

Para o caso $j = 1$, em (3.7) obtemos

$$\text{Tr}_{\bar{Q}} \left[\frac{1}{\bar{Q}} B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2},1)t} \mathcal{T}_q^{(\frac{1}{2})}(x + i) \mathcal{T}_{\bar{q}}^{(1)}(x - i/2) \frac{1}{\bar{Q}} B_{q\bar{q}}^{(\frac{1}{2},1)} \right] = \begin{bmatrix} \eta_{11} & \eta_{12} \\ \eta_{21} & \eta_{22} \end{bmatrix}, \quad (3.16)$$

sendo

$$\begin{aligned} \eta_{11} &= \frac{1}{3} (2D^{+1}A^0A^{-1} - 2B^{+1}C^0A^{-1} - 2C^1A^0B^{-1} + A^1D^0A^{-1} + A^{-1}C^0B^1), \\ \eta_{22} &= \frac{1}{3} (2A^{+1}D^0D^{-1} - 2C^{+1}D^0B^{-1} - 2B^1C^0D^{-1} + D^1D^0A^{-1} + C^{-1}C^0B^1), \\ \eta_{12} &= \frac{1}{3} (2A^{+1}D^0B^{-1} - 2C^{+1}B^0B^{-1} + 2D^1A^0B^{-1} - B^1C^0B^{-1} - D^{-1}A^0B^1), \\ \eta_{21} &= \frac{1}{3} (2D^{+1}A^0C^{-1} - 2B^{+1}C^0C^{-1} + 2A^1D^0C^{-1} - C^1B^0C^{-1} - A^{-1}D^0C^1), \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde denotamos $A^r = A(x + ir)$, $B^r = B(x + ir)$ e etc. Com uso das relações (3.11) podemos mostrar que $\eta_{11} = \chi(x + i/2)A^{-1}$, $\eta_{12} = \chi(x + i/2)B^{-1}$, $\eta_{21} = \chi(x + i/2)C^{-1}$, $\eta_{22} = \chi(x + i/2)D^{-1}$. Sendo assim, obtemos

$$t^{(s,\frac{3}{2})}(x) = t^{(s,\frac{1}{2})}(x + i)t^{(s,1)}(x - i/2) - \chi(x + i/2)t^{(s,\frac{1}{2})}(x - i). \quad (3.18)$$

Mais geralmente teremos[45]

$$t^{(s,j+\frac{1}{2})}(x) = t^{(s,\frac{1}{2})}(x + ij)t^{(s,j)}(x - i/2) - \chi(x + ij - i/2)t^{(s,j-\frac{1}{2})}(x - i), \quad (3.19)$$

que é a desejada hierarquia de fusão.

3.1.2 Sistema T e Sistema Y

A hierarquia de fusão deduzida na seção anterior é uma relação mista que envolve um termo quadrático em t e dois lineares. Com o objetivo de definir funções auxiliares apropriadas, iremos introduzir o sistema T e logo em seguida o sistema Y . Diferentemente de (3.19) estes sistemas envolve apenas termos quadráticos, sendo o sistema T um passo intermediário para encontrar o sistema Y . Particularmente o sistema Y será utilizado diretamente na definição das funções auxiliares.

Por simplicidade, vamos omitir o índice s em (3.19). Iniciemos com a seguinte proposição[45]

$$t^{(j)}(x + i/2)t^{(j)}(x - i/2) = t^{(j-\frac{1}{2})}(x)t^{(j+\frac{1}{2})}(x) + \prod_{m=-j+\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} \chi(x - mi)\text{Id}, \quad (3.20)$$

que, por (3.19), é obviamente verdadeira quando $j = \frac{1}{2}$, pois $t^{(0)}(x) = \text{Id}$. Suponhamos que ela seja válida para $j = k - \frac{1}{2}$, provemos que ela também será válida para $j = k$. Escrevendo (3.19) na forma

$$t^{(\frac{1}{2})}(x + ik)t^{(k)}(x - i/2) = t^{(k+\frac{1}{2})}(x) + \chi(x + ik - i/2)t^{(k-\frac{1}{2})}(x - i), \quad (3.21)$$

multiplicamos esta equação por $t^{(k-\frac{1}{2})}(x)$:

$$\left(t^{(\frac{1}{2})}(x + ik)t^{(k-\frac{1}{2})}(x)\right) t^{(k)}(x - i/2) = t^{(k-\frac{1}{2})}(x)t^{(k+\frac{1}{2})}(x) + \chi(x + i(k-1/2)) \left(t^{(k-\frac{1}{2})}(x - i)t^{(k-\frac{1}{2})}(x)\right), \quad (3.22)$$

no parênteses do lado esquerdo utilizamos (3.19) com $j = k - \frac{1}{2}$ e no parênteses do lado direito utilizamos a validade de (3.20) para $j = k - \frac{1}{2}$. Após algumas simplificações obtemos

$$t^{(k)}(x + i/2)t^{(k)}(x - i/2) = t^{(k-\frac{1}{2})}(x)t^{(k+\frac{1}{2})}(x) + \prod_{m=-k+\frac{1}{2}}^{k-\frac{1}{2}} \chi(x - mi)\text{Id}, \quad (3.23)$$

que nada mais é que a relação (3.20) para $j = k$. Por indução, a proposição (3.20) é válida para todo j pertencente a $\mathbb{Z}^+/2$ e pode ser estendida a $\mathbb{Z}/2$ se assumirmos $t^{(-\frac{1}{2})}(x) = 0$. A relação (3.20) é o chamado sistema T e, como dito anteriormente, possui apenas termos quadráticos em t .

Agora defina

$$y^{(j)}(x) := \frac{t^{(j-\frac{1}{2})}(x)t^{(j+\frac{1}{2})}(x)}{f_j(x)}, \quad Y^{(j)}(x) := \text{Id} + y^{(j)}(x), \quad (3.24)$$

sendo $f_j(x) = \prod_{m=-j+\frac{1}{2}}^{j-\frac{1}{2}} \chi(x - mi)$. Temos

$$\begin{aligned} y^{(j)}(x - i/2)y^{(j)}(x + i/2) &= \frac{t^{(j-\frac{1}{2})}(x - i/2)t^{(j-\frac{1}{2})}(x + i/2)t^{(j+\frac{1}{2})}(x - i/2)t^{(j+\frac{1}{2})}(x + i/2)}{f_j(x - i/2)f_j(x + i/2)}, \\ &= \frac{f_{j-\frac{1}{2}}(x)f_{j+\frac{1}{2}}(x)}{f_j(x + i/2)f_j(x - i/2)} \left[\text{Id} + \frac{t^{(j-1)}(x)t^{(j)}(x)}{f_{j-\frac{1}{2}}(x)} \right] \left[\text{Id} + \frac{t^{(j)}(x)t^{(j+1)}(x)}{f_{j+\frac{1}{2}}(x)} \right], \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde fizemos uso do sistema T . Logo[45]

$$y^{(j)}(x - i/2)y^{(j)}(x + i/2) = Y^{(j-\frac{1}{2})}(x)Y^{(j+\frac{1}{2})}(x), \quad (3.26)$$

que é o chamado sistema Y . Note que por conta do sistema T , temos

$$Y^{(j)}(x) = \frac{t^{(j)}(x + i/2)t^{(j)}(x - i/2)}{f_j(x)}. \quad (3.27)$$

3.2 Propriedades de Analiticidade e Equações Integrais Não Lineares

A comutatividade entre as matrizes $t^{(s,j)}(x)$ para os diversos valores de j , mas com s fixo, implica que as relações funcionais da hierarquia de fusão, do sistema T e do sistema Y podem ser traduzidas para os auto-valores dos operadores envolvidos. Em particular o ansatz de Bethe apresentado no Apêndice A permite obter o auto-valor de $t^{(s,\frac{1}{2})}(x)$, que denotaremos $\Lambda^{(s,\frac{1}{2})}(x)$. A partir deste auto-valor, a hierarquia de fusão nos permite encontrar $\Lambda^{(s,j)}(x)$, auto-valor de $t^{(s,j)}(x)$, cuja expressão é dada por

$$\begin{aligned}\Lambda^{(j)}(x) &= \sum_{m=1}^{2j+1} \lambda_m^{(j)}(x), \quad j = \frac{1}{2}, \dots, s, \\ \lambda_m^{(j)}(x) &= e^{\beta \mathfrak{h}(j+1-m)} P_m^{(j)}(x) R_m^{(j)}(x), \\ P_m^{(j)}(x) &= \left[\prod_{r=1}^{m-1} \frac{\Phi_+(x + is - ij + ir - i)}{\Phi_+(x - is - ij + ir - i)} \right] \left[\prod_{r=m}^{2j} \frac{\Phi_-(x - is - ij + ir)}{\Phi_-(x + is - ij + ir)} \right], \\ R_m^{(j)}(x) &= \frac{Q(x - i(j + \frac{1}{2}))Q(x + i(j + \frac{1}{2}))}{Q(x - i(j + \frac{1}{2}) + i(m-1))Q(x - i(j + \frac{1}{2}) + im)},\end{aligned}\tag{3.28}$$

onde estamos omitindo o índice s por simplicidade e as funções $\Phi_{\pm}(x)$ e $Q(x)$ são como na seção 2.2. Os x_j 's em $Q(x)$ devem satisfazer as equações de Bethe na forma

$$e^{\beta \mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x_l + \frac{i}{2} - is)\Phi_+(x_l - \frac{i}{2} - is)}{\Phi_-(x_l + \frac{i}{2} + is)\Phi_+(x_l - \frac{i}{2} + is)} = -\frac{Q(x_l - i)}{Q(x_l + i)}.\tag{3.29}$$

As equações de Bethe são condições para que cada um dos auto-valores $\Lambda^{(s,j)}(x)$ não possuam singularidades devido às raízes de Bethe, presente nas funções $Q(x)$. Comparando diagonalização direta com ansatz de Bethe, podemos inferir que o setor do maior auto-valor $\Lambda^{(s,s)}(x)$ é $n = sMN$ e as raízes de Bethe associadas serão $2s$ -strings com as partes imaginárias situadas em $(s + \frac{1}{2} - l)$, com $l = 1, \dots, 2s$.

