

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

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

## **Propriedades Físicas de Modelos Integráveis**

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

Área de concentração: Física Básica.

Thiago Silva Tavares

São Carlos, 30 de junho de 2017



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

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

---

Folha de Aprovação

---

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Tese de Doutorado do candidato Thiago Silva Tavares, realizada em 16/08/2017:

---

Prof. Dr. Giuliano Augustus Pavan Ribeiro  
UFSCar

---

Prof. Dr. Marcio Jose Martins  
UFSCar

---

Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz  
IFSC/USP

---

Prof. Dr. José Abel Hoyos Neto  
IFUSP

---

Prof. Dr. Paulo Afonso Faria da Veiga  
USP

# Agradecimentos

“Mas se são incapazes de perceber a presença do nosso Pai, como poderão reconhecer-lhe um simples sinal? Os pais humanos sabem que sem o seu esforço, ou sem a generosa cooperação de alguém que os substitua, à frente da família, não seria possível o desenvolvimento de seus filhos, no que se refere à assistência material; contudo, os homens do mundo encontram a casa edificada da natureza, com a exatidão de sua leis, e timbram sempre em negar a assistência da Providência divina. Vai, Tomé, e dize-lhes que a Boa-Nova do reino não se destina aos que se encontrem satisfeitos e confortados na Terra; destina-se justamente aos corações que aspiram a uma vida melhor!<sup>1</sup>”

A gratidão é a compreensão de que sozinho nada podemos, de que necessitamos de algum auxílio para as nossas realizações. E nada maior que devamos ser gratos que a própria existência, cuja causa primária permanece insondável às nossas mentes limitadas. À falta de concordância de terminologia, designarei esta causa por Pai, como no Boa-Nova, por ser o gerador por excelência, cujas leis presidem tudo o que existe e que se confundem, por vezes, com o próprio legislador. A este Pai agradeço pela minha trajetória, nas dificuldades e nas alegrias, onde aprendi a observar mais o processo educativo do que a concessão de favores. Obrigado meu Pai!

Logo depois, como lembrança do carinho do Pai de todos, situo os meus pais, Paulo e Angela, e meu irmão Paulo André. Agradeço pelo amor que vocês me dedicam todos os dias, sem o que eu já não teria base para caminhar a minha jornada. E por mais que logo eu venha me tornar materialmente independente de vocês, jamais poderei apagar dos arquivos do meu espírito o fato de já ter recebido algo. Por isso, minha eterna gratidão.

Além deles, eu tenho pais, mães e irmãos, em espírito, que são todos aqueles que o Pai fez questão de juntar, para que eu saboreasse o alento da afinidade no contínuo esforço de auto-aprimoramento de todos os dias. Jamais poderia nomear todos aqui sem diminuir-lhes a devida importância. Espero não ofender a vossa afeição por apenas listar os agrupamentos em que laboramos juntos. Agradeço a todos do Grupo Kardecista Cairbar Schutel, onde conheci o Espiritismo e onde compartilhei muita alegria com os amigos da Mocidade. Agradeço a todos da ONG Projetando o Futuro, incluindo nossas preciosas crianças, que por vezes nos fazem pensar se somos professores ou alunos. Agradeço a todos

---

<sup>1</sup>Adaptado do livro Boa-Nova, Francisco Cândido Xavier pelo espírito Humberto de Campos.

os irmãos da Instituição Espírita Cristã Casa do Caminho, onde aprendi o fenômeno mediúnico sem desviar do compromisso com o Cristo. E também aos meus queridos companheiros do Núcleo de Estudo e Pesquisa do Evangelho Paulo de Tarso, de onde surgiram as mais ricas reflexões de cunho moral. Gostaria de agradecer a todos os meus companheiros da graduação, tanto do curso de Engenharia Física como do curso de Física. Em especial, ao Victor pela amizade constante e pelas discussões.

Gostaria de agradecer à Margot, à Lúcia, à Gabi, à Lumi, ao Rafael, ao Ícaro, ao Samuel, ao Otacílio, ao Rodolfão, ao João Marcos, à Vitória, à Beatriz, ao Daniel, à Bárbara, à Marina, ao Brunão, ao Ivan, à Grazi, à Mirelle e a tantos outros que não pude encaixar nas listas acima.

Devo agradecer também aos que me ensinaram o amor ao trabalho a que hoje me consagro. São todos os professores que contribuíram de forma significativa para que eu chegasse até aqui. Gostaria de agradecer ao Márcio Martins, ao Vivaldo Leiria, ao Joel, ao Betão e à Bete.

Além deles, e de modo mais especial, devo agradecer ao meu orientador, Giuliano A. P. Ribeiro, pelo caráter firme, pelas palavras sinceras e estimulantes. Não poderia aqui ser grato tão somente pelas várias portas que você me abriu, com o perigo de degenerar o tanto que me foi concedido em simples jogo de interesses. Sou grato pela paciência com que você me guiou, tendo em conta o meu jeito “distraído”; sou grato pela solicitude na solução de vários problemas; sou grato pela orientação no sentido mais próprio da palavra, ajudando-me a construir o sentimento de confiança e perseverança, seja nos problemas da Física ou da Vida.

Finalmente, agradeço à FAPESP pelo apoio financeiro deste projeto, n 2013/17338-4.

# Resumo

Nesta tese nós abordamos dois problemas inseridos no contexto dos modelos integráveis. Nós formulamos sistemas finitos de equações integrais não-lineares para descrição de propriedades físicas das cadeias quânticas invariantes pelas super-álgebras  $su(2|1)$  e  $osp(1|2)$ ; e estudamos a influência das condições de contorno no modelo de seis-vértices simétrico. O modelo invariante pela super-álgebra  $su(2|1)$  é uma generalização de multicadeias do modelo t-J, do qual pudemos extrair o diagrama de fases a partir do método da matriz de transferência quântica. O modelo invariante pela super-álgebra  $osp(1|2)$  também pode ser descrito em termos de férmions itinerantes com interação de troca, embora o Hamiltoniano não seja hermitiano, o que corresponde a uma teoria de campos subjacente não unitária. Para este modelo nós obtivemos a carga central e a carga central efetiva de forma analítica, corroborando os resultados numéricos da literatura. Ambos os resultados demonstram a eficiência do sistema de equações integrais e apontam para possibilidade de generalização para modelos de diferentes simetrias. No que diz respeito à influência das condições de contorno no modelo de seis-vértices, nós demonstramos a existência de uma infinidade de condições de contorno que produzem propriedades intensivas diferentes do caso periódico  $S_{PBC} = \frac{3}{2} \ln \left( \frac{4}{3} \right)$ . Provamos que todos os valores de entropia no intervalo  $[0, \frac{1}{2} \ln \left( \frac{3^3}{2^4} \right)]$  são acessíveis através de uma escolha adequada do contorno, e conjecturamos que todos os valores no intervalo  $[\frac{1}{2} \ln \left( \frac{3^3}{2^4} \right), S_{PBC}]$  também o são. O número de configurações do modelo de seis-vértices sob condições fixas de contorno corresponde ao número de matrizes de sinais alternados generalizadas.

## Abstract

In this thesis we tackled two different problems of quantum integrability. We derived finite sets of non-linear integral equations to describe physical properties of quantum chains invariant under the super-algebras  $su(2|1)$  and  $osp(1|2)$ ; and we also studied the influence of boundary conditions on the bulk properties of the six-vertex model. The  $su(2|1)$  invariant model is a multi-chain generalization of the super-symmetric t-J model. Using the quantum transfer matrix method we obtained the phase diagram. For the  $osp(1|2)$  invariant model we could also rewrite the Hamiltonian in the language of itinerant fermions interacting through exchange, although the Hamiltonian itself is not hermitian, which corresponds to a non-unitary field theory. We analytically computed the (effective) central charge of this theory, corroborating numerical results of the literature. These results point towards the possibility of generalization of such non linear integral equations for models of different symmetries. Concerning the problem of the influence of boundary conditions on the six-vertex model, we showed the existence of infinitely many boundaries whose intensive properties disagree with the standard periodic boundary condition  $S_{PBC} = \frac{3}{2} \ln \left( \frac{4}{3} \right)$ . We also proved that by a suitable choice of boundary conditions any entropy value in the interval  $[0, \frac{1}{2} \ln \left( \frac{3^3}{2^4} \right)]$  is accessible. We conjectured that the same is true for the interval  $[\frac{1}{2} \ln \left( \frac{3^3}{2^4} \right), S_{PBC}]$ . The number of configurations of the six-vertex model with fixed boundary condition amounts to the enumeration problem of generalized alternating sign matrices.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Modelo de vértices . . . . .	6
1.2	Integrabilidade . . . . .	11
1.2.1	Exemplos . . . . .	13
1.3	Super-Matrizes e Equação de Yang-Baxter Graduada . . . . .	18
1.4	Ansatz de Bethe algébrico . . . . .	23
1.5	Matriz de Transferência Quântica . . . . .	28
<b>2</b>	<b>Propriedades termodinâmicas a temperatura finita</b>	<b>32</b>
2.1	$su(l r)$ . . . . .	32
2.1.1	$su(2 1)$ . . . . .	36
2.1.2	$su(3)$ . . . . .	39
2.1.3	Diagrama de fases $su(2 1)$ . . . . .	42
2.2	$osp(1 2)$ . . . . .	51
2.2.1	Equações integrais não-lineares para o maior auto-valor a temperatura finita . . . . .	51
2.2.2	Calor específico e carga central efetiva . . . . .	54
<b>3</b>	<b>Correções de tamanho finito</b>	<b>58</b>
3.1	Em direção à formulação sistemática das equações integrais não-lineares para modelos $su(l)$ invariantes . . . . .	58
3.1.1	Linearização do sistema- $T$ . . . . .	59
3.1.2	Quase dualidade e fluxo de Bäcklund . . . . .	62
3.1.3	Propriedades de analiticidade e equações integrais não-lineares . . . . .	65

3.2	$osp(1 2)$ . . . . .	72
3.2.1	Equações integrais não-lineares para o maior auto-valor a tamanho finito . . . . .	72
3.2.2	Carga central . . . . .	77
<b>4</b>	<b>Influência das condições de contorno na entropia do modelo de seis-vértices simétrico</b>	<b>81</b>
4.1	Simetrias . . . . .	81
4.2	Condições de contorno toroidais e livre . . . . .	83
4.2.1	Condições toroidais homogêneas . . . . .	87
4.2.2	Condições de contorno toroidais não homogêneas . . . . .	92
4.3	Condições fixas de contorno . . . . .	99
4.3.1	Condições de contorno ferroelétrico . . . . .	99
4.3.2	Condições de contorno Domain-Wall . . . . .	100
4.3.3	Descendentes das condições de contorno domain wall . . . . .	101
4.3.4	Fusão das condições de contorno domain wall e ferroelétrico . . . . .	104
4.3.5	Condições de contorno Néel . . . . .	105
4.3.6	Fusão das condições de contorno ferroelétrico e Néel . . . . .	109
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>112</b>
<b>A</b>	<b>Super-álgebra de Lie</b>	<b>116</b>
<b>B</b>	<b>Diferença qualitativa das funções auxiliares para as diferentes fases</b>	<b>122</b>
<b>C</b>	<b>Formulação alternativa das equações integrais para correções de tamanho finito no <math>osp(1 2)</math></b>	<b>128</b>
<b>D</b>	<b>Ansatz de Bethe para o maior auto-valor do setor <math>n = \frac{L}{2}</math> no regime ferroelétrico</b>	<b>131</b>
<b>E</b>	<b>Inversões separadas</b>	<b>134</b>
<b>F</b>	<b>Configurações Néel</b>	<b>136</b>



# Lista de Figuras

1.1	a) Ilustração de uma rede retangular de $N$ linhas e $L$ colunas onde destacamos a representação da matriz de transferência linha a linha, b) na qual estão definidos os pesos de Boltzmann associados a cada vértice. . . . .	7
1.2	Modelo de vértices heterogêneo obtido a partir do mapeamento de Trotter-Suzuki. O destaque em vermelho é a matriz de transferência quântica. . . .	30
2.1	Mapeamento de Trotter-Suzuki para a generalização de multi-cadeias com $M=2$ . O detalhe em vermelho enfatiza as duas matrizes de transferência quântica. Aqui $\omega = i\theta$ e o tamanho da rede é $ML$ por $MN$ . . . . .	35
2.2	Diagrama de fases obtido a partir do perfil de entropia a $T = 0.005$ : a) limite de semi-preenchimento ( $n \rightarrow 1$ ) b) limite cadeia simples ( $\theta \rightarrow 0$ ). . .	44
2.3	Relação de dispersão para ondas de spin/buraco: a) $\theta = 0.2$ , b) $\theta = \frac{\sqrt{3}}{3}$ , c) $\theta = 0.95$ . A simetria de paridade é quebrada para $\theta > \frac{\sqrt{3}}{3}$ . As ondas de buraco criadas sobre um “substrato” ferromagnético não interagem, sendo possível preencher o espectro de excitação de um buraco até a densidade nula. Isto permite estudar exatamente a transição comensurável-incomensurável entre fases ferromagneticamente ordenadas. . . . .	45
2.4	Diagrama de fases obtido a partir do perfil de entropia a $T = 0.005$ : a) $H = 0$ e b) $H = 4.5$ . . . . .	47
2.5	Diagrama de fases obtido pelo perfil de entropia a $T = 0.005$ : a) $H = 3$ e b) $H = 0.25$ . . . . .	49

2.6	No painel esquerdo nós mostramos o calor específico dividido pela temperatura $C/T$ (no detalhe mostramos $C$ vs. $T$ ). No painel direito nós mostramos a suscetibilidade magnética como função da temperatura e no detalhe nós destacamos a existência de correções logarítmicas. . . . .	55
3.1	a) Solução numérica $b_1([-15, 15])$ para as equações integrais não-lineares usando o chute inicial $b_j(x) = 0$ . b) Solução numérica para as equações integrais não-lineares usando como chute inicial a solução correta. A linha azul é a solução correta obtida pelas equações de Bethe, $L = 6$ . . . . .	70
3.2	Maior auto-valor $\frac{\log \tilde{\Lambda}(0)}{L}$ vs. $\frac{1}{L^2}$ para $\eta = 0.6$ , $L = 80, 160, \dots, 4000$ . Enquanto o coeficiente linear tende ao valor exato $D_Y(0) + D_\Lambda(0)$ , o coeficiente angular fornece uma aproximação numérica da carga central. . . . .	77
4.1	Pesos de Boltzmann do modelo de seis-vértices. . . . .	82
4.2	Função de partição $Z_N^{FE}$ para $N = 4$ do modelo de seis-vértices com condições de contorno ferroelétrico. Completo congelamento dos graus de liberdade internos. . . . .	99
4.3	Função de partição $Z_N^{DWBC}$ para $N = 5$ do modelo de seis-vértices com condições de contorno domain-wall. . . . .	100
4.4	Função de partição $Z_N^{dDWBC}$ do modelo de seis-vértices com condições de contorno descendente do domain wall. As variáveis $s_i = \uparrow, \downarrow$ ou $\rightarrow, \leftarrow$ carregam uma orientação de flecha e, atrelado a estas, $\bar{s}_i$ carrega a flecha oposta. . . . .	101
4.5	Fusão dos contornos domain wall e ferroelétrico. . . . .	105
4.6	Condições de contorno Néel para $N = 4$ . . . . .	106
4.7	Comparação entre entropias do caso periódico $S_{PBC} = \frac{3}{2} \ln(\frac{4}{3})$ com aproximação de tamanho finito do caso Néel. . . . .	107
4.8	Função de partição $Z_N^{NE-FE}$ para $N = 6$ e $n = 4$ na qual as condições de contorno é dada por uma fusão das condições do tipo Néel e ferroelétrico. O número $n$ define a tamanho linear ocupado pela parte Néel. . . . .	110
4.9	Entropia “finita” da fusão Néel-Ferroelétrico vs. o número $n$ que define a proporção das duas condições de contorno. O tamanho linear é fixo em $N = 20$ . Note a variação gradual dos valores de entropia. . . . .	111

4.10	Diferença de entropias “finitas” da fusão Néel-ferroelétrico vs. comprimento linear $N$ . Os números de proporção são $n_{<} = \lfloor \frac{N}{2} \rfloor$ e $n_{>} = n_{<} + 1$ . . . . .	111
B.1	Fase I: Fase metálica comensurável antiferromagnética comensurável: $\frac{\ln b}{\beta}$ possui um mar de Dirac e $\frac{\ln c}{\beta}$ possui um mar de Dirac invertido. a) $H = 0$ , $\theta = 0.2$ , $n = 0.2$ , b) $H = 0$ , $\theta = 5$ , $n = 0.2$ , c) $H = 0.25$ , $\theta = 2$ , $n = 0.3$ d) $H = 3$ , $\theta = 0.2$ , $n = 0.8$ . . . . .	123
B.2	Fase II: Fase metálica incomensurável antiferromagnética comensurável; $\frac{\ln b}{\beta}$ possui um mar de Dirac e $\frac{\ln c}{\beta}$ possui dois mares de Dirac invertidos. a) $H = 0$ , $\theta = 5$ , $n = 0.8$ , b) $H = 0.25$ , $\theta = 2$ , $n = 0.6$ . . . . .	124
B.3	Fase III: Fase isolante antiferromagnética comensurável; $\frac{\ln b}{\beta}$ possui um mar de Dirac e $\frac{\ln c}{\beta}$ apenas toca a linha $y = 0$ por baixo. a) $H = 0$ , $\theta = 5$ , $n \rightarrow 1$ , b) $H = 3$ , $\theta = 0.2$ , $n \rightarrow 1$ c) $H = 0.25$ , $\theta = 0.2$ , $n \rightarrow 1$ . . . . .	124
B.4	a) Fase IV: Fase metálica comensurável antiferromagnética incomensurável; $\frac{\ln b}{\beta}$ possui dois mares de Dirac e $\frac{\ln c}{\beta}$ possui um mar de Dirac invertido; $H = 0.25$ , $\theta = 5$ , $n = 0.25$ . b) Fase V: Fase metálica incomensurável antiferromagnética incomensurável; $\frac{\ln b}{\beta}$ possui dois mares de Dirac e $\frac{\ln c}{\beta}$ possui dois mares de Dirac invertidos; $H = 0.25$ , $\theta = 5$ , $n = 0.6$ . c) Fase VI: Fase isolante antiferromagnética incomensurável: $\frac{\ln b}{\beta}$ possui dois mares de Dirac invertidos e $\frac{\ln c}{\beta}$ apenas toca a linha $y = 0$ por baixo; $H = 0.25$ , $\theta = 5$ , $n \rightarrow 1$ . . . . .	125
B.5	Fase VII: Fase metálica comensurável ferromagnética: $\frac{\ln b}{\beta}$ possui um mar de Dirac e $\frac{\ln c}{\beta}$ está completamente acima da linha $y = 0$ ; a) $H = 0.25$ , $\theta = 0.2$ , $n = 0.1$ , b) $H = 3$ , $\theta = 0.2$ , $n = 0.2$ , c) $H = 3$ , $\theta = 5$ , $n = 0.075$ d) $H = 4.5$ , $\theta = 0.2$ , $n = 0.2$ . . . . .	126
B.6	Fase VIII: Fase metálica incomensurável ferromagnética: $\frac{\ln b}{\beta}$ possui dois mares de Dirac e $\frac{\ln c}{\beta}$ está completamente acima da linha $y = 0$ . a) $H = 0.25$ , $\theta = 5$ , $n = 0.25$ , b) $H = 3$ , $\theta = 5$ , $n = 0.2$ , c) $H = 4.5$ , $\theta = 5$ , $n = 0.2$ . . . . .	126

B.7	Fase IX: Fase isolante ferromagnética: $\frac{\ln b}{\beta}$ apenas toca a linha $y = 0$ por cima e $\frac{\ln c}{\beta}$ está completamente abaixo da linha $y = 0$ ; a) $H = 3, \theta = 5, n \rightarrow 1$ , b) $H = 4.5, \theta = 0.2, n \rightarrow 1$ . . . . .	127
B.8	Fase X: Fase de densidade nula $n = 0$ ; $\frac{\ln b}{\beta}$ toca a linha $y = 0$ por baixo quando $x \rightarrow \pm\infty$ enquanto $\frac{\ln c}{\beta}$ está completamente acima: a) $H = 0, \theta = 0.2, n \rightarrow 0$ , b) $H = 0.25, \theta = 5, n \rightarrow 0$ , c) $H = 3, \theta = 5, n \rightarrow 0$ d) $H = 4.5, \theta = 0.2, n \rightarrow 0$ . . . . .	127
D.1	Distribuição de raízes de Bethe para o maior auto-valor no setor $L/2$ com $L = 26$ . Existe um pequeno desvio do padrão $L/2$ -string . . . . .	133

# Lista de Tabelas

2.1	Classificação das fases . . . . .	43
3.1	Fluxo de Bäcklund. Denotamos $Q_4(\lambda) = \phi(\lambda)$ e $\bar{Q}_j(\lambda) = Q_j(\lambda - j)$ . . . . .	64
4.1	Maior elemento de $M_{N,L}$ para $\Delta < -1$ . . . . .	91
4.2	Número de dígitos do número de configurações para uma rede quadrada de tamanho $N$ e sob condições de contorno tipo Néel. . . . .	108
D.1	Raízes de Bethe para $a = 2.1$ , $b = 0.7$ , $c = 0.62$ . . . . .	132
F.1	Número de configurações para as condições de contorno do tipo Néel. . . . .	137

# Capítulo 1

## Introdução

O advento da mecânica estatística possibilitou o estudo dos sistemas macroscópicos, em que a mecânica de um aglomerado de objetos elementares traduz, de algum modo, os efeitos observados em uma escala maior. Neste contexto, tão importante quanto encontrar os objetos mais elementares a partir dos quais se poderia descrever a mecânica de todo o Universo (teoria do tudo), é saber como cada nível da hierarquia revela a física do nível seguinte[1, 2].

Para esta finalidade surgiram vários métodos, entre os quais podemos mencionar: os métodos perturbativos e de campo médio[3, 4], os métodos associados ao grupo de renormalização[5], a bosonização[6, 7], os modelos ditos exatamente solúveis[8] ou integráveis[8, 9], embora ainda não se tenha uma abordagem capaz de abarcar todos os problemas. Neste trabalho, exploramos particularmente a integrabilidade de determinados modelos, o que permite estudar suas propriedades físicas exatamente.

A história destes modelos data de muito tempo, pois que a simplificação sempre fez parte do pensamento científico para entender os intrincados fenômenos da natureza. Contudo, podemos eleger os modelos de Ising[10] e de Heisenberg[11] como o primeiro modelo estatístico clássico e o primeiro modelo quântico, respectivamente, a equilibrar a simplicidade das interações e a complexidade do número de constituintes na descrição do comportamento magnético da matéria.

Se o primeiro foi resolvido em uma dimensão pelo próprio Ising, Bethe resolve o segundo[12] também numa cadeia unidimensional. A solução de Bethe inaugurou uma

nova técnica, o chamado ansatz de Bethe, em que as amplitudes de espalhamento de três ou mais partículas é fatorizável em termos da amplitude de espalhamento de duas partículas. O que ressalta desta solução é a necessidade de se resolver um conjunto transcendental de equações para  $n$  números complexos, as raízes de Bethe.

Mais adiante, Krammers e Wannier estabelecem o método da matriz de transferência, numa tentativa de obter a energia-livre do modelo de Ising em duas dimensões[13]. Esta construção já indicava uma possível relação entre modelos estatísticos clássicos em  $D + 1$  dimensões e modelos quânticos em  $D$  dimensões, já que o cálculo da função de partição havia se convertido em um problema de diagonalização. Mas, além disso, de seus estudos vislumbra-se a possibilidade de um ponto crítico, supostamente a temperatura de Curie.

Em 1944 Onsager resolve, de fato, o modelo de Ising em duas dimensões[14], confirmando a conjectura de Krammers e Wannier. Importa considerar nesta solução o primeiro exemplo incontestado da viabilidade das transições de fase clássicas de dentro do arcabouço da mecânica estatística; no caso uma transição contínua.

Além do modelo de Ising, surgem outros modelos estatísticos clássicos, entre os quais encontraremos os modelos de vértices. Em particular, o modelo de seis-vértices é utilizado no cálculo da entropia residual do gelo[15] e no estudo das propriedades ferroelétricas do composto  $KH_2PO_4$ [16].

Abordando o problema da entropia residual do gelo, Lieb utiliza o método da matriz de transferência e uma adaptação do ansatz de Bethe[17] para resolvê-lo sob condições periódicas de contorno[18]. Notou-se o mesmo ansatz para os auto-vetores de dois problemas aparentemente distintos, o modelo de Heisenberg com anisotropia uniaxial e a matriz de transferência do modelo de seis-vértices. Após esta descoberta, finalmente foi mostrado a comutatividade entre matriz de transferência e Hamiltoniano[19].

Em 1972, Baxter diagonaliza simultaneamente a matriz de transferência do modelo de oito-vértices e o modelo de Heisenberg completamente anisotrópico[20]. Todavia, o que perpassa em sua solução é a existência de um parâmetro espectral (ou se quisermos de uma parametrização), tal que sua serventia é tão somente modificar o espectro da matriz de transferência. Desta forma, existiria um conjunto universal de auto-vetores para as matrizes de transferência com diferentes parâmetros espectrais, garantindo a comutatividade das mesmas.

A condição encontrada por Baxter para a comutatividade das matrizes de transferência[20] foi reconhecida como ponto de apoio comum na solução de outros problemas precedentes, em particular na fatorização de três ou mais partículas no ansatz de Bethe para o gás de Fermi interagente[21]. Hoje tal condição é a chamada equação de Yang-Baxter e configura um critério de integrabilidade que reaproxima o conceito impreciso de integrabilidade quântica com o conceito preciso de integrabilidade clássica, pelas vias da prescrição de Dirac. Notoriamente, questões como independência de cargas conservadas e método de resolução no caso quântico ainda não possuem bases firmes, embora para o último tenhamos no ansatz de Bethe um grande expoente, nas suas variadas expressões.