Os diferentes valores dos ω_j 's apenas deformam o padrão horizontalmente. Quanto ao campo magnético, vale a mesma observação do caso $s = \frac{1}{2}$, de modo que para o intervalo $[0, 5]$ os deslocamentos verticais das raízes de Bethe não ultrapassam $\frac{1}{2}$. Os zeros de $\Lambda^{(s,j)}(x)$ possuem parte imaginária próxima a $\pm(s + j - l)$, com $l = 0, \dots, 2j - 1$. As singularidades de $\Lambda^{(s,j)}(x)$, que não foram canceladas em função das equações de Bethe, podem ser facilmente obtidas das equações (3.28). A partir destas podemos ver que $\Lambda^{(s,j)}(x)$ é analítica numa faixa que contém o conjunto $|\text{Im}[z]| \leq \frac{1}{2} + s - j$. Logo $\Lambda^{(s,j)}(x)$ é analítica e não nula na mesma faixa.

Devemos agora introduzir funções auxiliares que não possuem zeros ou pólos sobre o eixo real e que produzam equações na forma de produto. Sendo assim, poderemos tomar a

transformada de Fourier da derivada logarítmica e usar implicitamente os vínculos devido às equações de Bethe. Com analogia a [25], estas funções auxiliares são dadas por

$$y^{(j)}(x) = \frac{\Lambda^{(j-\frac{1}{2})}(x)\Lambda^{(j+\frac{1}{2})}(x)}{f_j(x)}, \quad Y^{(j)}(x) = 1 + y^{(j)}(x), \quad j = \frac{1}{2}, \dots, s - \frac{1}{2}, \quad (3.30)$$

$$\mathfrak{b}(x) = \sum_{m=1}^{2s} \frac{\lambda_m^{(s)}(x + \frac{i}{2})}{\lambda_{2s+1}^{(s)}(x + \frac{i}{2})}, \quad \mathfrak{B}(x) = 1 + \mathfrak{b}(x), \quad (3.31)$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(x) = \sum_{m=2}^{2s+1} \frac{\lambda_m^{(s)}(x - \frac{i}{2})}{\lambda_1^{(s)}(x - \frac{i}{2})}, \quad \bar{\mathfrak{B}}(x) = 1 + \bar{\mathfrak{b}}(x), \quad (3.32)$$

como consequência das propriedades de analiticidade dos auto-valores, podemos, de fato, tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica de cada uma destas funções. Em particular cada $y^{(j)}(x)$ é analítica numa faixa que contém o conjunto $|\text{Im}[z]| \leq \frac{1}{2}$. Ao invés de trabalhar diretamente com estas equações, é preferível trabalhar com o seguinte conjunto

$$y^{(j)}(x+i/2)y^{(j)}(x-i/2) = Y^{(j-\frac{1}{2})}(x)Y^{(j+\frac{1}{2})}(x), \quad j = \frac{1}{2}, 1, \dots, s - \frac{1}{2}, \quad (3.33)$$

$$Y^{(j)}(x) = \frac{\Lambda^{(j)}(x-i/2)\Lambda^{(j)}(x+i/2)}{f_j(x)}, \quad j = \frac{1}{2}, 1, \dots, s - \frac{1}{2}, \quad (3.34)$$

$$\mathfrak{b}(x) = e^{\beta \frac{\hbar}{2}} \frac{\Phi_-(x+i/2)Q(x+i(s+1))\Lambda^{(s-\frac{1}{2})}(x)}{\Phi_-(x+i(2s+1/2))Q(x+is)\lambda_{2s+1}^{(s)}(x+i/2)}, \quad (3.35)$$

$$\mathfrak{B}(x) = \frac{\Lambda^{(s)}(x+i/2)}{\lambda_{2s+1}^{(s)}(x+i/2)}, \quad (3.36)$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(x) = e^{-\beta \frac{\hbar}{2}} \frac{\Phi_+(x-i/2)Q(x-i(s+1))\Lambda^{(s-\frac{1}{2})}(x)}{\Phi_+(x-i(2s+1/2))Q(x-is)\lambda_1^{(s)}(x-i/2)}, \quad (3.37)$$

$$\bar{\mathfrak{B}}(x) = \frac{\Lambda^{(s)}(x-i/2)}{\lambda_1^{(s)}(x-i/2)}, \quad (3.38)$$

enquanto as equações (3.33) e (3.34) são consequências naturais dos sistemas T e Y , as equações (3.35) e (3.37) são obtidas observando as seguintes relações funcionais das funções R e P em (3.28):

$$\begin{aligned} P_m^{(s)}(x+i/2) &= \frac{\Phi_-(x+i/2)}{\Phi_-(x+i(2s+1/2))} P_m^{(s-\frac{1}{2})}(x), & P_{m+1}^{(s)}(x-i/2) &= \frac{\Phi_+(x-i/2)}{\Phi_+(x-i(2s+1/2))} P_m^{(s-\frac{1}{2})}(x), \\ R_m^{(s)}(x+i/2) &= \frac{Q(x+i(s+1))}{Q(x+is)} R_m^{(s-\frac{1}{2})}(x), & R_{m+1}^{(s)}(x-i/2) &= \frac{Q(x-i(s+1))}{Q(x-is)} R_m^{(s-\frac{1}{2})}(x), \end{aligned} \quad (3.39)$$

com $m = 1, 2, \dots, 2s$. Um fato notável é que, por conta do sistema T , podemos mostrar que $Y^{(s)}(x) = \mathfrak{B}(x)\bar{\mathfrak{B}}(x)$, de modo que as funções auxiliares \mathfrak{b} 's fornecem o truncamento exato do sistema Y .

Tomando a transformada de Fourier da derivada logarítmica das funções auxiliares, obtemos um sistema algébrico de equações que pode ser resolvido para $\hat{Q}(k)$, $\hat{\Lambda}^{(j)}(k)$, $\hat{y}^{(j)}(k)$, $\hat{\mathbf{b}}(k)$ e $\hat{\bar{\mathbf{b}}}(k)$. Como não estamos interessados diretamente em $\hat{Q}(k)$ e $\hat{\Lambda}^{(j)}(k)$ para $j \neq s$, omitimos estas expressões. Obtemos

$$\begin{pmatrix} \hat{y}^{(\frac{1}{2})}(k) \\ \vdots \\ \hat{y}^{(s-\frac{1}{2})}(k) \\ \hat{\mathbf{b}}(k) \\ \hat{\bar{\mathbf{b}}}(k) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hat{d}(k) \\ \hat{d}(k) \end{pmatrix} + \hat{\mathcal{K}}(k) \begin{pmatrix} \hat{Y}^{(\frac{1}{2})}(k) \\ \vdots \\ \hat{Y}^{(s-\frac{1}{2})}(k) \\ \hat{\mathfrak{B}}(k) \\ \hat{\bar{\mathfrak{B}}}(k) \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

$$\hat{\Lambda}^{(s)}(k) = \left[\sum_{m=0}^{2s-1} \frac{e^{-m|k|}}{1+e^{|k|}} \right] \left[\sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j} \right] iN \sinh(k\tau) + \hat{K}(k)(\hat{\mathfrak{B}}(k) + \hat{\bar{\mathfrak{B}}}(k)), \quad (3.41)$$

sendo o “kernel” $\hat{\mathcal{K}}(k)$ uma matriz $(2s+1) \times (2s+1)$ dada por

$$\hat{\mathcal{K}}(k) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{K}(k) & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{K}(k) & 0 & \hat{K}(k) & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \hat{K}(k) & 0 & & & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & 0 & \hat{K}(k) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \hat{K}(k) & 0 & \hat{K}(k) & \hat{K}(k) \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \hat{K}(k) & \hat{F}(k) & -e^{-k}\hat{F}(k) \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \hat{K}(k) & -e^k\hat{F}(k) & \hat{F}(k) \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

com $\hat{K}(k) = \frac{1}{2 \cosh[k/2]}$, $\hat{F}(k) = \frac{e^{-|k|/2}}{2 \cosh[k/2]}$, e $\hat{d}(k) = -iN \frac{\sinh(\tau k)}{2 \cosh(k/2)} \left(\sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j} \right)$. Observamos que $\hat{d}(k)$ é o mesmo do caso $\text{spin-}\frac{1}{2}$. Tomando o limite no número de Trotter, temos

$$\hat{d}(k) = -\frac{i \sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j}}{2 \cosh[k/2]} \lim_{N \rightarrow \infty} N \sinh(\tau k) = -\frac{\beta i k \sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j}}{M 2 \cosh[k/2]}. \quad (3.43)$$

$$\left[\sum_{m=0}^{2s-1} \frac{e^{-m|k|}}{1+e^{|k|}} \right] \left[\sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j} \right] i \lim_{N \rightarrow \infty} N \sinh(\tau k) = \left[\sum_{m=0}^{2s-1} \frac{e^{-m|k|}}{1+e^{|k|}} \right] \left[\sum_{j=1}^M \frac{e^{ik\omega_j}}{M} \right] ik\beta. \quad (3.44)$$

Tomando a transformada inversa em (3.40), integrando em x e obtendo as constantes de integração via comportamento assintótico $x \rightarrow \infty$, segue

$$\begin{pmatrix} \ln y^{(\frac{1}{2})}(x) \\ \vdots \\ \ln y^{(s-\frac{1}{2})}(x) \\ \ln \mathbf{b}(x) \\ \ln \bar{\mathbf{b}}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -\beta d(x) + \beta \frac{\mathfrak{h}}{2} \\ -\beta d(x) - \beta \frac{\mathfrak{h}}{2} \end{pmatrix} + \mathcal{K} * \begin{pmatrix} \ln Y^{(\frac{1}{2})}(x) \\ \vdots \\ \ln Y^{(s-\frac{1}{2})}(x) \\ \ln \mathfrak{B}(x) \\ \ln \bar{\mathfrak{B}}(x) \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

sendo $d(x) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{\pi}{\cosh(\pi(x+\omega_j))}$ e a matriz do kernel dada por

$$\mathcal{K}(x) = \begin{pmatrix} 0 & K(x) & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K(x) & 0 & K(x) & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & K(x) & 0 & & & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & 0 & K(x) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & K(x) & 0 & K(x) & K(x) \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & K(x) & F(x) & -F(x+i) \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & K(x) & -F(x-i) & F(x) \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

sendo $K(x) = \frac{\pi}{\cosh[\pi x]}$ e $F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-|k|/2+ikx}}{2 \cosh[k/2]} dk$.

Por (2.33) e (3.41) obtemos, finalmente, a energia-livre

$$f = e_0 - \frac{1}{M\beta} \sum_{j=1}^M (K * \ln \mathfrak{B}\bar{\mathfrak{B}})(-\omega_j), \quad (3.47)$$

sendo e_0 a energia do estado fundamental com $\mathfrak{h} = 0$ dada por

$$e_0 = - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{m=0}^{2s-1} \frac{e^{-m|k|}}{1 + e^{|k|}} \right] \left| \frac{\sum_{j=1}^M e^{ik\omega_j}}{M} \right|^2 dk.$$

Capítulo 4

Anisotropia Uniaxial Spin- $\frac{1}{2}$

Neste capítulo obtemos equações integrais não lineares para descrever propriedades termodinâmicas de generalizações do modelo XXZ por meio da introdução de parâmetros de heterogeneidade na matriz de transferência linha-a-linha. A seção 4.1 é destinada ao caso $0 \leq \Delta < 1$, enquanto na seção 4.2 abordamos o caso $\Delta > 1$. A ênfase será dada na diferença destes casos em relação ao caso isotrópico e, quando nada mencionado, subentende-se equivalência entre os casos.

4.1 $0 \leq \Delta = \cos(\gamma) < 1$

Para obter o Hamiltoniano (1.45) é necessário transformar o parâmetro espectral $\lambda \rightarrow \lambda \sin(\gamma)$ na matriz \mathcal{L} dada em (1.30). Esta transformação é conveniente pois recupera o limite $\gamma \rightarrow 0$, (1.44), naturalmente. Tendo isto em mente, vamos definir $\tilde{\lambda} = \lambda \sin(\gamma)$ e $\tilde{\omega}_j = \omega_j \sin(\gamma)$. Em função desta transformação, existe uma ligeira modificação na decomposição de Trotter-Suzuki bem como na matriz de transferência quântica. A matriz de transferência linha-a-linha fica

$$t(\lambda) = \prod_{j=1}^M T_j(\tilde{\lambda}), \quad T_j(\tilde{\lambda}) = T(\tilde{\lambda} + i\tilde{\omega}_j), \quad (4.1)$$

$$T(\tilde{\lambda}) = \text{Tr}_A \left[\prod_{i=1}^{\hat{L}} \left[\prod_{k=1}^{\hat{M}} \mathcal{L}_{A,(i-1)M+k}(\tilde{\lambda}, i\tilde{\omega}_{M+1-k}) \right] \right], \quad (4.2)$$

onde observa-se que a modificação em relação ao caso $\Delta = 1$ se dá pela simples troca $\lambda \rightarrow \tilde{\lambda}$ e $\omega_j \rightarrow \tilde{\omega}_j$. Do mesmo modo podemos obter a matriz $\bar{t}(\lambda)$. Logo

$$[t(-\tau)\bar{t}(-\tau)]^{\frac{N}{2}} = e^{-\beta\mathcal{H}(\gamma,\vec{\omega})+\mathcal{O}(\frac{1}{N})}, \quad (4.3)$$

sendo $\tau = \frac{\beta}{MN}$. Ainda, como neste caso temos também $[R_{AB}(\lambda, \mu), S_A^z + S_B^z] = 0$, podemos incluir a interação com o campo magnético externo no eixo z . Logo estaremos interessados em obter a quantidade

$$Z_{NL} = \text{Tr} \left[e^{\beta \mathfrak{h} S^z} [t(-\tau) \bar{t}(-\tau)]^{\frac{N}{2}} \right], \quad (4.4)$$

no limite do número de Trotter N indo a infinito. A quantidade Z_{NL} por sua vez pode ser vista como uma função de partição de um modelo de vértices específico. Sendo assim, podemos definir a matriz de transferência quântica por

$$t^{QTM}(rx) = \text{Tr}_Q \left[e^{\beta \mathfrak{h} S_Q^z} \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{M(2i-2)+j, Q}(-\tilde{\tau} + i\tilde{\omega}_j, -ix) \right] \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{Q, M(2i-1)+j}^t(-ix, \tilde{\tau} + i\tilde{\omega}_j) \right] \right], \quad (4.5)$$

assumindo ainda que os limites termodinâmico e do número de Trotter podem ser efetuados em qualquer ordem, então a energia-livre será dada por

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta} \sum_{j=1}^M \frac{\ln \Lambda_{\max}(-r\tilde{\omega}_j)}{M}, \quad (4.6)$$

sendo $\tilde{\tau} = \tau \sin(\gamma)$ e r uma constante que podemos escolher arbitrariamente. A escolha $r = \frac{1}{\gamma}$ simplifica a solução das equações de Bethe, bem como o padrão de raízes associado ao maior auto-valor. Definindo $\bar{\tau} = \frac{\tilde{\tau}}{\gamma} = \tau \frac{\sin(\gamma)}{\gamma}$ e $\bar{\omega}_j = \frac{\tilde{\omega}_j}{\gamma} = \omega_j \frac{\sin(\gamma)}{\gamma}$, o ansatz de Bethe fornece

$$\Lambda_n^{QTM}(x) = e^{\frac{\beta \mathfrak{h}}{2}} \underbrace{\frac{\Phi_-(x)}{\Phi_-(x+i)} \frac{Q(x+i)}{Q(x)}}_{\lambda_1(x)} + e^{-\frac{\beta \mathfrak{h}}{2}} \underbrace{\frac{\Phi_+(x)}{\Phi_+(x-i)} \frac{Q(x-i)}{Q(x)}}_{\lambda_2(x)}, \quad (4.7)$$

e as equações de Bethe ficam

$$e^{\beta \mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x_k) \Phi_+(x_k - i)}{\Phi_-(x_k + i) \Phi_+(x_k)} = -\frac{Q(x_k - i)}{Q(x_k + i)}, \quad (4.8)$$

onde definimos as funções

$$\Phi_{\pm}(x) = \left[\prod_{j=1}^M \sinh \gamma(x + \bar{\omega}_j \pm i\bar{\tau}) \right]^{\frac{N}{2}}, \quad Q(x) = \prod_{j=1}^n \sinh \gamma(x - x_j). \quad (4.9)$$

O padrão de raízes associado ao maior auto-valor permanece o mesmo do caso $\Delta = 1$: as raízes se encontram sobre o eixo real (quando $\mathfrak{h} = 0$) formando, aproximadamente, M centros de simetria. As deformações deste padrão advindas da presença de campo não contribuem com deslocamento vertical maior que $\frac{1}{2}$. Da mesma forma o maior auto-valor

$\Lambda(x)$ possui as mesmas propriedades de analiticidade, sendo analítico e não nulo em uma região que contém a faixa $|\text{Im}[z]| \leq \frac{1}{2}$. Logo temos uma semelhança formal das funções auxiliares neste caso em relação ao caso isotrópico:

$$\mathfrak{b}(x) := \frac{\lambda_1(x + i/2)}{\lambda_2(x + i/2)} = e^{\beta\mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x + i/2)\Phi_+(x - i/2)Q(x + 3i/2)}{\Phi_-(x + 3i/2)\Phi_+(x + i/2)Q(x - i/2)}, \quad (4.10)$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(x) := \frac{\lambda_2(x - i/2)}{\lambda_1(x - i/2)} = e^{-\beta\mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x + i/2)\Phi_+(x - i/2)Q(x - 3i/2)}{\Phi_-(x - i/2)\Phi_+(x - 3i/2)Q(x + i/2)}, \quad (4.11)$$

$$\mathfrak{B}(x) := 1 + \mathfrak{b}(x) = \frac{\Lambda(x + i/2)}{\lambda_2(x + i/2)} = e^{\beta\frac{\mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_+(x - i/2)Q(x + i/2)\Lambda(x + i/2)}{\Phi_+(x + i/2)Q(x - i/2)}, \quad (4.12)$$

$$\bar{\mathfrak{B}}(x) := 1 + \bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{\Lambda(x - i/2)}{\lambda_1(x - i/2)} = e^{-\beta\frac{\mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_-(x + i/2)Q(x - i/2)\Lambda(x - i/2)}{\Phi_-(x - i/2)Q(x + i/2)}. \quad (4.13)$$

Procedendo na obtenção das equações integrais, devemos tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica destas funções auxiliares. Encontraremos integrais do tipo

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ikx}}{2\pi} \frac{d}{dx} \ln \sinh(\gamma(x + z_0)) dx = i \frac{e^{ikz_0^s}}{1 - e^{-\frac{k\pi}{\gamma}}}, \quad (4.14)$$

sendo $\gamma z_0^s = \gamma z_0 + im\pi$ com m um número inteiro tal que $0 \leq \text{Im}[\gamma z_0^s] \leq \pi$.

Assumindo $\gamma \leq \frac{\pi}{2}$, obtemos

$$\begin{aligned} \hat{\mathfrak{b}}(k) &= \hat{d}(k) + \hat{F}(k) \left(\hat{\mathfrak{B}}(k) - e^{-k} \hat{\mathfrak{B}}(k) \right), \\ \hat{\bar{\mathfrak{b}}}(k) &= \hat{d}(k) + \hat{F}(k) \left(-e^k \hat{\mathfrak{B}}(k) + \hat{\mathfrak{B}}(k) \right), \end{aligned} \quad (4.15)$$

e a transformada da derivada logarítmica do auto-valor fica

$$\hat{\Lambda}(k) = i \frac{N}{2} \sinh(k\bar{\tau}) \left(\sum_{j=1}^M e^{ik\bar{\omega}_j} \right) \frac{\sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma} - \frac{k}{2}\right)}{\cosh\left(\frac{k}{2}\right) \sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma}\right)} + \hat{K}(k)(\mathfrak{B}(k) + \bar{\mathfrak{B}}(k)). \quad (4.16)$$

sendo

$$\begin{aligned} \hat{d}(k) &= -i \frac{\sum_{j=1}^M e^{ik\bar{\omega}_j}}{2 \cosh(k/2)} N \sinh(k\bar{\tau}), \\ \hat{F}(k) &= \frac{\sinh\left(k - \frac{k\pi}{2\gamma}\right)}{2 \cosh\left(\frac{k}{2}\right) \sinh\left(\frac{k}{2} - \frac{k\pi}{2\gamma}\right)}, \\ \hat{K}(k) &= \frac{1}{2 \cosh(k/2)}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Tomando o limite no número de Trotter, obtemos

$$\hat{d}(k) = -\frac{i \sum_{j=1}^M e^{ik\bar{\omega}_j}}{2 \cosh(k/2)} \lim_{N \rightarrow \infty} N \sinh(\bar{\tau}k) = -ik\beta \frac{\sin(\gamma)}{\gamma} \frac{\frac{1}{M} \sum_{j=1}^M e^{ik\bar{\omega}_j}}{2 \cosh(k/2)}, \quad (4.18)$$

$$i \left(\sum_{j=1}^M e^{ik\bar{\omega}_j} \right) \frac{\sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma} - \frac{k}{2}\right)}{2 \cosh\left(\frac{k}{2}\right) \sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma}\right)} \lim_{N \rightarrow \infty} N \sinh(\bar{\tau}k) = ik\beta \frac{\sin(\gamma)}{\gamma} \frac{\sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma} - \frac{k}{2}\right) \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M e^{ik\bar{\omega}_j}}{2 \cosh\left(\frac{k}{2}\right) \sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma}\right)}. \quad (4.19)$$