Contudo, faltava ainda o elo que ligaria a condição de integrabilidade oriunda da equação de Yang-Baxter e o processo de diagonalização da matriz de transferência pelo ansatz de Bethe. Após algum tempo, a escola de Leningrado elucidou parcialmente esta questão. Da chamada relação fundamental resulta a álgebra de Yang-Baxter e, por conseguinte, uma versão algébrica do ansatz de Bethe[22]. Com isto, a equação de Yang-Baxter, a comutatividade das matrizes de transferência e o ansatz de Bethe passam a ser entendidos numa perspectiva unificada. Ademais, este desenvolvimento permitiu a obtenção de novos modelos integráveis, em particular, os modelos invariantes pelas super-álgebras  $su(l|r)$ [23] e  $osp(l|2r)$ [24] e as representações não fundamentais dos modelos invariantes pela álgebra  $su(2)$ [25].

Entre estes desenvolvimentos, outros empenhos eram realizados no sentido de obter propriedades termodinâmicas dos modelos quânticos, uma vez que, se para os modelos clássicos bastava o maior auto-valor para determinar a energia-livre no limite termodinâmico, para as cadeias quânticas ainda restava somar os pesos de Boltzmann da função de partição. E as primeiras iniciativas neste quesito nada mais fizeram que catalogar a distribuição das raízes de Bethe para efetuar diretamente a soma estatística[26, 27, 28], pelo que hoje é conhecido por ansatz de Bethe termodinâmico(TBA). No limite termodinâmico é possível definir densidades para a distribuição de raízes e, no modelo de Heisenberg, vamos ver nascer a chamada hipótese de strings[27, 28]. Desse modo, a minimização do funcional da energia-livre redundava em um conjunto infinito de equações integrais não-lineares cujas variáveis são justamente razões destas distribuições.

Por outro lado, novas perspectivas de aplicação dos modelos integráveis se abriram, se



considerada a invariância conforme dos mesmos na criticalidade[29, 30]. A cada modelo estatístico clássico com interações de curto alcance e com simetria apropriada, ou o correspondente modelo quântico, haveria uma teoria de campos conforme subjacente, cuja classe de universalidade poderia ser obtida a partir do estudo das correções de tamanho finito do primeiro[31, 32]. Havendo integrabilidade, poderíamos utilizar o ansatz de Bethe para calcular estas correções, determinando a carga central e as dimensões anômalas dos campos primários e, por conseguinte, os expoentes críticos.

Os cálculos destas correções de tamanho finito eram, na sua grande maioria, realizadas por métodos numéricos, pois mesmo tendo as equações de Bethe em mãos, era necessário resolver numericamente estas equações para valores grandes mas finitos do tamanho da cadeia<sup>1</sup>. Um avanço neste aspecto foi realizado por Klümper que obteve um conjunto finito de equações integrais não-lineares para determinar o auto-valor[34]. Nestas equações, o número de sítios entra como parâmetro, não modificando o número de incógnitas no problema. Além disso, foi possível obter a carga central do modelo de Heisenberg integrável de spin- $\frac{1}{2}$  e spin-1 analiticamente[34], bem como as dimensões anômalas[35].

Para obter este sistema de equações integrais não-lineares faz-se necessário definir funções auxiliares apropriadas e estudar as propriedades de analiticidade destas e do auto-valor. A observação de que as equações de Bethe transformam os polos do auto-valor, devido às raízes de Bethe, em singularidades removíveis implica que podemos utilizar o teorema de Cauchy para obter vínculos não triviais entre as funções auxiliares, determinando, em última instância, o auto-valor.

Este procedimento também foi utilizado no problema do cálculo das propriedades termodinâmicas[36, 37]. Através do mapeamento de Trotter-Suzuki[38, 39], transforma-se o cálculo da função de partição do modelo quântico na função de partição de um modelo estatístico clássico heterogêneo. Em particular, para os modelos integráveis, é possível definir no novo modelo estatístico uma matriz de transferência diagonalizável por ansatz de Bethe, a chamada matriz de transferência quântica, cujo maior auto-valor permite determinar todas as propriedades termodinâmicas.

O número finito de equações integrais não-lineares constitui um grande mérito desta abordagem, possibilitando não apenas determinar o valor exato da carga central da teoria

---

<sup>1</sup>Devemos excetuar alguns casos em que as raízes de Bethe estão sobre o eixo real, ver [33] por exemplo.

de campos conforme subjacente, como também o cálculo numérico e eficiente das quantidades termodinâmicas a temperatura finita. Isto contrasta fortemente com o sistema infinito advindo do TBA.

Todavia, o grande obstáculo deste método é exatamente como definir as funções auxiliares. Numerosas investigações foram realizadas neste sentido[40, 41, 42, 43, 44, 45, 46], principalmente no que diz respeito às propriedades termodinâmicas das cadeias quânticas, sem fornecer uma forma sistemática de realizá-lo.

Um dos objetivos centrais do nosso trabalho é justamente continuar investigando a formulação de um sistema finito de equações integrais não-lineares para modelos com diferentes simetrias, seja com intuito de calcular propriedades termodinâmicas, seja para determinar as correções de tamanho finito, sempre tendo em vista a formulação sistemática.

É neste propósito que vão surgir os trabalhos[47, 48] em que determinamos equações integrais para as propriedades termodinâmicas de uma generalização de multi-cadeias do modelo t-J integrável[47] e de uma cadeia quântica invariante pela super-álgebra  $osp(1|2)$ [48]. Neste último caso, nós também investigamos as correções de tamanho finito obtendo diferentes cargas centrais associadas à matriz de transferência linha a linha e à matriz de transferência quântica.

Outro problema, que por muito tempo tem sido dado pouca importância, é a investigação da influência das condições de contorno nas propriedades intensivas dos modelos estatísticos clássicos[49, 50, 51, 52, 53].

Embora desde os primórdios da solução do modelo de seis-vértices simétrico tem-se reconhecido condições de contorno com propriedades intensivas diferentes do contorno periódico[54], estas têm sido consideradas exceções à regra, um conjunto de medida nula em relação à esmagadora maioria. Corroborando esta ideia, foi provado que o modelo de seis-vértices sob condições anti-periódicas de contorno na horizontal fornece a mesma energia-livre que o caso periódico[55], bem como uma espécie de condições livres de contorno[56].

Depois de algum tempo, maior atenção foi dada às possíveis diferenças, quando aparecem as condições de contorno do tipo domain-wall[52], propiciando o cálculo exato da função de partição do modelo de seis-vértices em termos de determinante e fornecendo

propriedades intensivas diferentes do caso periódico.

Se na mecânica estatística ainda sim o resultado era deixado em segundo plano, na combinatória enumerativa o mesmo não ocorria. As configurações globais do modelo de seis-vértices numa rede quadrada e com condições de contorno do tipo domain-wall estariam em relação um para um com as matrizes de sinais alternados[57], tornando o primeiro um método de contagem para o segundo.

Além de [52], outras condições de contorno foram consideradas[51] cuja entropia residual se mostraram igual ao caso domain-wall e não ao caso periódico. Três possíveis valores para a entropia residual do modelo de seis-vértices eram conhecidos,  $S_{FE} = 0$ ,  $S_{DW} = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{3^3}{2^4} \right)$  e  $S_{PBC} = \frac{3}{2} \ln \left( \frac{4}{3} \right)$ . Todavia, ainda restava entender se tais condições de contorno constituem, de fato, exceções ou se a influência das condições de contorno era maior do que se podia imaginar, podendo obter valores de entropia diferentes dos que já haviam sido obtidos.

Com este problema em mente, surgiram os trabalhos[49, 50], onde investigamos o modelo de seis-vértices sob uma variedade de condições de contorno, o que inclui: misturas de periodicidade e anti-periodicidade, condições livres de contorno e condições fixas de contorno. Demonstramos a existência de um contínuo de possíveis valores para a entropia e conjecturamos que todos os valores entre 0 e  $S_{PBC}$  são admissíveis.

Sob o título de “Propriedades Físicas de Modelos Integráveis” podemos resumir o propósito desta tese em duas grandes frentes. A primeira é devotada à obtenção de um sistema finito de equações integrais não-lineares, cuja aplicação particular para termodinâmica dos modelos quânticos estruturamos no capítulo 2; e cuja aplicação particular no cálculo das correções de tamanho finito organizamos no capítulo 3. A segunda é destinada ao estudo da influência das condições de contorno nas propriedades intensivas do modelo de seis-vértices, a qual situamos no capítulo 4. Este capítulo introdutório serve de preparação para os capítulos posteriores. No capítulo 5 elaboramos uma breve conclusão.

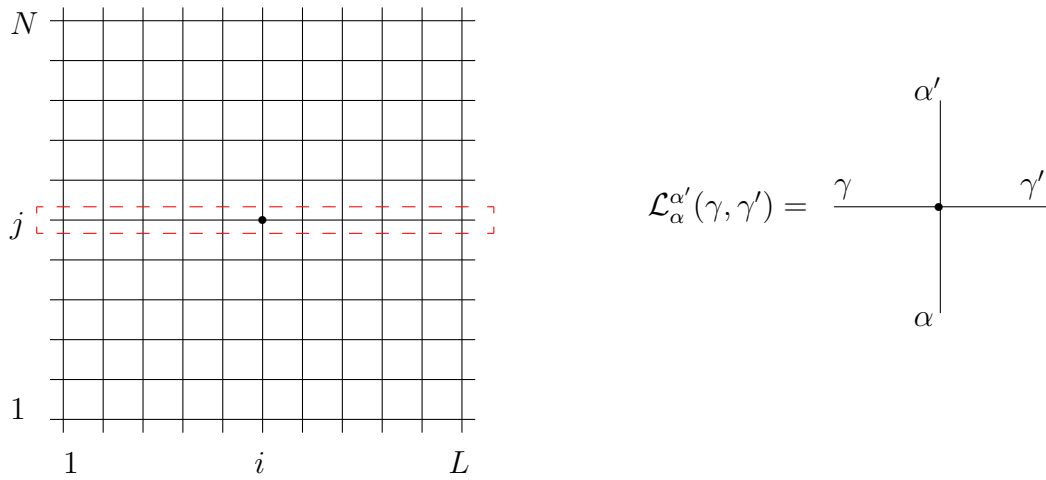
## 1.1 Modelo de vértices

Em uma rede arbitrária de vértices conectados por arestas, denominamos modelo de vértices um modelo estatístico clássico em que uma configuração do sistema fica definida,

uma vez atribuído “valores” aos graus de liberdade, sendo estes situados sobre as arestas. Nesta configuração global, a energia total é a soma das contribuições locais de energia de cada vértice, energia esta que depende tão somente dos graus de liberdade nas arestas a ele anexo.

O cálculo da função de partição de um modelo de vértices revela, na sua generalidade, um problema combinatorial demasiadamente complicado, uma vez que cada aresta conecta dois vértices e vincula suas contribuições locais de energia, o que se estende sobre a geometria da rede de maneira não trivial.

Entendendo a complexidade do objeto em análise, constitui uma simplificação útil restringir-nos às redes que exibem certa invariância por translação, como uma rede retangular. A Figura 1.1 representa a referida rede e o vértice com sua contribuição local de energia, ou peso de Boltzmann, segundo a configuração das arestas adjacentes.



$$\mathcal{L}_\alpha^{\alpha'}(\gamma, \gamma') = \begin{array}{c} \alpha' \\ | \\ \bullet \\ | \\ \alpha \end{array} \quad \begin{array}{c} \gamma \\ | \\ \bullet \\ | \\ \gamma' \end{array}$$

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

Para calcular a função de partição, multiplicamos os pesos de Boltzmann de todos os vértices, e somamos sobre os possíveis valores que cada um dos graus de liberdade nas arestas pode assumir, resultando na expressão

$$Z = \sum_{\langle \alpha \rangle} \sum_{\langle \gamma \rangle} \prod_{i=1}^L \prod_{j=1}^N \mathcal{L}_{\alpha_i^j}^{\alpha_i^{j+1}}(\gamma_i^j, \gamma_{i+1}^j). \quad (1.1.1)$$

Todavia, a soma acima ainda constitui enorme problema, visto que cada aresta pode admitir um número diferente de possíveis valores que se atribui aos graus de liberdade.

Além disso, mesmo quando dois vértices estão circundados por arestas de mesmo tipo, é possível atribuir contribuição local de energia diferente para configurações locais equivalentes. Disto resulta que o problema continua dependendo de um número demasiadamente grande de dados iniciais, que são as energias de cada vértice para cada possível configuração das respectivas arestas.

Se quisermos tornar o problema tratável, é necessário diminuir a quantidade de dados iniciais, que a princípio é tão grande quanto à própria rede. Uma das formas mais simples de se fazer isto é assumir que todas as arestas são de mesmo tipo, possuindo o mesmo número de possibilidades para atribuição do grau de liberdade; e que, além disso, vértices em configurações equivalentes contribuem com o mesmo peso de Boltzmann. Assim sendo, a função de partição (1.1.1) tem que ser função de apenas um número limitado de dados iniciais, mais especificamente  $q_d^4$  pesos de Boltzmann, os tamanhos lineares  $N$  linhas e  $L$  colunas, e as condições de contorno.