Tomando a transformada inversa em (4.15), integrando em x e obtendo as constantes de integração via comportamento assintótico $x \rightarrow \infty$, segue

$$\ln \mathfrak{b}(x) = \beta(-d(x) - \frac{\mathfrak{h}\pi}{\gamma - \pi}) + F * (\ln \mathfrak{B}(x) - \ln \bar{\mathfrak{B}}(x + i)), \quad (4.20)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = \beta(-d(x) + \frac{\mathfrak{h}\pi}{\gamma - \pi}) + F * (-\ln \mathfrak{B}(x - i) + \ln \bar{\mathfrak{B}}(x)), \quad (4.21)$$

sendo

$$d(x) = \frac{\sin(\gamma)}{\gamma} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \frac{\pi}{\cosh(\pi(x + \bar{\omega}_j))}, \quad (4.22)$$

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma} - k\right)}{2 \cosh\left(\frac{k}{2}\right) \sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma} - \frac{k}{2}\right)} e^{ikx} dk. \quad (4.23)$$

Uma vez resolvido o sistema de equações integrais, podemos obter a energia livre por

$$f = e_0 - \frac{1}{M\beta} \sum_{j=1}^M K * (\ln \mathfrak{B}\bar{\mathfrak{B}})(-\bar{\omega}_j), \quad (4.24)$$

sendo $K(x) = \frac{\pi}{\cosh(\pi x)}$ e e_0 a energia do estado fundamental por sítio com $\mathfrak{h} = 0$:

$$e_0 = -\frac{\sin(\gamma)}{\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \sum_{j=1}^M \frac{e^{ik\bar{\omega}_j}}{M} \right|^2 \frac{\sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma} - \frac{k}{2}\right)}{2 \cosh\left(\frac{k}{2}\right) \sinh\left(\frac{k\pi}{2\gamma}\right)} dk. \quad (4.25)$$

4.2 $\Delta = \cosh(\gamma) > 1$

Neste caso definimos $\tilde{\lambda} = \lambda \sinh(\gamma)$ e $\tilde{\omega}_j = \omega_j \sinh(\gamma)$ e utilizamos a parametrização (1.31). Em analogia ao caso anterior, a matriz de transferência quântica fica

$$t^{QTM}(rx) = \text{Tr}_Q \left[e^{\beta \mathfrak{h} S_Q^z} \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{M(2i-2)+j, Q}(-\tilde{\tau} + i\tilde{\omega}_j, -ix) \right] \left[\prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{Q, M(2i-1)+j}^t(-ix, \tilde{\tau} + i\tilde{\omega}_j) \right] \right], \quad (4.26)$$

assumindo ainda que os limites termodinâmico e do número de Trotter podem ser efetuados em qualquer ordem, então a energia-livre será dada por

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta} \sum_{j=1}^M \frac{\ln \Lambda_{\max}(-\bar{\omega}_j)}{M}, \quad (4.27)$$

sendo $r = \frac{1}{\gamma}$, $\bar{\tau} = \frac{\tilde{\tau}}{\gamma} = \tau \frac{\sinh(\gamma)}{\gamma}$, e $\bar{\omega}_j = \frac{\tilde{\omega}_j}{\gamma} = \omega_j \frac{\sinh(\gamma)}{\gamma}$. O ansatz de Bethe fornece

$$\Lambda_n^{QTM}(x) = \underbrace{e^{\frac{\beta \mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_-(x)}{\Phi_-(x+i)} \frac{Q(x+i)}{Q(x)}}_{\lambda_1(x)} + \underbrace{e^{-\frac{\beta \mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_+(x)}{\Phi_+(x-i)} \frac{Q(x-i)}{Q(x)}}_{\lambda_2(x)}, \quad (4.28)$$

com as equações de Bethe sendo dadas por

$$e^{\beta\mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x_x)\Phi_+(x_k - i)}{\Phi_-(x_k + i)\Phi_+(x_k)} = -\frac{Q(x_k - i)}{Q(x_k + i)}, \quad (4.29)$$

onde definimos as funções

$$\Phi_{\pm}(x) = \left[\prod_{j=1}^M \sin \gamma(x + \bar{\omega}_j \pm i\bar{\tau}) \right]^{\frac{N}{2}}, \quad Q(x) = \prod_{j=1}^n \sin \gamma(x - x_j). \quad (4.30)$$

As raízes de Bethe associadas ao maior auto-valor continuam sobre o eixo real quando $\mathfrak{h} = 0$. O maior auto-valor continua sendo analítico e não nulo numa região do plano complexo que contém a faixa $|\text{Im}[z]| \leq \frac{1}{2}$. Entretanto existe uma particularidade notável que distingue este caso dos demais. O maior auto-valor neste caso é uma função periódica de período $\frac{\pi}{\gamma}$. Além disso, as raízes de Bethe também possuem esta periodicidade, de modo que obtemos o mesmo auto-valor se trasladarmos as raízes de Bethe por um múltiplo inteiro de $\frac{\pi}{\gamma}$. As funções auxiliares mantêm a semelhança formal:

$$\mathfrak{b}(x) := \frac{\lambda_1(x + i/2)}{\lambda_2(x + i/2)} = e^{\beta\mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x + i/2)\Phi_+(x - i/2)Q(x + 3i/2)}{\Phi_-(x + 3i/2)\Phi_+(x + i/2)Q(x - i/2)}, \quad (4.31)$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(x) := \frac{\lambda_2(x - i/2)}{\lambda_1(x - i/2)} = e^{-\beta\mathfrak{h}} \frac{\Phi_-(x + i/2)\Phi_+(x - i/2)Q(x - 3i/2)}{\Phi_-(x - i/2)\Phi_+(x - 3i/2)Q(x + i/2)}, \quad (4.32)$$

$$\mathfrak{B}(x) := 1 + \mathfrak{b}(x) = \frac{\Lambda(x + i/2)}{\lambda_2(x + i/2)} = e^{\beta\frac{\mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_+(x - i/2)Q(x + i/2)\Lambda(x + i/2)}{\Phi_+(x + i/2)Q(x - i/2)}, \quad (4.33)$$

$$\bar{\mathfrak{B}}(x) := 1 + \bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{\Lambda(x - i/2)}{\lambda_1(x - i/2)} = e^{-\beta\frac{\mathfrak{h}}{2}} \frac{\Phi_-(x + i/2)Q(x - i/2)\Lambda(x - i/2)}{\Phi_-(x - i/2)Q(x + i/2)}, \quad (4.34)$$

e possuem também a periodicidade acima citada. Desta forma, ao invés de prosseguir tomando a transformada de Fourier, faremos uso da expansão em série de Fourier da derivada logarítmica. Seja m um número inteiro, encontraremos integrais do tipo

$$I = \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2\gamma}}^{\frac{\pi}{2\gamma}} \left(\frac{d}{dx} \ln \sin(\gamma(x + z_0)) \right) e^{-i2m\gamma x} dx, \quad (4.35)$$

cujo resultado pode ser obtido trivialmente fazendo a mudança de variável $z = e^{i2\gamma x}$ e aplicando o teorema dos resíduos no círculo com centro na origem do plano complexo e raio 1. Obtemos

$$\text{se } \text{Im}[\gamma z_0] < 0 \qquad \text{se } \text{Im}[\gamma z_0] > 0 \quad (4.36)$$

$$I = \begin{cases} 2i\gamma e^{2im\gamma z_0} & m < 0 \\ i\gamma & m = 0, \\ 0 & m > 0 \end{cases}, \quad I = \begin{cases} 0 & m < 0 \\ -i\gamma & m = 0. \\ -2i\gamma e^{2im\gamma z_0} & m > 0 \end{cases}. \quad (4.37)$$

Com isto podemos relacionar os coeficientes das séries de Fourier das funções auxiliares

$$\hat{\mathbf{b}}_m = \hat{d}_m + \hat{F}_m \left(\hat{\mathfrak{B}}_m - e^{-2m\gamma} \hat{\mathfrak{B}}_m \right), \quad (4.38)$$

$$\hat{\bar{\mathbf{b}}}_m = \hat{d}_m + \hat{F}_m \left(-e^{2m\gamma} \hat{\mathfrak{B}}_m + \hat{\mathfrak{B}}_m \right), \quad (4.39)$$

sendo

$$\hat{d}_m = -(2im\gamma) \sinh(\gamma) \beta \frac{\frac{1}{M} \sum_{j=1}^M e^{i2m\gamma\bar{\omega}_j}}{\cosh(m\gamma)}, \quad (4.40)$$

$$\hat{F}_m = \frac{e^{-|m|\gamma}}{2 \cosh(m\gamma)}, \quad (4.41)$$

onde já tomamos o limite no número de Trotter. O auto-valor, por sua vez, pode ser obtido a partir das funções auxiliares por

$$\hat{\Lambda} = \hat{S}_m + \frac{1}{2 \cosh(m\gamma)} \left(\hat{\mathfrak{B}}_m + \hat{\bar{\mathfrak{B}}}_m \right), \quad (4.42)$$

sendo

$$\hat{S}_m = (2im\gamma) \sinh(\gamma) \beta \frac{\left(\frac{1}{M} \sum_{j=1}^M e^{i2m\gamma\bar{\omega}_j} \right) e^{-|m|\gamma}}{\cosh(m\gamma)}. \quad (4.43)$$

Desta forma as equações integrais ficam

$$\begin{aligned} \ln \mathbf{b}(x) &= -\beta d(x) + \beta \frac{\mathfrak{h}}{2} + F * \ln \mathfrak{B}(x) - F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x+i), \\ \ln \bar{\mathbf{b}}(x) &= -\beta d(x) - \beta \frac{\mathfrak{h}}{2} - F * \ln \mathfrak{B}(x-i) + F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x), \end{aligned} \quad (4.44)$$

onde $A * B$ denota a convolução $\frac{\gamma}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{2\gamma}}^{\frac{\pi}{2\gamma}} A(-s)B(x-s)ds$ e sendo

$$d(x) = \sinh(\gamma) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\frac{1}{M} \sum_{j=1}^M e^{i2m\gamma\bar{\omega}_j}}{\cosh(m\gamma)} e^{i2m\gamma x}, \quad (4.45)$$

$$F(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-|m|\gamma}}{2 \cosh(m\gamma)} e^{i2m\gamma x}. \quad (4.46)$$

Uma vez resolvido o sistema (4.44), podemos obter a energia livre por

$$f = e_0 - \frac{1}{M\beta} \sum_{j=1}^M \left(K * \ln \mathfrak{B}\bar{\mathfrak{B}}(-\bar{\omega}_j) \right), \quad (4.47)$$

sendo

$$K(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i2m\gamma x}}{2 \cosh(m\gamma)}, \quad (4.48)$$

e e_0 é a energia do estado fundamental por sítio com $\mathfrak{h} = 0$:

$$e_0 = -\sinh(\gamma) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-|m|\gamma}}{\cosh(m\gamma)} \left| \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M e^{i2m\gamma\bar{\omega}_j} \right|^2. \quad (4.49)$$

Capítulo 5

Diagrama de Fases

Neste capítulo final mostramos alguns resultados obtidos a partir da solução numérica das equações integrais dos capítulos precedentes. A apresentação está longe de ser exaustiva, uma vez que existe uma grande variedade de gráficos que podem ser concebidos. O enfoque será dado à identificação de fases quânticas mediante o “esboço” do diagrama de fases a baixa temperatura, mas não nula. Para esta finalidade a quantidade a ser exibida será a entropia. A seção 5.1 compõe-se da apresentação destes diagramas $(\mathfrak{h} \times \theta)$ para alguns valores do número de parâmetros de heterogeneidade M , do spin s e de anisotropia Δ . Na seção (5.1) segue uma breve conclusão.

5.1 Resultados

As equações integrais não lineares são resolvidas, usualmente, por iteração: utilizamos, por exemplo, as equações (3.45) para atualizar as funções $\mathfrak{b}(x)$, $\bar{\mathfrak{b}}(x)$ e $y^{(j)}(x)$ e as funções $\mathfrak{B}(x)$, $\bar{\mathfrak{B}}(x)$ e $Y^{(j)}(x)$ são atualizadas por meio das definições $\mathfrak{B}(x) = 1 + \mathfrak{b}(x)$ e etc.

Para efetuar a atualização das funções $\mathfrak{b}(x)$, $\bar{\mathfrak{b}}(x)$ e $y^{(j)}(x)$, é necessário calcular convoluções que podem apresentar translações complexas. Podemos lidar facilmente com as translações no espaço de Fourier, pois estas são transformadas em fatores multiplicativos. Logo as convoluções são calculadas com auxílio do teorema da convolução e utilizando o algoritmo da Transformada Rápida de Fourier (FFT), tanto para efetuar transformadas de Fourier ($0 \leq \Delta \leq 1$), como para calcular os coeficientes da expansão em série de Fourier ($\Delta > 1$).

Uma vez obtida a energia livre, poderíamos, a princípio, obter as derivadas deste potencial termodinâmico por meio de derivadas numéricas. Entretanto este procedimento implica em um erro que depende da discretização do campo e da temperatura, necessitando uma malha de pontos muito refinada para conseguir resultados da mesma precisão

da energia livre. Podemos evitar a derivação numérica obtendo equações integrais para as próprias derivadas. Isto é feito derivando as equações integrais e obtendo novos vínculos a partir da definição $\mathfrak{B}(x) = 1 + \mathfrak{b}(x)$. Estes vínculos são

$$\partial_\alpha \ln A(x) = \frac{a(x)}{A(x)} \partial_\alpha \ln a(x), \quad \partial_\alpha^2 \ln A(x) = \frac{a(x)}{A(x)} \left[\frac{(\partial_\alpha \ln a(x))^2}{A(x)} + \partial_\alpha^2 \ln a(x) \right], \quad (5.1)$$

sendo $a(x) = \mathfrak{b}(x), \bar{\mathfrak{b}}(x), y^{(j)}(x)$, e α um parâmetro que pode ser a temperatura ou campo externo. Nos restringimos aqui até a derivada de segunda ordem, o que permite calcular quantidades como entropia, magnetização, calor específico e suscetibilidade magnética. Podemos notar que as derivadas de ordem inferior das funções auxiliares aparecem como coeficientes conhecidos na obtenção das derivadas de ordem superior. Desta forma podemos obter sequencialmente as derivadas da energia-livre.

Para o caso $M = 2$ e $\Delta = 1$, consideramos os seguintes valores de spin $s = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$. O estudo da entropia e da magnetização como função do campo e do parâmetro de heterogeneidade $\theta = \omega_2 - \omega_1$, a baixa temperatura, nos permite identificar três fases diferentes, Figura 5.1. Existe uma fase ferromagnética com excitações massivas onde a entropia se

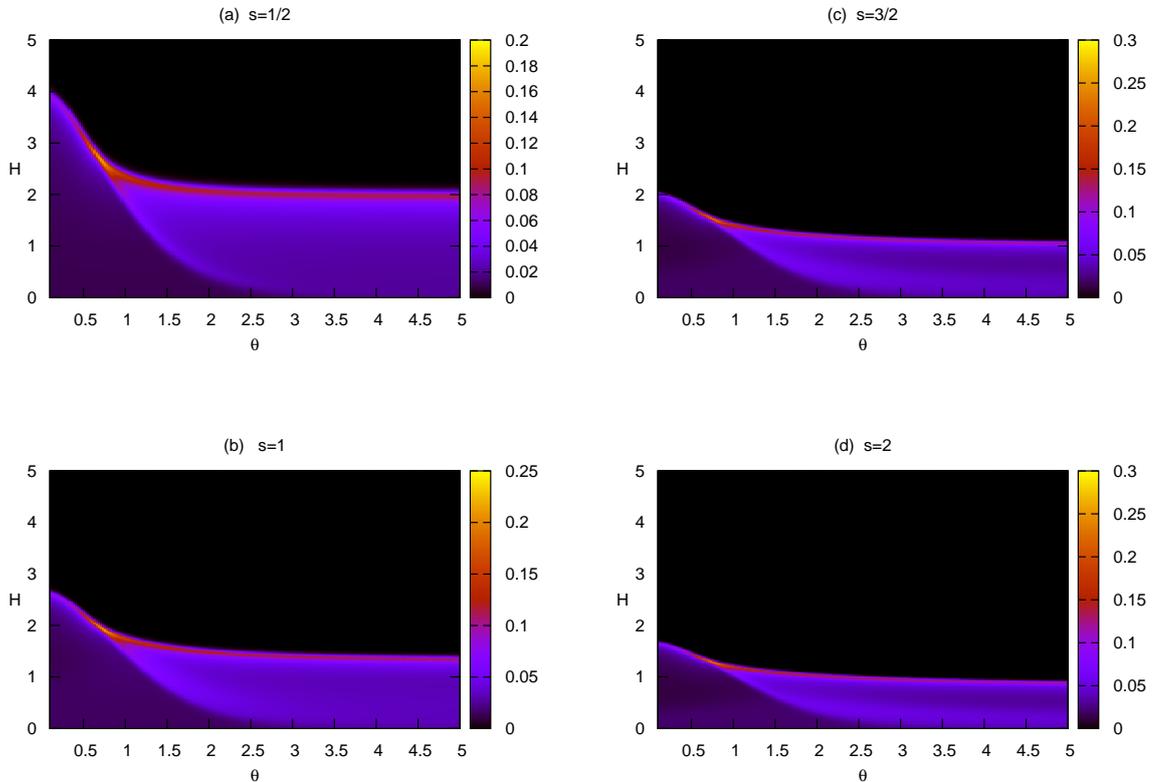


Figura 5.1: Entropia $S(\mathfrak{h}, \theta)$ para $T = 0.03$, spin $s = 1/2, 1, 3/2, 2$ e $M = 2$.

anula, e duas outras fases com excitações não massivas: uma comensurável para pequenos valores de θ e outra incomensurável para grandes valores de θ . A existência de tais excitações massivas podem ser identificadas a partir do comportamento exponencial com que o calor específico vai a zero a baixas temperaturas, Figura 5.2.

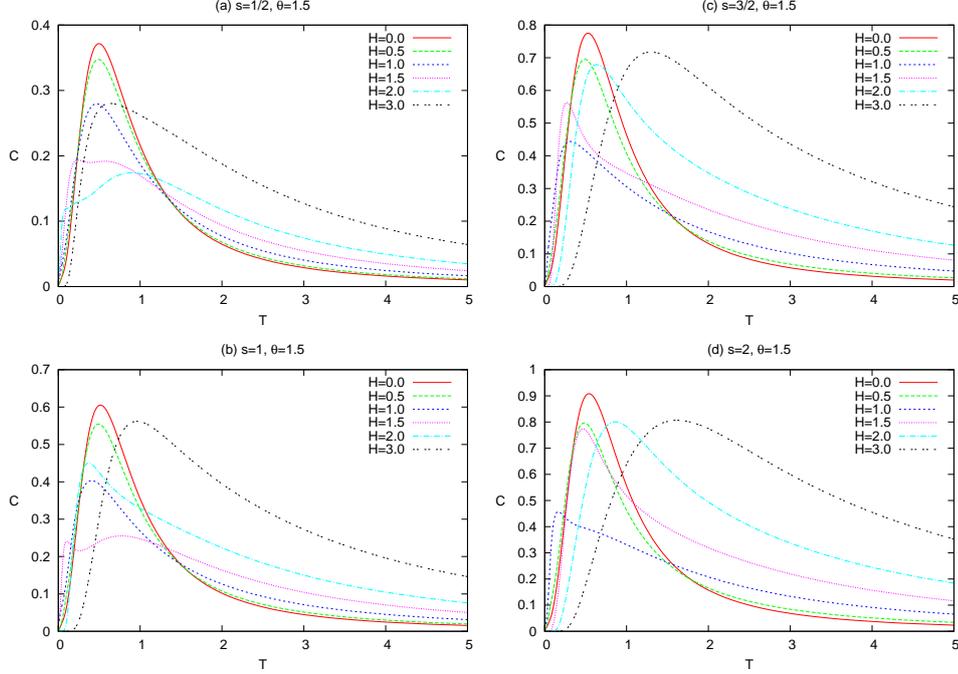


Figura 5.2: Calor específico como função da temperatura para $M = 2$, $\theta = 1.5$, $\mathfrak{h} = 0, 0.5, 1, 1.5, 2, 3$ e spin $s = 1/2, 1, 3/2, 2$.