As condições de contorno são definidas em termos das arestas externas, podendo ser fixa (grau de liberdade fixado a um valor qualquer), livre (soma sobre todas as possibilidades deste grau de liberdade), correlata (soma vinculada dos graus de liberdade em arestas exteriores) ou combinação destas três. As condições de contorno mais simples são as condições periódicas de contorno, espécie de condição correlata em que as arestas externas opostas recebem o mesmo valor do grau de liberdade e são somadas sobre todos os possíveis valores. Disto resulta a completa simetria de translação pelos vetores de rede, tornando todos os vértices equivalentes e fazendo o problema adquirir geometria toroidal. Com estas condições de contorno mais simples, veremos como o problema combinatorial pode ser transformado em um problema algébrico de diagonalização.

Notemos que a ordem pela qual a soma sobre os graus de liberdade é realizada não influi no resultado final da função de partição, motivo pelo qual podemos adotar uma ordem particular de soma. Somando primeiramente sobre os graus de liberdade na direção “horizontal”, podemos definir um objeto que fornece o peso de Boltzmann de todos os vértices em uma dada linha, mas, para isto, é necessário que atribuamos os graus de liberdade anexos remanescentes, isto é, aqueles associados às arestas “verticais” de cada

vértice. Em outras palavras, o peso estatístico de uma linha é dado por

$$T_{\vec{\alpha}^j}^{\vec{\alpha}^{j+1}} = T_{\alpha_1^j, \dots, \alpha_L^j}^{\alpha_1^{j+1}, \dots, \alpha_L^{j+1}} = \sum_{\langle \gamma^j \rangle} \prod_{i=1}^L \mathcal{L}_{\alpha_i^j}^{\alpha_i^{j+1}}(\gamma_i^j, \gamma_{i+1}^j). \quad (1.1.2)$$

Uma vez que cada aresta vertical é independente, podemos identificar o peso (1.1.2) de uma linha como sendo o elemento de matriz de um operador que atua no espaço  $\bigotimes_{j=1}^L V_j$ , sendo cada  $V_j$  um espaço vetorial isomorfo a  $\mathbb{C}^{q_d}$  associado à  $j$ -ésima aresta vertical. E cada linha de vértices sendo equivalente, contribuirá igualmente com o peso (1.1.2), distinguindo-se apenas pelos índices do elemento de matriz, determinando que o peso da linha imediatamente inferior possua índices superiores iguais aos índices inferiores do peso da linha imediatamente superior, do que resulta o produto de matrizes

$$Z = \sum_{\{\alpha\}} T_{\vec{\alpha}^1}^{\vec{\alpha}^2} T_{\vec{\alpha}^2}^{\vec{\alpha}^3} \dots T_{\vec{\alpha}^{N-1}}^{\vec{\alpha}^N} = \text{tr } T^N. \quad (1.1.3)$$

O cálculo do traço acima pode ser realizado diagonalizando o operador  $T$ , que denominamos matriz de transferência linha a linha. De posse dos  $q_d^L$  auto-valores, a função de partição pode ser expressa de maneira exata na forma

$$Z = \sum_{j=1}^{q_d^L} \Lambda_j^N = g \Lambda_{\max}^N \left[ 1 + \frac{1}{g} \sum_{j \neq \max} \left[ \frac{\Lambda_j}{\Lambda_{\max}} \right]^N \right], \quad (1.1.4)$$

mas que, para efeito do cálculo da energia-livre no limite termodinâmico, é suficiente sabermos apenas o maior auto-valor,

$$-\beta f = \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{NL} \log Z = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \log \Lambda_{\max}. \quad (1.1.5)$$

A degenerescência  $g$  do maior auto-valor não contribui neste limite, uma vez que  $1 \leq g \leq q_d^L$  e independe de  $N$ .

Contudo, o problema formulado acima não revela completamente a sua característica local do ponto de vista algébrico. Resta ainda explicitar como a matriz de transferência  $T$  depende dos pesos locais. De fato,  $T$  é um produto de pesos de Boltzmann, cada qual possuindo graus de liberdade verticais independentes, mas com graus de liberdade horizontais correlatos, em que o peso de Boltzmann imediatamente à esquerda compartilha uma aresta com o peso imediatamente à direita, o que pode ser representado por um produto matricial.

Definamos, portanto, o operador de Lax  $\mathcal{L}_{A_j}$  que atua no espaço horizontal  $A$ , isto é, pertence a  $End[\mathbb{C}^{q_d} \otimes \mathbb{C}^{q_d}]$ , mas cujos elementos de matriz pertencem a  $\bigotimes_{j=1}^L V_j$ , de modo que cada um dos elementos de matriz atue não trivialmente apenas na  $j$ -ésima cópia do espaço vertical

$$\mathcal{L}_{A_j} = \begin{bmatrix} W_j(1,1) & W_j(1,2) & \dots & W_j(1,q_d) \\ W_j(2,1) & W_j(2,2) & \dots & W_j(2,q_d) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ W_j(q_d,1) & W_j(q_d,2) & \dots & W_j(q_d,q_d) \end{bmatrix}, \quad (1.1.6)$$

sendo,

$$W_j(\gamma, \gamma') = \sum_{\alpha, \alpha'=1}^{q_d} \mathcal{L}_{\alpha'}^{\alpha}(\gamma, \gamma') \text{Id} \otimes \dots \otimes \text{Id} \otimes \underbrace{e_{\alpha, \alpha'}}_j \otimes \text{Id} \dots \otimes \text{Id}, \quad [e_{\alpha, \alpha'}]_{\beta, \beta'} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha'\beta'}. \quad (1.1.7)$$

Se a rede tivesse um sítio apenas, este operador seria imediatamente identificado com os possíveis pesos de Boltzmann do problema, segundo a seguinte disposição de elementos

$$W(\gamma, \gamma') = \begin{bmatrix} \mathcal{L}_1^1(\gamma, \gamma') & \mathcal{L}_1^2(\gamma, \gamma') & \dots & \mathcal{L}_1^{q_d}(\gamma, \gamma') \\ \mathcal{L}_2^1(\gamma, \gamma') & \mathcal{L}_2^2(\gamma, \gamma') & \dots & \mathcal{L}_2^{q_d}(\gamma, \gamma') \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{L}_{q_d}^1(\gamma, \gamma') & \mathcal{L}_{q_d}^2(\gamma, \gamma') & \dots & \mathcal{L}_{q_d}^{q_d}(\gamma, \gamma') \end{bmatrix}, \quad (1.1.8)$$

entretanto, sendo o número de colunas maior que 1, devemos tensorizar cada elemento de  $\mathcal{L}_{A_j}$ , a fim de que, correspondendo à independência dos espaços verticais na matriz de transferência, possamos escrever

$$T = \text{tr}_A \mathcal{L}_{AL} \dots \mathcal{L}_{A1} = \text{tr}_A \mathcal{T}_A, \quad (1.1.9)$$

transformando o cálculo da matriz de transferência em um traço no espaço horizontal(auxiliar). A matriz  $\mathcal{T}_A$  é a chamada matriz de monodromia.

Convertido o problema combinatorial na diagonalização da matriz de transferência, relacionamos o modelo estatístico clássico em duas dimensões com um problema quântico em uma dimensão. Todavia, a matriz de transferência não constitui um Hamiltoniano propriamente dito, uma vez que multiplicando todos os pesos de Boltzmann de uma linha, esta matriz inclui interações entre todos os sítios e, portanto, produz um operador não local.

Para obter operadores locais, faremos a “hipótese” de regularidade e tomaremos uma espécie de derivada logarítmica, a fim de transformar produto em soma. Inicialmente, imaginemos que os pesos de Boltzmann  $\mathcal{L}_\alpha^{\alpha'}(\gamma, \gamma')$  estejam contidos em um espaço isomorfo a  $\mathbb{C}^{qd^4}$  com topologia usual. Neste espaço, destacaremos a existência de um elemento, chamado de ponto regular, tal que

$$\mathcal{L}^0 = P, \quad (1.1.10)$$

sendo  $P^2 = \text{Id}$  e

$$P_{ik}\mathcal{L}_{ij}P_{ik} = \mathcal{L}_{kj}, \quad \forall \mathcal{L}, \quad (1.1.11)$$

pelo que denota-se, naturalmente, o permutador. Em outras palavras, se tomarmos o ponto regular no espaço dos pesos de Boltzmann, a matriz  $\mathcal{L}$  associada será o permutador. Realizando uma perturbação arbitrária dos pesos de Boltzmann em torno do ponto regular, obteremos em primeira ordem de perturbação:

$$T_0^{-1}\delta T = \sum_{j=1}^L P_{j-1,j} \delta \mathcal{L}_{j-1,j}, \quad (1.1.12)$$

resultando finalmente em um operador local. Todavia, a depender de como a variação  $\delta$  é realizada, a conexão entre Hamiltoniano local e a matriz de transferência será tão somente operacional, visto que os problemas de diagonalização podem ser completamente distintos.

Seria possível realizar tal variação de modo que Hamiltoniano e matriz de transferência possam ser diagonalizados na mesma base?

## 1.2 Integrabilidade

A questão deixada no final da seção anterior nos leva para outra essencialmente mais profunda. Afinal, como diagonalizar a matriz de transferência para valores grandes do número de sítios  $L$ , haja vista o tamanho do espaço de Hilbert em que ela atua?

Um critério que opera como facilitador do processo de diagonalização é encontrar uma família de matrizes comutantes, de modo que, possuindo base de auto-vetores em comum, o conjunto de auto-valores destas matrizes classifica e distingue os auto-vetores. Neste contexto, nós vamos procurar determinados conjuntos formados por elementos no espaço



dos pesos de Boltzmann, tais que todas as matrizes de transferência oriundas de um dado conjunto comutem entre si. Devemos ter

$$[T, T'] = 0, \quad (1.2.1)$$

para dois elementos distintos no referido conjunto que redundam nos operadores de Lax  $\mathcal{L}$  e  $\mathcal{L}'$ .

Uma condição suficiente para que a equação acima seja satisfeita é a existência de uma matriz inversível  $R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}')$  satisfazendo a seguinte propriedade

$$R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}')\mathcal{T}_A\mathcal{T}'_B = \mathcal{T}'_B\mathcal{T}_AR_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}'). \quad (1.2.2)$$

A informação essencial que define a matriz de transferência é o operador de Lax que se repete no espaço tensorizado de  $L$  sítios. Sendo assim, deve ser possível transformar a condição global (1.2.2) em uma condição local. Com efeito, (1.2.2) será satisfeita se

$$R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}')\mathcal{L}_{Aj}\mathcal{L}'_{Bj} = \mathcal{L}'_{Bj}\mathcal{L}_{Aj}R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}'), \quad \forall j. \quad (1.2.3)$$

As equações (1.2.2) e (1.2.3) induzem uma transformação de similaridade que resultam na permutação das matrizes de monodromia ou dos operadores de Lax. Estas permutações resultam em condições de consistência. A mais simples delas se deve ao fato de que, se permutadas duas matrizes de monodromia duas vezes, chegamos à situação inicial, do que resulta que a matriz  $R$  deve satisfazer

$$R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}')R_{BA}(\mathcal{L}', \mathcal{L}) = f(\mathcal{L}, \mathcal{L}')\text{Id}, \quad (1.2.4)$$

relacionando a matriz  $R$  à sua inversa. Esta é a chamada relação de unitariedade.

Prosseguindo com o raciocínio, podemos tomar três matrizes de monodromia  $\mathcal{T}$ ,  $\mathcal{T}'$ ,  $\mathcal{T}''$  e reordenar seu produto através das transformações de similaridade. Observando a associatividade do produto de matrizes, chegaremos à conclusão de que as matrizes  $R$  devem satisfazer a chamada equação de Yang-Baxter[20, 21]

$$R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}')R_{AC}(\mathcal{L}, \mathcal{L}'')R_{BC}(\mathcal{L}', \mathcal{L}'') = R_{BC}(\mathcal{L}', \mathcal{L}'')R_{AC}(\mathcal{L}, \mathcal{L}'')R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}'). \quad (1.2.5)$$

A princípio, poderíamos continuar procurando reordenar um número maior de matrizes de monodromia a fim de encontrar outras relações de consistência. Contudo, observaremos que disto não resulta nenhuma restrição adicional.

Apesar de termos achado condições de consistência para a matriz  $R$ , não temos ainda nenhuma imposição mais explícita sobre o conjunto de pesos de Boltzmann. Todavia, da semelhança entre as equações (1.2.3) e (1.2.5), surgem os chamados modelos fundamentais em que o próprio “intertwiner”  $R$  entre dois pontos da família comutante deve ser também um ponto da família comutante

$$\tilde{\mathcal{L}} = R(\mathcal{L}, \mathcal{L}'), \quad (1.2.6)$$

fornecendo um primeiro conjunto de modelos uma vez resolvida a equação de Yang-Baxter. O impositivo que se faz agora é classificar as soluções de (1.2.4) e (1.2.5), o que constitui uma área ativa da Física-Matemática.