A presença destas diferentes fases está de acordo com resultados anteriores obtidos a partir do diagrama de fases para o estado fundamental no caso de spin $\frac{1}{2}$ [26, 31, 32, 33]. Foi mostrado que a relação de dispersão ao longo da transição entre as duas fases não massivas é quadrática. Além disso, existe um ponto tricrítico com relação de dispersão quártica, o que pode ser visto na Figura 5.1. Nos limites $\theta \rightarrow 0$ e $\theta \rightarrow \infty$ temos, respectivamente, uma única cadeia de $2L$ sítios e duas cadeias de L sítios. Se no limite $\theta \rightarrow 0$ a energia livre é dada por $f^*(\beta, \mathfrak{h})$, podemos mostrar que no limite $\theta \rightarrow \infty$ ela será dada por $f^*(\beta/2, 2\mathfrak{h})$. Logo o campo para o qual ocorre a transição para o regime ferromagnético quando $\theta \rightarrow \infty$ será metade daquele com $\theta \rightarrow 0$.

Estudamos também o caso $M > 2$ e $s = \frac{1}{2}$, veja o Hamiltoniano (1.53). Por simplicidade escolhemos estudar o caso em que todos parâmetros de heterogeneidade são nulos, exceto um, isto é, $\omega_i = 0$ para $i = 1, \dots, M - 1$ e $\omega_M = \theta$; usamos $M = 3, 4$. Isto nos remete ao caso de duas cadeias acopladas, uma de L sítios e outra de $(M - 1)L$ sítios. Estas cadeias têm diferentes constantes de acoplamento intra-cadeias, o que explica a superposi-

ção de fases e a existência de pontos tricríticos, como mostrado na Figura 5.3. Novamente, nos limites $\theta \rightarrow 0$ e $\theta \rightarrow \infty$ temos, respectivamente, uma única cadeia de ML sítios e duas cadeias não interagentes de diferentes comprimentos, uma de L sítios e outra de $(M-1)L$ sítios. Podemos mostrar que, se em $\theta = 0$ a energia livre é dada por $f^*(\beta, \mathfrak{h})$, então no limite $\theta \rightarrow \infty$ a energia livre será dada por $\frac{M-1}{M} f^*\left(\frac{M-1}{M}\beta, \frac{M}{M-1}\mathfrak{h}\right) + \frac{1}{M} f^*\left(\frac{\beta}{M}, M\mathfrak{h}\right)$.

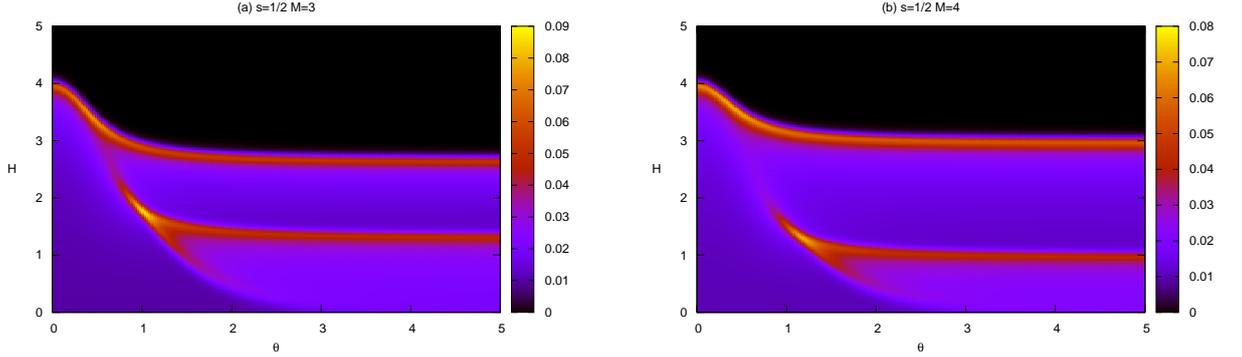


Figura 5.3: Entropia $S(\mathfrak{h}, \theta)$ para $T = 0.03$, spin $s = 1/2$ e $M = 3, 4$.

Para finalizar, estudamos os casos $\Delta = \frac{1}{2}$ e $\Delta = \frac{3}{2}$ com $s = \frac{1}{2}$ e $M = 2$, Figura 5.4. O aspecto do gráfico do caso $\Delta = \frac{1}{2}$ é bem semelhante ao caso isotrópico. Temos uma fase com excitações massivas, regime ferromagnético, e duas fases sem excitações massivas: para θ pequeno trata-se da fase comensurável e para θ grande temos a fase incommensurável. No caso $\Delta = \frac{3}{2}$ temos algo um pouco diferente, onde é possível identificar quatro fases.

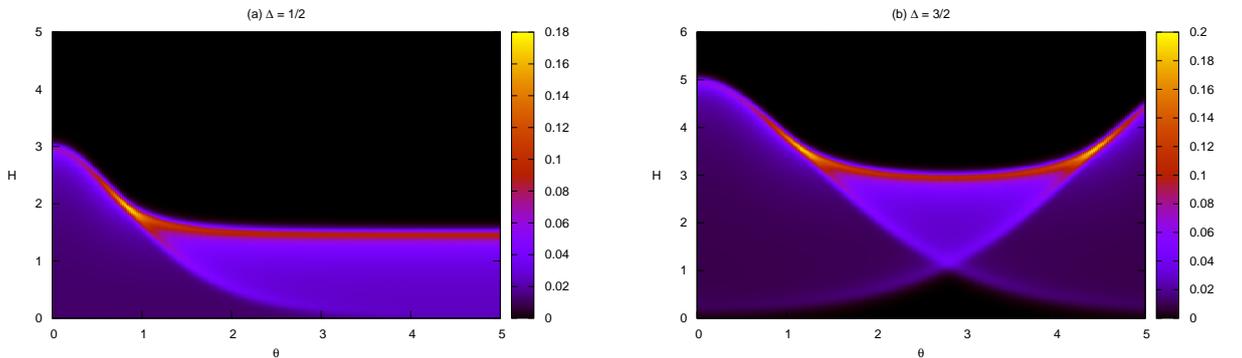


Figura 5.4: Entropia $S(\mathfrak{h}, \theta)$ para $T = 0.03$, $s = \frac{1}{2}$, $M = 2$ e $\Delta = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$.

Dois fases possuem excitações massivas, uma delas é o regime ferromagnético usual, para

\mathfrak{h} grande, e a outra é um regime antiferromagnético, para \mathfrak{h} pequeno. Além destas, temos duas fases de excitações não massivas, as fases comensurável e incomensurável. A fase incomensurável apresenta entropia maior que a fase comensurável. Devemos dizer que para o caso $\Delta > 1$ o diagrama de fase é periódico em θ e possui período $\frac{2\pi}{\sqrt{\Delta^2-1}}$.

Conclusão

Nesta dissertação conseguimos aplicar o método da Matriz de Transferência Quântica ao caso de cadeias quânticas de spin integráveis com interações competitivas. Consideramos a existência de M parâmetros de heterogeneidade, o que fornece Hamiltonianos com interações cujo alcance contém $M + 1$ sítios. Obtivemos um conjunto finito de equações integrais não lineares que descrevem a termodinâmica destes modelos. No caso com anisotropia uniaxial, nos restringimos ao estudo de cadeias de spin- $\frac{1}{2}$. Para o caso isotrópico utilizamos a hierarquia de fusão, obtendo modelos de spin- s integráveis. Isto permitiu generalizar a descrição das propriedades termodinâmicas de Hamiltonianos com interações competitivas ao caso de cadeias de spin- s com interações de mais longo alcance [36].

Além disto, resolvemos numericamente estas equações integrais não lineares para os casos $\Delta = 1$, $M = 2$, com $s = 1/2, 1, 3/2, 2$. Apresentamos também resultados para $M = 3, 4$ e $s = 1/2$ a temperaturas finitas. Isto nos deu uma boa noção sobre o diagrama de fases do estado fundamental destas cadeias de spin. Geralmente temos uma fase ferromagnética com excitações massivas e as demais fases são antiferromagnéticas com excitações não massivas. Colocando anisotropia uniaxial, verificamos que enquanto no caso $\Delta < 1$ o diagrama é semelhante ao caso isotrópico, no caso $\Delta > 1$ ocorre a aparição de mais uma fase antiferromagnética, porém, com excitações massivas. Além disto, podemos mostrar que o diagrama de fases desta última situação é periódico.

A inclusão de parâmetros de heterogeneidade na matriz de transferência linha-a-linha constitui, portanto, um método simples de gerar Hamiltonianos com interações competitivas. Este método altera trivialmente as propriedades de analiticidade do maior auto-valor desde que utilizemos valores reais dos ω_j 's. Por consequência a definição das funções auxiliares não sofre mudanças sensíveis e as equações integrais não lineares podem ser obtidas de forma análoga ao caso homogêneo. Entretanto esta mudança, trivial do ponto de vista das propriedades de analiticidade, é responsável por uma variedade de diagramas de fase como exemplificado nesta dissertação.

Acreditamos que os nossos resultados possam ser estendidos a cadeias quânticas de spin com diferentes simetrias, por exemplo, o caso $SU(3)$.

Apêndice

Apêndice A: Ansatz de Bethe Algébrico

Mostramos neste apêndice como podemos obter o espectro da matriz de transferência. Para este propósito, considere a matriz de monodromia como um operador no espaço A , cujos elementos são operadores no espaço quântico $\prod_{i=1}^L V_i$

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_A(\lambda) &= \mathcal{L}_{AL}(\lambda, \nu_1) \mathcal{L}_{AL-1}(\lambda, \nu_2) \dots \mathcal{L}_{A1}(\lambda, \nu_L) \\ &= \left[\begin{array}{cc} \left[\begin{array}{cc} a & 0 \\ 0 & b \end{array} \right]_L & \left[\begin{array}{cc} 0 & c \\ 0 & 0 \end{array} \right]_L \\ \left[\begin{array}{cc} 0 & c \\ 0 & 0 \end{array} \right]_L & \left[\begin{array}{cc} b & 0 \\ 0 & a \end{array} \right]_L \end{array} \right]_A (\lambda, \nu_1) \dots \left[\begin{array}{cc} \left[\begin{array}{cc} a & 0 \\ 0 & b \end{array} \right]_1 & \left[\begin{array}{cc} 0 & c \\ 0 & 0 \end{array} \right]_1 \\ \left[\begin{array}{cc} 0 & c \\ 0 & 0 \end{array} \right]_1 & \left[\begin{array}{cc} b & 0 \\ 0 & a \end{array} \right]_1 \end{array} \right]_A (\lambda, \nu_L) = \begin{bmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

desejamos obter os auto-estados de $T(\lambda) = A(\lambda) + D(\lambda)$. Veja que

$$\mathcal{L}_{Aj}(\lambda, \nu) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j = \begin{bmatrix} a(\lambda, \nu) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j & c(\lambda, \nu) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_j \\ 0 & b(\lambda, \nu) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j \end{bmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

é uma matriz triangular superior. Podemos calcular facilmente os termos diagonais de um produto de matrizes triangulares superiores. Considere a ação de $\mathcal{T}_A(\lambda)$ sobre o estado $|\Psi_0\rangle = \prod_{j=1}^L \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j$. Temos $A(\lambda)|\Psi_0\rangle = \alpha(\lambda)|\Psi_0\rangle$ e $D(\lambda)|\Psi_0\rangle = \delta(\lambda)|\Psi_0\rangle$, sendo $\alpha(\lambda) = \prod_{j=1}^L a(\lambda, \nu_j)$ e $\delta(\lambda) = \prod_{j=1}^L b(\lambda, \nu_j)$. Logo $|\Psi_0\rangle$ é um auto-estado da matriz de transferência, pois

$$T(\lambda)|\Psi_0\rangle = (\alpha(\lambda) + \delta(\lambda))|\Psi_0\rangle. \quad (\text{A.3})$$

Desejamos encontrar outros auto-estados na mesma perspectiva do problema do oscilador harmônico. Consideremos $|\Psi_0\rangle$ como estado de referência (não necessariamente o estado

fundamental), no qual atuaremos o operador de “criação”. Vemos que A e D participam da equação de auto-valor. O operador C aniquila o estado de referência. Propõe-se que o operador B atue como operador de criação. Temos o ansatz

$$|\Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)\rangle = B(\lambda_n) \dots B(\lambda_1)|\Psi_0\rangle, \quad (\text{A.4})$$

$$(A(\lambda) + D(\lambda))|\Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)\rangle = \Lambda_n(\lambda)|\Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)\rangle. \quad (\text{A.5})$$

Para que possamos proceder com tal proposta, é necessário que saibamos relações algébricas que permitam calcular (A.5). A relação fundamental (1.10) provê estas relações. Entre elas temos

$$[A(\mu), A(\eta)] = [B(\mu), B(\eta)] = [C(\mu), C(\eta)] = [D(\mu), D(\eta)] = 0, \quad (\text{A.6})$$

de onde podemos inferir que a ordem dos operadores B em (A.4) é irrelevante; e de grande importância são as relações

$$\begin{aligned} A(\mu)B(\eta) &= \frac{a}{b}(\eta, \mu)B(\eta)A(\mu) - \frac{c}{b}(\eta, \mu)B(\mu)A(\eta), \\ D(\mu)B(\eta) &= \frac{a}{b}(\mu, \eta)B(\eta)D(\mu) - \frac{c}{b}(\mu, \eta)B(\mu)D(\eta), \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

que nos permite passar os operadores A e D pelo operador B . Com a aplicação sucessiva de (A.7) podemos obter facilmente que

$$A(\lambda)|\Psi(\vec{\lambda})\rangle = \alpha(\lambda) \prod_{j=1}^n \frac{a}{b}(\lambda_k, \lambda)|\Psi(\vec{\lambda})\rangle - \sum_{k=1}^n \alpha(\lambda_k) \frac{c}{b}(\lambda_k, \lambda) \prod_{\substack{j \neq k \\ j=1}}^n \frac{a}{b}(\lambda_j, \lambda_k)|\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle, \quad (\text{A.8})$$

e

$$D(\lambda)|\Psi(\vec{\lambda})\rangle = \delta(\lambda) \prod_{j=1}^n \frac{a}{b}(\lambda, \lambda_k)|\Psi(\vec{\lambda})\rangle - \sum_{k=1}^n \delta(\lambda_k) \frac{c}{b}(\lambda, \lambda_k) \prod_{\substack{j \neq k \\ j=1}}^n \frac{a}{b}(\lambda_k, \lambda_j)|\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle, \quad (\text{A.9})$$

onde denotamos

$$|\Psi(\vec{\lambda})\rangle = |\Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)\rangle \quad |\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle = |\Psi(\lambda_1, \dots, \underbrace{\lambda}_k, \dots, \lambda_n)\rangle.$$

Para que $|\Psi(\vec{\lambda})\rangle$ seja, de fato, auto-estado de $T(\lambda)$, as contribuições em $|\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle$ devem se cancelar. Desta forma o ansatz de Bethe fornece

$$T(\lambda)|\Psi(\vec{\lambda})\rangle = \left(\alpha(\lambda) \prod_{j=1}^n \frac{a}{b}(\lambda_k, \lambda) + \delta(\lambda) \prod_{j=1}^n \frac{a}{b}(\lambda, \lambda_k) \right) |\Psi(\vec{\lambda})\rangle, \quad (\text{A.10})$$

e os λ_j 's devem ser escolhidos tais que

$$\frac{\alpha}{\delta}(\lambda_k) = \prod_{\substack{j \neq k \\ j=1}}^n \frac{a}{b}(\lambda_k, \lambda_j) \frac{b}{a}(\lambda_j, \lambda_k), \quad k = 1, \dots, n, \quad (\text{A.11})$$

que resulta da imposição que as contribuições proporcionais a $|\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle$ se anulem e da relação (1.22) devido à unitariedade. As n equações (A.11) são as chamadas equações de Bethe.

Mais geralmente se tivermos uma matriz de transferência que satisfaz a relação fundamental com a mesma matriz R e pudermos encontrar um estado de referência $|\Psi_0\rangle$ no qual podemos garantir a triangularidade global, o ansatz de Bethe acima é aplicável, modificando-se apenas as funções $\alpha(\lambda)$ e $\delta(\lambda)$ no auto-valor.

Apêndice B: Lista dos coeficientes $\mathcal{H}(\theta_1, \theta_2)$

Neste apêndice listamos os coeficientes que aparecem em (1.53).

$$\xi_{0,1} = -\frac{3 + 2\theta_2^2 + 2(\theta_2 - \theta_1)^2 + \theta_2^2(\theta_2 - \theta_1)^2}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.1})$$

$$\xi_{0,2} = -\frac{3 + 2\theta_1^2 + 2(\theta_2 - \theta_1)^2 + \theta_1^2(\theta_2 - \theta_1)^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.2})$$

$$\xi_{0,3} = -\frac{3 + 2\theta_1^2 + 2\theta_2^2 + \theta_1^2\theta_2^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} \quad (\text{B.3})$$

$$\xi_{1,1} = \frac{1}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} + \frac{1}{3(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.4})$$

$$\xi_{1,2} = \frac{1}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} + \frac{1}{3(1 + \theta_1^2)} \quad (\text{B.5})$$

$$\xi_{1,3} = \frac{1}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} + \frac{1}{3(1 + \theta_2^2)} \quad (\text{B.6})$$

$$\xi_{2,1} = \frac{\theta_1^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} + \frac{(\theta_2 - \theta_1)^2}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.7})$$

$$\xi_{2,2} = \frac{\theta_1^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} + \frac{\theta_2^2}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.8})$$

$$\xi_{2,3} = \frac{\theta_2^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} + \frac{(\theta_2 - \theta_1)^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.9})$$

$$\xi_{3,1} = \frac{\theta_1}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} + \frac{\theta_1 - \theta_2}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_1 - \theta_2)^2)} \quad (\text{B.10})$$

$$\xi_{3,2} = \frac{-\theta_1}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} + \frac{-\theta_2}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_1 - \theta_2)^2)} \quad (\text{B.11})$$

$$\xi_{3,3} = \frac{\theta_2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} + \frac{\theta_2 - \theta_1}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_1 - \theta_2)^2)} \quad (\text{B.12})$$

$$\xi_{4,1} = \frac{\theta_2^2(\theta_2 - \theta_1)^2}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.13})$$

$$\xi_{4,2} = \frac{\theta_1^2(\theta_2 - \theta_1)^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.14})$$

$$\xi_{4,3} = \frac{\theta_1^2\theta_2^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} \quad (\text{B.15})$$

$$\xi_{5,1} = \frac{(\theta_1 - \theta_2)\theta_2^2}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.16})$$

$$\xi_{5,2} = \frac{-\theta_1(\theta_2 - \theta_1)^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.17})$$

$$\xi_{5,3} = \frac{\theta_2\theta_1^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} \quad (\text{B.18})$$

$$\xi_{6,1} = \frac{-\theta_2(\theta_1 - \theta_2)^2}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.19})$$

$$\xi_{6,2} = \frac{(\theta_2 - \theta_1)\theta_1^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.20})$$

$$\xi_{6,3} = \frac{\theta_1\theta_2^2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} \quad (\text{B.21})$$

$$\xi_{7,1} = \frac{-\theta_2(\theta_1 - \theta_2)}{6(1 + \theta_2^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.22})$$

$$\xi_{7,2} = \frac{-\theta_1(\theta_2 - \theta_1)}{6(1 + \theta_1^2)(1 + (\theta_2 - \theta_1)^2)} \quad (\text{B.23})$$

$$\xi_{7,3} = \frac{\theta_1\theta_2}{6(1 + \theta_1^2)(1 + \theta_2^2)} \quad (\text{B.24})$$

Apêndice C: Demonstração da equação (1.66)