### 1.2.1 Exemplos

Nosso objetivo neste trabalho não é encontrar novas soluções da equação de Yang-Baxter. Entretanto, convém exemplificar algumas soluções como mostras de factibilidade e dar ensejo ao estudo das propriedades termodinâmicas e correções de tamanho finito dos modelos que serão apresentados aqui.

#### Seis-vértices simétrico

Considere a situação em que temos dois possíveis estados para cada grau de liberdade no modelo de vértices,  $q_d = 2$ . Em 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  $+ \leftrightarrow -$  teremos:

$$\mathcal{L}_+^+(+, +) = \mathcal{L}_-^-(-, -) = a, \quad (1.2.7)$$

$$\mathcal{L}_+^+(-, -) = \mathcal{L}_-^- (+, +) = b, \quad (1.2.8)$$

$$\mathcal{L}_-^+(+, -) = \mathcal{L}_+^-(-, +) = c. \quad (1.2.9)$$

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

$$\mathcal{L}_{AB} = \left[ \begin{array}{c} \left[ \begin{array}{cc} a & 0 \\ 0 & b \end{array} \right]_B \\ \left[ \begin{array}{cc} 0 & c \\ 0 & 0 \end{array} \right]_B \\ \left[ \begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & a \end{array} \right]_B \end{array} \right]_A. \quad (1.2.10)$$

Imposta a restrição de modelo fundamental, a unitariedade e a equação de Yang-Baxter implicam em vínculos para estes pesos. A unitariedade implica nas seguintes relações

$$a(\mathcal{L}, \mathcal{L}')a(\mathcal{L}', \mathcal{L}) = b(\mathcal{L}, \mathcal{L}')b(\mathcal{L}', \mathcal{L}) + c(\mathcal{L}, \mathcal{L}')c(\mathcal{L}', \mathcal{L}), \quad (1.2.11)$$

$$b(\mathcal{L}, \mathcal{L}')c(\mathcal{L}', \mathcal{L}) + c(\mathcal{L}, \mathcal{L}')b(\mathcal{L}', \mathcal{L}) = 0. \quad (1.2.12)$$

A Yang-Baxter por sua vez fornece

$$ac'a'' - bc'b'' - ca'a'' = 0, \quad (1.2.13)$$

$$-cc'b'' + (ab' - ba')c'' = 0, \quad (1.2.14)$$

$$cb'a'' - ca'b'' - bc'c'' = 0, \quad (1.2.15)$$

sendo  $\{a, b, c\}$ ,  $\{a', b', c'\}$ , e  $\{a'', b'', c''\}$  pesos dados por  $R(\mathcal{L}, \mathcal{L}')$ ,  $R(\mathcal{L}, \mathcal{L}'')$  e  $R(\mathcal{L}', \mathcal{L}'')$ , respectivamente. 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

$$\frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} = \frac{a'^2 + b'^2 - c'^2}{2a'b'}, \quad (1.2.16)$$

de modo que a quantidade

$$\Delta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab}, \quad (1.2.17)$$

é um invariante que define uma curva algébrica  $(x, y) = (\frac{a}{c}, \frac{b}{c})$ . Em uma dada parametrização em  $\lambda \in \mathbb{C}$ , chamaremos  $\lambda$  de parâmetro espectral, uma vez que a mudança deste parâmetro apenas modifica o espectro, caminhando ao longo da família de matrizes comutantes sem que os auto-estados sejam por isto modificados. Para a curva algébrica definida por (1.2.17), é possível parametrizar os pesos de Boltzmann de maneira tal que o “intertwiner”  $R(\mathcal{L}, \mathcal{L}')$  entre  $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\lambda)$  e  $\mathcal{L}' = \mathcal{L}(\mu)$  dependa da diferença dos parâmetros espectrais. Em outras palavras

$$R(\mathcal{L}, \mathcal{L}') = R(\mathcal{L}(\lambda), \mathcal{L}(\mu)) = \mathcal{L}(\lambda - \mu) = \tilde{\mathcal{L}}. \quad (1.2.18)$$

Soluções deste tipo podem ser geradas para todas as famílias  $\Delta$ 's pelas parametrizações

$$a(\lambda) = 1 \quad b(\lambda) = \frac{\lambda}{1 + \lambda} \quad c(\lambda) = \frac{1}{1 + \lambda} \quad \Rightarrow \Delta = 1, \quad (1.2.19)$$

$$a(\lambda) = 1 \quad b(\lambda) = \frac{\sin(\lambda)}{\sin(\lambda + \gamma)} \quad c(\lambda) = \frac{\sin(\gamma)}{\sin(\lambda + \gamma)} \quad \Rightarrow \Delta = \cos(\gamma), \quad (1.2.20)$$

$$a(\lambda) = 1 \quad b(\lambda) = \frac{\sinh(\lambda)}{\sinh(\lambda + \gamma)} \quad c(\lambda) = \frac{\sinh(\gamma)}{\sinh(\lambda + \gamma)} \quad \Rightarrow \Delta = \cosh(\gamma), \quad (1.2.21)$$

sendo que estamos distinguindo a parametrização (1.2.20) de (1.2.21) uma vez que, na prática, desejamos  $\gamma$  real. Notemos ainda que todas estas soluções possuem a propriedade da regularidade, pois que  $\mathcal{L}(0) = \mathcal{L}^0 = P$ . Em outras palavras, todas as curvas  $\Delta$  possuem o ponto regular em comum, tornando possível derivar um Hamiltoniano local dentro de cada família de matrizes de transferência comutantes. Para isto, a variação  $\delta$  em (1.1.12) é realizada através do parâmetro espectral, que no presente caso resulta em

$$\mathcal{H}(\Delta) = \frac{L}{2} \frac{\dot{a}(0) + \dot{c}(0)}{a(0)} + \frac{1}{2} \frac{\dot{b}(0)}{a(0)} \sum_{j=1}^L [\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \Delta \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z]. \quad (1.2.22)$$

Devemos acrescentar que, para um dado  $\Delta$ , devido à existência de uma variedade integrável unidimensional, o número de matrizes comutantes torna-se infinito. Além das próprias matrizes de transferência, a exemplo de (1.2.22), temos uma série de operadores locais que são cargas conservadas

$$\mathcal{J}^{(n)} = \left( \frac{d^n \ln T(\lambda)}{d\lambda^n} \right)_{\lambda=0}. \quad (1.2.23)$$

## Baxterização da álgebra de Braid

Para dirigir nossos estudos a modelos de diferentes simetrias, devemos ser capazes de encontrar diferentes soluções para a equação (1.2.5). A classificação das soluções desta equação está longe de ser completada, uma vez que esta não foi realizada sequer no caso mais simples em que os espaços  $A$ ,  $B$  e  $C$  têm dimensão 2. Diante desta realidade, convém procurar métodos particulares de solução, entre os quais temos a chamada Baxterização[58].

Assumiremos que a variedade integrável seja unidimensional, do que resulta a possibilidade de parametrizá-la em termos de um único parâmetro  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Além disso, nós vamos nos restringir ao caso em que a matriz  $R$  depende da diferença dos parâmetros espectrais.

Definindo  $\check{R} = PR$ , sendo  $P$  o permutador, podemos escrever (1.2.5) na forma

$$\check{R}_{i+1}(\lambda)\check{R}_i(\lambda + \mu)\check{R}_{i+1}(\mu) = \check{R}_i(\mu)\check{R}_{i+1}(\lambda + \mu)\check{R}_i(\lambda), \quad (1.2.24)$$

sendo que identificamos  $i = AB$ ,  $i + 1 = BC$ . A Baxterização constitui um método de encontrar soluções de (1.2.24) em termos de uma álgebra independente do parâmetro espectral. Por exemplo, consideremos a álgebra de Braid definida por

$$\begin{aligned} B_i^2 &= 1, \\ B_i B_{i+1} B_i &= B_{i+1} B_i B_{i+1}, \\ B_i B_j &= B_j B_i, \quad |i - j| \geq 2. \end{aligned} \quad (1.2.25)$$

Dado um conjunto de operadores  $B_i$  que satisfazem a álgebra de Braid, podemos propor uma solução de (1.2.24) na forma  $\check{R}_i(\lambda) = 1 + f(\lambda)B_i$ . Este ansatz é de fato uma solução se a função  $f(\lambda)$  satisfizer a equação funcional

$$f(\lambda + \mu) = f(\lambda) + f(\mu). \quad (1.2.26)$$

A solução desta equação funcional pode ser facilmente obtida e é dada por  $f(\lambda) = \eta\lambda$ ,  $\eta \in \mathbb{C}$  uma constante arbitrária. Logo, obtemos uma solução de (1.2.24) na forma

$$\check{R}_i(\lambda) = \frac{1 + \eta\lambda B_i}{1 + \eta\lambda}, \quad (1.2.27)$$

sendo que normalizamos a solução pelo fator  $1 + \eta\lambda$ .

Para concretizar a solução, precisamos ainda encontrar representações para álgebra de Braid. Mesmo depois de todas as simplificações, ainda temos um grande problema, pois que também não se conhece a completa classificação das soluções desta álgebra. Podemos procurar soluções com várias estruturas. Uma delas é aquela em que os elementos não nulos são os mesmos do permutador  $P$ . Disto resultam as soluções da forma

$$B = \sum_{j=1}^{q_d} (-1)^{p_j} e_{jj} \otimes e_{jj} + \sum_{i < j}^{q_d} (c_{ij} e_{ij} \otimes e_{ji} + c_{ij}^{-1} e_{ji} \otimes e_{ij}), \quad (1.2.28)$$

sendo  $p_j = 0, 1$ ;  $e_{ij}$  as matrizes da base de Weyl,  $q_d$  a dimensão do subespaço local, e as constantes  $c_{ij}$ ,  $i < j$ , arbitrárias. Como vemos, se escolhermos  $q_d = 2$ ,  $c_{ij} = 1$  e  $p_j = 0$ , teremos o permutador usual, resultando na  $R$  do seis-vértices. No caso  $q_d = l$ ,  $c_{ij} = 1$  e

$p_j = 0$ , temos modelos invariantes pela representação fundamental da álgebra  $su(l)$ , isto é

$$[R(\lambda), \Gamma(g) \otimes \text{Id} + \text{Id} \otimes \Gamma(g)], \quad (1.2.29)$$

sendo  $g \in su(l)$  e  $\Gamma$  a representação fundamental. Em particular, quando  $l = 2$  encontramos a solução do modelo de seis-vértices simétrico com  $\Delta = 1$ . Por outro lado, as soluções (1.2.28) com  $c_{ij} = \pm 1$  estão relacionadas com soluções da Yang-Baxter graduada invariantes por super-álgebra  $su(l|r)$ , como veremos posteriormente.

### Baxterização da álgebra de Braid-Monoid

Soluções invariantes pela super-álgebra orto-simplética podem ser obtidas por Baxterização da álgebra Braid-Monoid. Esta álgebra possui um conjunto de geradores,  $B_i, E_i$  que satisfazem as seguintes relações

$$B_i B_i = \text{Id}; \quad B_i B_{i+1} B_i = B_{i+1} B_i B_{i+1}; \quad B_i B_j = B_j B_i \quad (|j - i| > 2), \quad (1.2.30)$$

$$E_i E_i = q E_i; \quad E_{i\pm 1} E_i E_{i\pm 1} = E_{i\pm 1}; \quad E_i E_j = E_j E_i \quad (|j - i| > 2), \quad (1.2.31)$$

$$E_i B_i = B_i E_i = t E_i; \quad E_i B_{i\pm 1} B_i = B_{i\pm 1} B_i E_{i\pm 1} = E_i E_{i\pm 1}, \quad t = \pm 1. \quad (1.2.32)$$

Propondo  $\check{R} \propto (\text{Id} + f(\lambda)B + h(\lambda)E)$  em (1.2.24), encontramos uma solução da Yang-Baxter se as funções  $f(\lambda)$  e  $h(\lambda)$  satisfizerem o seguinte sistema de equações funcionais

$$f(\lambda + \mu) = f(\lambda) + f(\mu), \quad (1.2.33)$$

$$f(\lambda)h(\lambda + \mu) - f(\lambda + \mu)h(\lambda) = f(\mu)h(\lambda)h(\lambda + \mu), \quad (1.2.34)$$

$$\begin{aligned} h(\lambda + \mu) = h(\lambda) + h(\mu) + qh(\lambda)h(\mu) + h(\lambda)h(\lambda + \mu)h(\mu) + \\ + t(f(\mu)h(\lambda) + h(\mu)f(\lambda) + h(\lambda)h(\mu)f(\lambda + \mu)). \end{aligned} \quad (1.2.35)$$

A solução destas equações é dada por  $f(\lambda) = \lambda$ ,  $h(\lambda) = \frac{\lambda}{\frac{2}{2t} - \lambda}$ . Em particular, a representação dos geradores que nos levam a uma solução invariante pela super-álgebra  $osp(1|2)$ [24], possui  $q = -1$ ,  $t = 1$ ,  $B = P^g$  com graduação  $\{p(1), p(2), p(3)\} = \{1, 0, 1\}$ . Desta forma, temos a seguinte solução

$$\check{R} = \left(\frac{3}{2} - \lambda\right) \text{Id} + \lambda \left(\frac{3}{2} - \lambda\right) P^g + \lambda E, \quad (1.2.36)$$

sendo  $P^g$  o permutador graduado e  $E$  o operador de Temperly-Lieb cujas representações são dadas por[59]

$$P^g = \sum_{i,j=1}^3 (-1)^{p(i)p(j)} e_{ij} \otimes e_{ji}, \quad E = \sum_{i,j=1}^3 (-1)^{\delta_{i3} + \delta_{j1}} e_{ij} \otimes e_{4-i \ 4-j}. \quad (1.2.37)$$

Para que os modelos sejam invariantes por super-álgebra, de fato, é necessário definir graduação nos espaços lineares. Faremos uma breve introdução a este tópico na seção seguinte, visto que parte de nossos resultados se referem a modelos com este tipo de simetria.