Seja

$$e_1 = \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu)\mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2}1)}(\lambda)\mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2}1)}(\mu), \quad (\text{A.1})$$

temos

$$e_1 = \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu) {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{ad}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ae}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{bd}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}) {}_c B_{be}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.2})$$

$$= \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu) {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{ad}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ae}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) P_{de}^1 \mathcal{L}_{bd}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}) {}_c B_{be}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.3})$$

$$= \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu) {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{ad}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ae}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) (\text{Id} - P_{de}^0) \mathcal{L}_{bd}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}) {}_c B_{be}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \quad (\text{A.4})$$

$$= {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu) \mathcal{L}_{ad}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ae}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{bd}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}) {}_c B_{be}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.5})$$

onde usamos as relações (1.62) e a Yang-Baxter

$$\mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{bd}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu - \frac{1}{2}) \check{P}_{de}^0 = \check{P}_{de}^0 \mathcal{L}_{bd}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}), \quad (\text{A.6})$$

veja (1.57). Usando a Yang-Baxter novamente, temos

$$e_1 = {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{bd}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ad}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ae}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu) {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.7})$$

$$= {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{bd}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}) (P_{de}^0 + P_{de}^1) \mathcal{L}_{ad}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ae}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu) {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.8})$$

$$= {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{bd}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(\mu - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{be}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\mu + \frac{1}{2}) {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}t} \mathcal{L}_{ad}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \frac{1}{2}) \mathcal{L}_{ae}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda + \frac{1}{2}) {}_c B_{de}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu), \quad (\text{A.9})$$

$$= \mathcal{L}_{bc}^{(\frac{1}{2}1)}(\mu) \mathcal{L}_{ac}^{(\frac{1}{2}1)}(\lambda) \mathcal{L}_{ab}^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(\lambda - \mu). \quad (\text{A.10})$$

Bibliografia

- [1] Bohr, N. [originally published as “Studier over Metallernes Elektrontheori”, Københavns Universitet (1911).] “The Doctor’s Dissertation (Text and Translation)”. In Rosenfeld, L.. Early Works (1905-1911). Niels Bohr Collected Works, v.1, Elsevier, p. 165-393, 1972.
- [2] van Leeuwen, H. J. Problèmes de la théorie électronique du magnétisme, *Journal de Physique et le Radium* 2, v.12, 361-377, 1921.
- [3] Niss, M. History of the Lenz-Ising Model 1920-1950: From Ferromagnetic to Cooperative Phenomena, *Archive for History of Exact Sciences*, v.59, p. 267-318, 2005.
- [4] Heisenberg, W. Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift Für Physik*, v.49, p. 619-636, 1928.
- [5] Bethe, H. Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette., *Zeitschrift für Physik*, v.71, p. 205-226, 1931.
- [6] Yang, C.N. Some Exact Results for the Many-Body Problem in one Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction, *Physical Review Letters*, v.19, p. 1312-1315, 1967.
- [7] Lieb, E.H. Exact Solution of the Problem of the Entropy of Two-Dimensional Ice, *Physical Review Letters*, v.18, p.692-694, 1967.
- [8] McCoy, B.M.; Wu, T.T. Hydrogen-Bonded Crystals and the Anisotropic Heisenberg Chain, *Nuovo Cimento B*, v.56, p. 311, 1968.
- [9] Baxter, R.J. Partition function of the Eight-Vertex lattice model, *Annals of Physics*, v.70, p. 193-228, 1972.
- [10] Sklyanin, E.K.; Takhtadzhyan, L.A.; Faddeev, L.D. Quantum inverse problem method I, *Theoretical and Mathematical Physics*, v. 40, p.688-706, 1979; Sklyanin, E.K.; Takhtadzhyan, L.A.; Faddeev, L.D. The quantum inverse problem and the xyz Heisenberg model, *Russian Mathematical Surveys*, v.34, p.11-68, 1979.

- [11] Takhtajan, L.A. The picture of low-lying excitations in the isotropic Heisenberg chain of arbitrary spins, *Physics Letters A*, v.87, p.479-489, 1982.
- [12] Yang, C.N.; Yang, C.P. Thermodynamics of a one-dimensional system of bosons with repulsive delta-function interaction. *Journal of Mathematical Physics*, v.10, p.1115-1122, 1969 ; Yang, C.P. One-dimensional systems of bosons with repulsive N-function interactions at a finite temperature T, *Physical Review A*, v.2, p.154-157, 1970.
- [13] Gaudin, M. Thermodynamics of the Heisenberg-Ising Ring for $\Delta \geq 1^*$, *Physical Review Letters*, v.26, p.1301-1304, 1971.
- [14] Takahashi, M. One-Dimensional Heisenberg Model at Finite Temperature, *Progress of Theoretical Physics*, v.46, p.401-415, 1971.
- [15] Klümper, A. Free energy and correlation lengths of quantum chains related to restricted solid-on-solid lattice models, *Annalen der Physik*, v.504, p.540-553, 1992.
- [16] Klümper, A. Thermodynamics of the anisotropic spin-1/2 Heisenberg chain and related quantum spin chains, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, v.91, p.507-519, 1993.
- [17] Suzuki, M. Generalized Trotter's formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems, *Communications in Mathematical Physics*, v.51, p.183-190, 1976.
- [18] Suzuki, M. Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d + 1)-dimensional Ising systems, *Progress of Theoretical Physics*, v.56, p.1454-1469, 1976.
- [19] Suzuki, M. Transfer-matrix method and Monte Carlo simulation in quantum spin systems, *Physical Review B*, v.31, p.2957-2965, 1985.
- [20] Trotter, H.F. On the product of semi-groups of operators, *Proceedings of the American Mathematical Society*, v.10, p.545-551, 1959.
- [21] Jüttner, G.; Klümper, A., Exact calculation of thermodynamical quantities of the integrable t-J model, *Europhysics Letters*, v.37, p.335-340, 1997.
- [22] Jüttner, G.; Klümper, A.; Suzuki, J. The Hubbard chain at finite temperatures: ab initio calculations of Tomonaga-Luttinger liquid properties, *Nuclear Physics B*, v.522, p.471-502, 1998.

- [23] Fujii, A.; Klümper, A. Anti-symmetrically fused model and non-linear integral equations in the three-state Uimin-Sutherland model *Nuclear Physics B*, v.546, p.751-764, 1999 / Damerau, J.; Klümper, A. Nonlinear integral equations for the thermodynamics of the $sl(4)$ -symmetric Uimin-Sutherland model, *Journal of Statistical Mechanics*, Topical issue on the 75th Anniversary of the Bethe Ansatz, P12014, 2006.
- [24] Suzuki, J. Spinons in magnetic chains of arbitrary spins at finite temperatures. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v.32, p.2341-2359, 1999.
- [25] Ribeiro, G.A.P. Klümper, A. Thermodynamics of antiferromagnetic alternating spin chains. *Nuclear Physics B*, v.801, p. 247-267, 2008./ Ribeiro, G.A.P.; Crampé, N.; Klümper, A. The thermal conductivity of alternating spin chains *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P01019, 2010/ Ribeiro, G.A.P. The magnetocaloric effect in integrable spin-s chains. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P12016, 2010.
- [26] Zvyagin, A.A. Bethe ansatz solvable multi-chain quantum systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v.34, p.R21-R53, 2001.
- [27] Zvyagin, A.A.; Klümper, A. Quantum phase transitions and thermodynamics of quantum antiferromagnets with next-nearest-neighbor couplings. *Physical Review B*, v.68, 144426[10], 2003.
- [28] Trippe, C.; Klümper, A. Quantum phase transitions and thermodynamics of quantum antiferromagnets with competing interactions. *Low Temperature Physics*, v.33, p.920-926, 2007.
- [29] Tselik, A.M. Incommensurate phases of quantum one-dimensional magnetics. *Physical Review B*, v.42, p.779-785, 1990.
- [30] Frahm, H. Integrable spin-1/2 XXZ Heisenberg chain with competing interactions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v.25, p.1417-1427, 1992.
- [31] Frahm, H.; Rödenbeck, C. A generalized spin ladder in a magnetic field. *The European Physical Journal B*, v.10, p.409-414, 1999. / Frahm, H.; Roedenbeck, C. Properties of the chiral spin liquid state in generalized spin ladders. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v.30, p.4467-4479, 1997.
- [32] Popkov V.Yu.; Zvyagin, A.A. "Antichiral" exactly solvable effectively two-dimensional quantum spin model. *Physics Letters A*, v.175, p.295-298, 1993/ Zvyagin, A.A. Ther-

- modynamics of the exactly solvable two-chain and multichain quantum spin models. *Physical Review B*, v.51, p.12579-12584, 1995.
- [33] Zvyagin, A.A. Phase transitions and elementary excitations in a zigzag-like spin system. *Physical Review B*, v.57, p.1035-1039, 1998 / Zvyagin, A.A. Commensurate-incommensurate phase transitions for multichain quantum spin models: exact results. *Low Temperature Physics*, v.26, p.134-146, 2000.
- [34] Arnaudon, D.; Poghossian, R.; Sedrakyan, A.; Sorba, P. Integrable chain model with additional staggered model parameter. *Nuclear Physics B*, v.588, p.638-655, 2000.
- [35] Mkhitarian, V.V.; Sedrakyan, A.G. Thermodynamic Bethe ansatz for the spin-1/2 staggered XXZ-model. *Nuclear Physics B*, v.673, p.455-475, 2003.
- [36] T.S. Tavares, G.A.P. Ribeiro, Thermodynamics of quantum spin chains with competing interactions. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P09007, 2013.
- [37] Menzel, M.; Mokrousov, Y.; Wieser, R.; Bickel, J.E.; Vedmedenko, E.; Blügel, S.; Heinze, S.; von Bergmann, K.; Kubetzka, A.; Wiesendanger, R. Information Transfer by Vector Spin Chirality in Finite Magnetic Chains. *Physical Review Letters*, v.108, 197204(5), 2012.
- [38] Sachdev, S. *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press, New Haven, 1998.
- [39] Werlang, T.; Ribeiro, G.A.P.; Rigolin, G. Interplay Between Quantum Phase Transitions and The Behavior of Quantum Correlations at Finite Temperatures. *International Journal of Modern Physics B*, v.23, 1345032, 2012.
- [40] Kulish, P.P.; Reshetikhin, N.Y.; Sklyanin, E.K. Yang-Baxter Equation and Representation Theory: I. *Letters in Mathematical Physics*, v.5, p.393-403, 1981.
- [41] F. Göhmann, A. Seel, J. Suzuki, Correlation functions of the integrable isotropic spin-1 chain at finite temperature. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P11011, 2010.
- [42] Takahashi, M.; Shiroishi, M.; Klümper, A. Equivalence of TBA and QTM. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v.34, p. L187-L194, 2001.
- [43] Destri, C.; de Vega, H.J. New thermodynamic Bethe ansatz equations without strings. *Physical Review Letters*, v.69, p.2313-2317, 1992.

- [44] Hulthén, L. Über das Austauschproblem eines Kristalles (Dissertation). *Arkiv för matematik, astronomi och fysik*, v.26A, p.1-106, 1938.
- [45] Klümper, A. Pearce, P.A. Conformal weights of RSOS lattice models and their fusion hierarquies, *Physica A*, v.183, p. 304-350, 1992.