### 1.3 Super-Matrizes e Equação de Yang-Baxter Graduada

A compreensão quantitativa de vários fenômenos na natureza sempre ganhou substancial contribuição quando da generalização dos “números”. Dos naturais aos inteiros e aos racionais, dos racionais aos irracionais e aos reais até o corpo dos complexos. Sucessivamente vimos aparecer o conceito dos negativos e dos números fracionários, do “contínuo”, e a última generalização mencionada abarca o chamado Teorema Fundamental da Álgebra, o que estabelece a existência de pelo menos uma raiz das equações polinomiais (de grau maior ou igual 1) dentro do corpo dos complexos.

Além destes números, hoje bem conhecidos, a matemática tem criado outras possibilidades as quais acadêmicos mais interessados em explicar fenômenos naturais nem sempre mostraram interesse. Acontece que a natureza pode ser mais bem descrita se explorarmos mais amplamente todos os aparatos e estruturas teóricas disponíveis. Não é possível conceber uma formulação de integrais de trajetória, em termos de estados coerentes, quando os campos são fermiônicos. Os auto-valores dos operadores de destruição neste caso não podem comutar entre si, o que já exige outra estrutura algébrica. A generalização indispensável encontrou suporte no que hoje chamamos de álgebra exterior ou de Grassmann[60].

A diferença primordial desta nova álgebra  $B$ , é a existência de um conjunto de geradores  $\eta_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  que satisfazem a relação

$$1 \cdot \eta_i = \eta_i \cdot 1, \quad \eta_i \eta_j = -\eta_j \eta_i. \quad (1.3.1)$$

Com isto notamos que  $\eta_j^2 = 0$  e todo número  $\eta$  desta álgebra pode ser escrito como um polinômio de grau menor ou igual a  $n$ . Por exemplo, se  $n = 2$ ,

$$\eta = \alpha + \alpha_1\eta_1 + \alpha_2\eta_2 + \alpha_{12}\eta_1\eta_2, \quad (1.3.2)$$

sendo  $\alpha, \alpha_1, \alpha_2$  e  $\alpha_{12}$  números complexos. Um estudo mais completo e rigoroso desta álgebra pode ser encontrado em [60]. Aqui nos limitaremos a observar que esta estrutura algébrica possui graduação  $Z_2$ . Isto significa que todo elemento desta álgebra pode ser escrito como soma de elementos pertencentes a dois subespaços, aqui denotados por  $\mathbb{C}B_{n_0}$  e  $\mathbb{C}B_{n_1}$ , onde um elemento  $\eta$  de  $\mathbb{C}B_{n_k}$  e um elemento  $\eta'$  de  $\mathbb{C}B_{n_{k'}}$  satisfazem a relação

$$\eta\eta' = (-1)^{kk'}\eta'\eta. \quad (1.3.3)$$

Devido a (1.3.3), dizemos que  $B$  é uma super-álgebra comutativa. Todo número na álgebra de Grassman pode ser escrito como soma de um elemento par, pertencente a  $\mathbb{C}B_{n_0}$ , e um elemento ímpar, pertencente a  $\mathbb{C}B_{n_1}$ . Elementos pertencentes a apenas um destes subespaços são chamados de elementos homogêneos.

Nós também podemos introduzir graduação em espaços vetoriais. Dizemos que um espaço vetorial  $V$  possui graduação  $Z_2$  se este puder ser escrito como soma direta de subespaços  $V_0 \oplus V_1$ , tais que existe uma função  $p(x)$  atuando em  $V_0 \cup V_1$  da seguinte forma

$$\begin{aligned} p(x) &= 0, & \text{se } x \in V_0 \text{ (elemento par),} \\ p(x) &= 1, & \text{se } x \in V_1 \text{ (elemento ímpar).} \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

Note que a função de paridade ou graduação,  $p$ , atua apenas nos elementos homogêneos do espaço  $V$ . Se os espaços  $V_0$  e  $V_1$  possuem dimensão  $l$  e  $r$ , respectivamente, então escrevemos a dimensão do espaço  $V$  como  $\dim V = (l|r)$ . Assim, nós podemos escolher uma base de elementos homogêneos de  $V$  tais que  $e_1, \dots, e_l \in V_0$  e  $e_{l+1}, \dots, e_{l+r} \in V_1$ . Os coeficientes da expansão  $x = \sum_{j=1}^{l+r} e_j x_j$  podem ser escolhidos como elementos da álgebra de Grassman, isto é,  $V$  é um  $B$ -módulo a direita.

Uma vez definido o espaço vetorial graduado  $V$ , podemos abordar graduação no espaço das transformações lineares atuando em  $V$ . Uma transformação linear em  $V$  pode ser representada na referida base homogênea na forma de matriz

$$F(x) = F\left(\sum_j e_j x_j\right) = \sum_j F(e_j)x_j = \sum_{ij} e_i F_{ij}x_j, \quad (1.3.5)$$



onde mais uma vez  $F_{ij}$  pertence à álgebra de Grassman. Ao espaço das matrizes nós introduzimos graduação da seguinte forma. Primeiro prescrevemos graduação para linhas e colunas da matriz tal que  $p_i = p(e_i)$  e  $p_j = p(e_j)$ , então a graduação da matriz, ou operador,  $F$ , é definido por

$$p(F) = p_i + p_j + p(F_{ij}). \quad (1.3.6)$$

Note que a definição acima já indica quais são as matrizes homogêneas, pois que a definição da paridade de  $F$  deve ser independente das linhas  $i$  e  $j$ . Além disso, estamos adotando a convenção de que toda soma de paridades é reduzida módulo 2.

Com estas definições, estamos aptos a derivar a equação de Yang-Baxter graduada[23]. A equação de Yang-Baxter tradicional pode ser obtida impondo a associatividade da álgebra de Zamolodchikov, sob hipótese de independência dos monômios de terceiro grau dos geradores[61]. Isto é, seja  $E_b(\mathcal{L})$  os geradores da álgebra de Zamolodchikov, e as relações de “comutação”

$$E_b(\mathcal{L})E_c(\mathcal{L}') = \sum_{\alpha\beta} R_{bc}^{\alpha\beta}(\mathcal{L}, \mathcal{L}')E_\beta(\mathcal{L}')E_\alpha(\mathcal{L}), \quad (1.3.7)$$

a associatividade da álgebra se traduz na equação

$$\sum_{\alpha\beta\gamma} R''_{bc}{}^{\alpha\beta} R'_{a\beta}{}^{\gamma c_2} R_{\gamma\alpha}{}^{a_2 b_2} = \sum_{\alpha\beta\gamma} R_{ab}^{\alpha\beta} R'_{\alpha c}{}^{a_2 \gamma} R''_{\beta\gamma}{}^{b_2 c_2}, \quad (1.3.8)$$

que é a versão em índices da equação (1.2.5). Novamente estamos adotando a convenção  $R = R(\mathcal{L}, \mathcal{L}')$ ,  $R' = R(\mathcal{L}, \mathcal{L}'')$  e  $R'' = R(\mathcal{L}', \mathcal{L}'')$ . Agora, vamos considerar uma álgebra de Zamolodchikov graduada com geradores homogêneos, isto é, possuem paridade dada por  $p(E_a(\mathcal{L})) = p(a)$ . Trocando relações de comutatividade por super-comutatividade(veja (1.3.3)), temos

$$E_b(\mathcal{L})E_c(\mathcal{L}') = (-1)^{p(b)p(c)} \sum_{\alpha\beta} R_{bc}^{\alpha\beta}(\mathcal{L}, \mathcal{L}')E_\beta(\mathcal{L}')E_\alpha(\mathcal{L}), \quad (1.3.9)$$

onde nos restringimos a números  $R_{ab}^{cd}$  em  $\mathbb{C}B_{n_0}$  e a matriz  $R$  é par,  $p(R) = 0$ . Destas restrições segue que os elementos não nulos de  $R$  são tais que  $p(a) + p(b) + p(c) + p(d) = 0$ . Impondo a associatividade e assumindo a independência dos monômios de terceiro grau

em  $E_a(\mathcal{L})$ , encontramos a equação de Yang-Baxter graduada em índices[23]

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta\gamma} (-1)^{p(b)p(c)+p(a)p(\beta)+p(\gamma)p(\alpha)} R''^{\alpha\beta}_{bc} R''^{\gamma c_2}_{a\beta} R''^{a_2 b_2}_{\gamma\alpha} = \\ = \sum_{\alpha\beta\gamma} (-1)^{p(a)p(b)+p(\alpha)p(c)+p(\gamma)p(\beta)} R^{\alpha\beta}_{ab} R'^{a_2\gamma}_{\alpha c} R''^{b_2 c_2}_{\beta\gamma}. \end{aligned} \quad (1.3.10)$$

Olhando para (1.3.10), é fácil perceber um subconjunto de soluções onde  $R_{ab}^{cd}$  são números complexos. Dada uma solução  $\bar{R}$  de (1.3.8), uma solução de (1.3.10) é obtida tomando  $R_{ab}^{cd} = (-1)^{p(a)p(b)} \bar{R}_{ab}^{cd}$ , ou seja

$$R = P P^g \bar{R}, \quad (P^g)_{ab}^{cd} = (-1)^{p(c)p(d)} \delta_{ad} \delta_{bc}, \quad (1.3.11)$$

$P^g$  é o chamado permutador graduado, do qual (1.2.37) é um exemplo. Sendo assim, dado uma solução de (1.2.24) cujos elementos não nulos satisfazem a restrição de paridade acima, podemos obter uma solução de (1.3.8) por aplicação do permutador usual  $P\bar{R}$ , ou obter uma solução da Yang-Baxter graduada aplicando o permutador graduado  $P^g\bar{R}$ .

Resta-nos ainda obter a versão equivalente de (1.2.5). Para isto devemos introduzir a noção de super produto tensorial de matrizes. Considere o produto tensorial de dois espaços lineares graduados,  $V$  e  $W$ . Então definimos uma base homogênea para  $V \otimes W$  em que graduação é dada pela soma das graduações individuais. Além disso, definimos o super-produto tensorial de dois elementos quaisquer por

$$x \overset{s}{\otimes} y = \sum_{ij} (v_i \otimes w_j) x_i y_j (-1)^{p(x_i)p(j)}. \quad (1.3.12)$$

Agora podemos definir o produto tensorial entre dois operadores,  $F$  atuando em  $V$  e  $G$  atuando em  $W$ , tal que  $(F \overset{s}{\otimes} G)(x \overset{s}{\otimes} y) = F(x) \overset{s}{\otimes} G(y)$  com  $p(F) = p(G) = 0$ . Disto resulta

$$\left( F \overset{s}{\otimes} G \right)_{ab}^{cd} = F_a^c G_b^d (-1)^{p(b)(p(a)+p(c))}. \quad (1.3.13)$$

Com isto o operador  $R$  na equação (1.3.10) pode ser visto como um operador atuando no espaço  $V \otimes V$  com coeficientes  $\tilde{R}_{ab}^{cd}$  dados por

$$R = \sum_{abcd} R_{ab}^{cd} e_{ac} \otimes e_{bd} = \sum_{abcd} \tilde{R}_{ab}^{cd} e_{ac} \overset{s}{\otimes} e_{bd}. \quad (1.3.14)$$

Agora vamos “imersão” operadores  $R$  em  $V \otimes V \otimes V$ . O primeiro espaço indexaremos por  $A$ , o segundo por  $B$  e o terceiro por  $C$ . Note que a ordem dos espaços é relevante. Assim,

a equação de Yang-Baxter graduada análoga a (1.2.5) é dada por

$$R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}')R_{AC}(\mathcal{L}, \mathcal{L}'')R_{BC}(\mathcal{L}', \mathcal{L}'') = R_{BC}(\mathcal{L}', \mathcal{L}'')R_{AC}(\mathcal{L}, \mathcal{L}'')R_{AB}(\mathcal{L}, \mathcal{L}'), \quad (1.3.15)$$

desde que interpretemos

$$R_{ij} = \sum_{abcd} \tilde{R}_{ab}^{cd}(e_{ac})_i \overset{s}{\otimes} (e_{bd})_j, \quad i, j = A, B, C, \quad (1.3.16)$$

com  $(e_{ab})_i = \text{Id} \overset{s}{\otimes} \dots \overset{s}{\otimes} \text{Id} \overset{s}{\otimes} \underbrace{e_{ab}}_i \overset{s}{\otimes} \text{Id} \overset{s}{\otimes} \dots \overset{s}{\otimes} \text{Id}$ .

Tendo em vista as famílias comutantes que constituem variedades unidimensionais, a equação de Yang-Baxter graduada implica na comutatividade das matrizes de transferência para diferentes parâmetros espectrais

$$T(\lambda) = \text{str}_{\mathcal{A}} \left[ \prod_{j=1}^{\hat{L}} \mathcal{L}_{\mathcal{A}j}(\lambda) \right], \quad (1.3.17)$$

sendo  $\text{str}_{\mathcal{A}}$  o super-traço sobre o espaço auxiliar e  $\text{str } M = \sum_{\alpha} (-1)^{p(\alpha)} M_{\alpha\alpha}$ .

Correspondente a (1.2.27) e (1.2.28) existe uma solução da Yang-Baxter graduada dada por

$$R(\mathcal{L}, \mathcal{L}^0) = \frac{\lambda + P^g}{1 + \lambda}, \quad (1.3.18)$$

invariantes por super-álgebra  $su(l|r)$ , sendo  $l$  e  $r$  definidos pela graduação atribuída ao espaço linear em que  $R$  atua (o que pode ser igualmente lido de  $P^g$ ).

Do ponto de vista de modelos de vértices, as soluções (1.3.18) correspondem aos modelos de Perk-Schultz[62]. Devemos notar que o permutador graduado também satisfaz a álgebra (1.1.11), de modo que a solução acima também possui ponto regular em  $\lambda = 0$ . Com isto, temos as cadeias quânticas que são denominadas modelos de Uimin-Sutherland[63]. Entre o número destes se encontram:

$$\mathcal{H}^{su(3)} = \sum_{j=1}^L \left( -2 + \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} + \left( \vec{S}_{j+1} \cdot \vec{S}_{j+1} \right)^2 \right), \quad (1.3.19)$$

onde  $\vec{S} = \{S^x, S^y, S^z\}$  são operadores de spin-1.

$$\mathcal{H}^{su(2|1)} = \sum_{j=1}^L h_{jj+1}^{t-J} = \sum_{j=1}^L \left( - \sum_{\tau} (c_{j+1\tau}^{\dagger} c_{j\tau} + c_{j\tau}^{\dagger} c_{j+1\tau}) + 2\vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} - \frac{1}{2} \sum_{\sigma\tau} n_{j\tau} n_{j+1\sigma} \right), \quad (1.3.20)$$

sendo  $n_{j\tau} = c_{j\tau}^\dagger c_{j\tau}$ ,  $S_j^k = \sum_{\tau\sigma} S_{\tau\sigma}^k c_{j\tau}^\dagger c_{j\sigma}$  ( $S^k$  matrizes de spin- $\frac{1}{2}$ ) e  $c_{j\tau}$  são operadores fermiônicos “projetados” atuando no subspaço  $|\uparrow\rangle$ ,  $|0\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle$  com graduação  $\{0, 1, 0\}$ . Tais operadores satisfazem a álgebra de anti-comutação [64, 47]

$$[c_{i\tau}, c_{j\sigma}]_+ = [c_{i\tau}^\dagger, c_{j\sigma}^\dagger]_+ = 0,$$

$$[c_{i\tau}, c_{j\sigma}^\dagger]_+ = ((1 - n_{i-\tau})\delta_{\tau\sigma} + S_i^{-\tau}(1 - \delta_{\tau\sigma}))\delta_{ij}. \quad (1.3.21)$$

O Hamiltoniano  $\mathcal{H}^{su(2|1)}$  é o chamado modelo t-J super-simétrico.

Olhando agora para a solução da álgebra Braid-Monoid apresentada em (1.2.32), teremos uma solução da equação de Yang-Baxter graduada da seguinte forma

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} -a(\lambda) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\lambda) & 0 & c(\lambda) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -f(\lambda) & 0 & e(\lambda) & 0 & -d(\lambda) & 0 & 0 \\ 0 & c(\lambda) & 0 & b(\lambda) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -e(\lambda) & 0 & \bar{a}(\lambda) & 0 & e(\lambda) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b(\lambda) & 0 & c(\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & -d(\lambda) & 0 & -e(\lambda) & 0 & -f(\lambda) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c(\lambda) & 0 & b(\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -a(\lambda) \end{pmatrix}, \quad (1.3.22)$$

sendo os pesos de Boltzmann do modelo estatístico dados por  $a(\lambda) = (1-\lambda)(\frac{3}{2}-\lambda)$ ,  $b(\lambda) = \lambda(\frac{3}{2}-\lambda)$ ,  $c(\lambda) = (\frac{3}{2}-\lambda)$ ,  $d(\lambda) = \frac{3}{2}-2\lambda$ ,  $\bar{a}(\lambda) = \frac{3}{2} + \frac{3}{2}\lambda - \lambda^2$ ,  $e(\lambda) = \lambda$ ,  $f(\lambda) = -\frac{1}{2}\lambda + \lambda^2$ .

Cumpre notar que aqui também temos regularidade no ponto  $\lambda = 0$ . A cadeia quântica associada pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{osp(2|1)} &= -\frac{d}{d\lambda} \ln \left( \frac{T(\lambda)}{a^L(\lambda)} \right) \Big|_{\lambda=0} \\ &= \sum_{j=1}^L \left[ -\sum_{\sigma} \left( c_{j+1\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{j+1\sigma} - \frac{2}{3} \text{sgn}(\sigma) (c_{j\sigma} c_{j+1\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{j+1\sigma}^\dagger) \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{5}{3} (n_{j\sigma} + n_{j+1\sigma}) \right) + \frac{1}{3} \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} - \frac{5}{6} \sum_{\sigma\sigma'} (n_{j\sigma} n_{j+1\sigma'}) - \frac{8}{3} \Big], \quad (1.3.23) \end{aligned}$$

sendo os operadores aqui envolvidos como no modelo t-J.

## 1.4 Ansatz de Bethe algébrico

No trabalho seminal [12], Bethe pavimentou um caminho para a diagonalização das cadeias de spin como (1.2.22), precedendo a solução das cadeias quânticas ditas integráveis.

Atualmente, o método de Bethe é conhecido por ansatz de Bethe coordenada. Neste, propomos que as “amplitudes de três ou mais partículas” possam ser fatorizadas em termos das amplitudes de espalhamento de duas partículas. Resulta deste método que os autovalores e as auto-funções da cadeia quântica ficam determinadas uma vez resolvido um sistema de equações transcendentais para os momentos das partículas, equações estas que denominamos equações de Bethe.

Nesta seção, nós esboçaremos outra formulação do ansatz de Bethe, que é o chamado ansatz de Bethe algébrico (ABA), ou método do espalhamento inverso quântico[22]. Faremos isto para os modelos invariantes pela álgebra  $su(l)$  com a finalidade de mostrar a viabilidade de diagonalização dos modelos apresentados anteriormente.

Iniciemos com caso mais simples, o  $su(2)$ . A matriz de monodromia pode ser escrita na forma

$${}^2\mathcal{T}_A = \left[ \begin{array}{c} \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}_L \\ \begin{bmatrix} 0 & c \\ 0 & 0 \end{bmatrix}_L \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix}_L \end{array} \right]_A \left[ \begin{array}{c} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{bmatrix}_L \\ \begin{bmatrix} b & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix}_L \end{array} \right]_A \dots \left[ \begin{array}{c} \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}_1 \\ \begin{bmatrix} 0 & c \\ 0 & 0 \end{bmatrix}_1 \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix}_1 \end{array} \right]_A = \begin{bmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{bmatrix}, \quad (1.4.1)$$

sendo  $a(\lambda) = 1 + \lambda$ ,  $b(\lambda) = \lambda$ ,  $c(\lambda) = 1$ . Desejamos obter os auto-estados de  ${}^2T(\lambda) = A(\lambda) + D(\lambda)$ . Veja que

$${}^2\mathcal{L}_{Aj} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j = \begin{bmatrix} a(\lambda) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j & c(\lambda) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_j \\ 0 & b(\lambda) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j \end{bmatrix}, \quad (1.4.2)$$

é uma matriz triangular superior. A triangularidade local implica na triangularidade global, de modo que a parte diagonal de  $\mathcal{T}_A$  sobre o estado  $|\Psi_0\rangle = \prod_{j=1}^L \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j$  pode ser facilmente obtida. Temos  $A(\lambda)|\Psi_0\rangle = \alpha(\lambda)|\Psi_0\rangle$  e  $D(\lambda)|\Psi_0\rangle = \delta(\lambda)|\Psi_0\rangle$ , sendo  $\alpha(\lambda) = a^L(\lambda)$  e  $\delta(\lambda) = b^L(\lambda)$ . Logo  $|\Psi_0\rangle$  é um auto-estado da matriz de transferência, pois

$${}^2T(\lambda)|\Psi_0\rangle = (\alpha(\lambda) + \delta(\lambda))|\Psi_0\rangle. \quad (1.4.3)$$

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

$$|\Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)\rangle = B(\lambda_n) \dots B(\lambda_1)|\Psi_0\rangle, \quad (1.4.4)$$

$$(A(\lambda) + D(\lambda))|\Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)\rangle = \Lambda_n(\lambda)|\Psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n)\rangle. \quad (1.4.5)$$

Para que possamos proceder com esta proposta, é necessário que saibamos relações algébricas que permitam calcular (1.4.5). A relação fundamental (1.2.2) provê as seguintes relações

$$\begin{aligned} B(\mu)B(\lambda) &= B(\lambda)B(\mu), \\ b(\lambda - \mu)A(\mu)B(\lambda) &= a(\lambda - \mu)B(\lambda)A(\mu) - c(\lambda - \mu)B(\mu)A(\lambda), \\ b(\mu - \lambda)D(\mu)B(\lambda) &= a(\mu - \lambda)B(\lambda)D(\mu) - c(\mu - \lambda)B(\mu)D(\lambda), \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

que nos permite passar os operadores  $A$  e  $D$  pelo operador  $B$ . Com a aplicação sucessiva de (1.4.6) podemos obter facilmente que

$$A(\lambda)|\Psi(\vec{\lambda})\rangle = \alpha(\lambda) \prod_{j=1}^n \frac{a(\lambda_k - \lambda)}{b(\lambda_k - \lambda)} |\Psi(\vec{\lambda})\rangle - \sum_{k=1}^n \alpha(\lambda_k) \frac{c(\lambda_k - \lambda)}{b(\lambda_k - \lambda)} \prod_{\substack{j \neq k \\ j=1}}^n \frac{a(\lambda_j - \lambda_k)}{b(\lambda_j - \lambda_k)} |\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle, \quad (1.4.7)$$

e

$$D(\lambda)|\Psi(\vec{\lambda})\rangle = \delta(\lambda) \prod_{j=1}^n \frac{a(\lambda - \lambda_k)}{b(\lambda - \lambda_k)} |\Psi(\vec{\lambda})\rangle - \sum_{k=1}^n \delta(\lambda_k) \frac{c(\lambda - \lambda_k)}{b(\lambda - \lambda_k)} \prod_{\substack{j \neq k \\ j=1}}^n \frac{a(\lambda_k - \lambda_j)}{b(\lambda_k - \lambda_j)} |\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle, \quad (1.4.8)$$

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  ${}^2T(\lambda)$ , as contribuições em  $|\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle$  devem se cancelar. Desta forma o ansatz de Bethe fornece

$${}^2T(\lambda)|\Psi(\vec{\lambda})\rangle = \left( \alpha(\lambda) \prod_{j=1}^n \frac{a(\lambda_k - \lambda)}{b(\lambda_k - \lambda)} + \delta(\lambda) \prod_{j=1}^n \frac{a(\lambda - \lambda_k)}{b(\lambda - \lambda_k)} \right) |\Psi(\vec{\lambda})\rangle, \quad (1.4.9)$$

e os  $\lambda_j$ 's devem ser escolhidos tais que

$$\frac{\alpha(\lambda_k)}{\delta(\lambda_k)} = \prod_{\substack{j \neq k \\ j=1}}^n \frac{a(\lambda_k - \lambda_j)b(\lambda_j - \lambda_k)}{b(\lambda_k - \lambda_j)a(\lambda_j - \lambda_k)}, \quad k = 1, \dots, n, \quad (1.4.10)$$

que resulta da imposição que as contribuições proporcionais a  $|\Psi(\vec{\lambda}/\lambda_k)\rangle$  se anulem e da relação (1.2.12) devido à unitariedade. Estas são as chamadas equações de Bethe.

No caso  $su(l)$  também podemos obter o espectro pelo ansatz de Bethe. Todavia, existe uma ideia adicional para resolver este problema. Basicamente, para diagonalizar a matriz de transferência do  $su(l)$  se faz necessário conhecer a solução do modelo  $su(l-1)$ , motivo pelo qual o ansatz de Bethe neste caso adquire o adjetivo “Nested”(encadeado).

Para ver isto, olhemos para o caso  $su(3)$  e notemos que a álgebra de Yang-Baxter (1.2.2) fornece as seguintes relações,

$$\begin{aligned} a(\lambda - \mu) \vec{B}(\lambda) \otimes \vec{B}(\mu) &= \vec{B}(\mu) \otimes \vec{B}(\lambda) P^2 \mathcal{L}(\lambda - \mu), \\ b(\mu - \lambda) A(\lambda) \vec{B}(\mu) &= a(\mu - \lambda) \vec{B}(\mu) A(\lambda) - c(\mu - \lambda) \vec{B}(\lambda) A(\mu), \\ b(\lambda - \mu) \overleftarrow{D}(\lambda) \otimes \vec{B}(\mu) &= \vec{B}(\mu) \otimes \overleftarrow{D}(\lambda) P^2 \mathcal{L}(\lambda - \mu) - c(\lambda - \mu) \vec{B}(\lambda) \otimes \overleftarrow{D}(\mu), \end{aligned} \quad (1.4.11)$$

sendo o permutador  $P \in \text{End}[\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2]$  e que escrevemos a matriz de monodromia na forma

$${}^3\mathcal{L}_{A_j} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b \end{bmatrix}_j & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_j & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ c & 0 & 0 \end{bmatrix}_j \\ \begin{bmatrix} 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_j & \begin{bmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{bmatrix}_j & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 \end{bmatrix}_j \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_j & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_j & \begin{bmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & a \end{bmatrix}_j \end{bmatrix},$$

$${}^3\mathcal{T}_A = {}^3\mathcal{L}_{AL} \dots {}^3\mathcal{L}_{A1} = \begin{bmatrix} A(\lambda) & B_1(\lambda) & B_2(\lambda) \\ C_1(\lambda) & D_{11}(\lambda) & D_{12}(\lambda) \\ C_2(\lambda) & D_{21}(\lambda) & D_{22}(\lambda) \end{bmatrix}. \quad (1.4.12)$$

Também definimos

$$\vec{B}(\lambda) = \begin{bmatrix} B_1(\lambda) & B_2(\lambda) \end{bmatrix}, \quad \overleftarrow{D}(\lambda) = \begin{bmatrix} D_{11}(\lambda) & D_{12}(\lambda) \\ D_{21}(\lambda) & D_{22}(\lambda) \end{bmatrix}. \quad (1.4.13)$$

Reconhecendo que  $|\Psi_0\rangle = \prod_{j=1}^L \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_j$  constitui um estado de referência, obtemos os valores esperados no pseudo-vácuo

$$A|\Psi_0\rangle = \alpha_2(\lambda)|\Psi_0\rangle, \quad D_{11}|\Psi_0\rangle = \delta_2(\lambda)|\Psi_0\rangle, \quad D_{22}|\Psi_0\rangle = \delta_2(\lambda)|\Psi_0\rangle, \quad (1.4.14)$$

sendo  $\alpha_2(\lambda) = a^L(\lambda)$  e  $\delta_2(\lambda) = b^L(\lambda)$ . Além disso, vemos que os operadores  $C_\alpha$ ,  $D_{\alpha\beta}$  com  $\alpha \neq \beta$  atuam como operadores de destruição, motivo pelo qual propomos que os operadores  $B_\alpha(\lambda)$  atuem como criação. Levando-se em conta ambos os operadores de criação, devemos propor excitações na forma geral

$$\left| \Psi(\vec{\lambda}^2) \right\rangle = \sum_{\sigma_j=1,2} F_{\sigma_1, \dots, \sigma_{m_2}} B_{\sigma_1}(\lambda_1^2) \dots B_{\sigma_{m_2}}(\lambda_{m_2}^2) |\Psi_0\rangle. \quad (1.4.15)$$

Em vistas das relações algébricas (1.4.11), os termos desejáveis, isto é, aqueles que resultam na expressão do auto-valor e por conseguinte aparecem multiplicando o estado  $\left| \Psi(\vec{\lambda}^2) \right\rangle$  são dados na forma

$$A(\lambda) \left| \Psi(\vec{\lambda}^2) \right\rangle = \alpha_2(\lambda) \prod_{j=1}^{m_2} \frac{a(\lambda_j^2 - \lambda)}{b(\lambda_j^2 - \lambda)} \left| \Psi(\vec{\lambda}^2) \right\rangle + \dots \quad (1.4.16)$$

$$\sum_{\alpha=1,2} D_{\alpha\alpha}(\lambda) \left| \Psi(\vec{\lambda}^2) \right\rangle = \delta_2(\lambda) \sum_{\sigma_j, \eta_j=1,2} \frac{B_{\sigma_1}(\lambda_1^2)}{b(\lambda - \lambda_1^2)} \dots \frac{B_{\sigma_{m_2}}(\lambda_{m_2}^2)}{b(\lambda - \lambda_{m_2}^2)} |\Psi_0\rangle {}^2T_{\sigma_1, \dots, \sigma_{m_2}}^{\eta_1, \dots, \eta_{m_2}} F_{\eta_1, \dots, \eta_{m_2}} + \dots, \quad (1.4.17)$$

sendo

$${}^2T(\lambda) = \text{tr}_A {}^2\mathcal{L}_{Am_2}(\lambda - \lambda_{m_2}^2) \dots {}^2\mathcal{L}_{A1}(\lambda - \lambda_1^2). \quad (1.4.18)$$

Contudo, para que  $\left| \Psi(\vec{\lambda}^2) \right\rangle$  seja auto-vetor de  ${}^3T = A + D_{11} + D_{22}$ , devemos ter que  $F$  seja auto-vetor de  ${}^2T$ , do que segue o problema auxiliar  $su(2)$ . Notemos que, neste caso, a matriz de transferência do problema auxiliar não atua nos  $L$  sítios da rede, mas em um espaço linear menor, isomorfo a  $\bigotimes_{j=1}^{m_2} \mathbb{C}^2$ . Além disso, cumpre notar também que o problema auxiliar corresponde a um problema heterogêneo, isto é, os pesos de Boltzmann ao longo de uma linha são todos diferentes. Isto apenas modifica ligeiramente a solução dada acima, uma vez que

$${}^2\mathcal{L}_{AB}(\lambda - \mu) {}^2\mathcal{L}_{AC}(\lambda - \gamma) {}^2\mathcal{L}_{BC}(\mu - \gamma) = {}^2\mathcal{L}_{BC}(\mu - \gamma) {}^2\mathcal{L}_{AC}(\lambda - \gamma) {}^2\mathcal{L}_{AB}(\lambda - \mu), \quad (1.4.19)$$

garante que a álgebra de Yang-Baxter permanece a mesma. Por consequência, a única modificação que deve ser realizada se deve aos valores esperados sobre o estado de referência, que agora passam a ser  $\alpha_1(\lambda) = \prod_{j=1}^{m_2} a(\lambda - \lambda_j^2)$  e  $\delta_1(\lambda) = \prod_{j=1}^{m_2} b(\lambda - \lambda_j^2)$ . Logo a expressão do auto-valor fica

$$\frac{{}^3T(\lambda)}{\delta_2(\lambda)} = \frac{\alpha_2(\lambda)\beta_2(\lambda)}{\delta_2(\lambda)} + \frac{{}^2T(\lambda)}{\delta_1(\lambda)} = \frac{\alpha_2(\lambda)\beta_2(\lambda)}{\delta_2(\lambda)} + \left( \frac{\alpha_1(\lambda)\beta_1(\lambda)}{\delta_1(\lambda)} + \frac{\alpha_0(\lambda)\beta_0(\lambda)}{\delta_0(\lambda)} \right), \quad (1.4.20)$$



sendo

$$\alpha_k(\lambda) = \prod_{j=1}^{m_{k+1}} a(\lambda - \lambda_j^{k+1}), \quad \delta_k(\lambda) = \prod_{j=1}^{m_{k+1}} b(\lambda - \lambda_j^{k+1}), \quad \beta_k(\lambda) = \prod_{j=1}^{m_k} \frac{a(\lambda_j^k - \lambda)}{b(\lambda_j^k - \lambda)}, \quad (1.4.21)$$

com  $0 = m_0 \leq m_1 \leq m_2 \leq m_3 = L$  e  $\lambda_j^3 = 0$  para todo  $j$ .

Para completar a solução, basta agora coletar os termos indesejáveis e impor que seus respectivos coeficientes se anulem, a fim de que obtenhamos as equações de Bethe. Ainda que trabalhoso, este procedimento é factível e resulta no sistema de equações

$$\frac{\alpha_k(\lambda_l^k)}{\delta_k(\lambda_l^k)} = \beta_{k-1}(\lambda_l^k) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq l}}^{m_k} \frac{a(\lambda_l^k - \lambda_j^k) b(\lambda_j^k - \lambda_l^k)}{b(\lambda_l^k - \lambda_j^k) a(\lambda_j^k - \lambda_l^k)} = - \lim_{s \rightarrow \lambda_l^k} \frac{\alpha_{k-1}(s) \beta_{k-1}(s)}{\beta_k(s) \delta_{k-1}(s)}, \quad k = 1, 2. \quad (1.4.22)$$

Em geral, teremos a seguinte relação de recorrência entre os auto-valores, formando uma sucessão de problemas auxiliares para solução do modelo  $su(l)$ :

$$\frac{{}^{k+1}T(\lambda)}{\delta_k(\lambda)} = \frac{\alpha_k(\lambda) \beta_k(\lambda)}{\delta_k(\lambda)} + \frac{{}^kT(\lambda)}{\delta_{k-1}(\lambda)} = \sum_{j=0}^k \frac{\alpha_j(\lambda) \beta_j(\lambda)}{\delta_j(\lambda)}, \quad (1.4.23)$$

e as equações de Bethe ficam

$$\lim_{s \rightarrow \lambda_l^k} \frac{\alpha_j(s) \beta_j(s) \delta_{j+1}(s)}{\alpha_{j+1}(s) \beta_{j+1}(s) \delta_j(s)} = -1, \quad \begin{matrix} k=1, \dots, l-1 \\ l=1, \dots, m_k \end{matrix}. \quad (1.4.24)$$

## 1.5 Matriz de Transferência Quântica

O ansatz de Bethe permite que obtenhamos o espectro da matriz de transferência do modelo de vértices assim como do Hamiltoniano local pertecente à sua variedade integrável. Contudo, existe uma diferença no que toca o cálculo das propriedades termodinâmicas do modelo de vértices e do modelo quântico. No primeiro, como apresentado na seção 1.1, necessitamos apenas do maior auto-valor no limite termodinâmico para obter a energia-livre. Já na cadeia quântica ainda resta o problema de somar os pesos estatístico de cada auto-energia. É neste segundo caso que interessa elaborar.

A forma mais direta de calcular a energia-livre do modelo quântico é calcular todas auto-energias para, então, efetuar a soma da função de partição. Todavia, como estamos interessados no limite termodinâmico, é necessário conhecer a estrutura das raízes de

Bethe para executar este empreendimento. Neste limite, uma grande parcela de soluções das equações de Bethe são dadas por raízes que se aglomeram em padrões chamados strings[28, 27]. É possível definir densidades de n-strings e n-holes, das quais a energia-livre se torna um funcional. A minimização deste funcional fornece a energia-livre do modelo, o que requer a solução de um conjunto infinito de equações integrais não-lineares acopladas.

Entre as possíveis críticas a este método podemos mencionar duas. A primeira se refere ao próprio padrão de raízes que, em algumas situações, violam a estrutura de strings. A segunda crítica reside propriamente nas equações integrais não-lineares resultantes. Sendo elas em número infinito, se faz necessário realizar alguma truncagem para obter resultados numéricos. Assim sendo, mesmo que a hipótese de strings conduza a uma resposta formalmente correta, a obtenção efetiva das quantidades termodinâmicas ainda deixa a desejar, uma vez que podemos incorrer em erro por efeito do processo de truncagem.

Para contornar estas dificuldades, Klümper elaborou uma forma alternativa de calcular a função de partição das cadeias quânticas integráveis[37]. Nesta formulação alternativa, obtém-se um conjunto finito equações integrais não-lineares, tornando possível obter as propriedades termodinâmicas numericamente.

Nesta seção, descrevemos o objeto central desta última formulação. Como o Hamiltoniano é obtido da derivada logarítmica da matriz de transferência, podemos escrever a seguinte expansão para esta matriz

$$T(\lambda) = e^{i\mathcal{P} + \lambda\mathcal{H} + O(\lambda^2)}. \quad (1.5.1)$$

Para obter o operador densidade  $e^{-\beta\mathcal{H}}$ , vamos eliminar primeiramente a contribuição de ordem 0 na exponencial acima. Uma forma de fazer isto é definindo uma nova matriz de transferência  $\bar{T}$  da seguinte forma,

$$\bar{T}(\lambda) = \text{str}_A \prod_{i=1}^{\hat{L}} \mathcal{L}_{Ai}^{stA}(\lambda) = \text{str}_A \prod_{i=1}^L \mathcal{L}_{Ai}(\lambda), \quad (1.5.2)$$

de modo que  $\bar{T}(\lambda)$  possui a seguinte expansão

$$\bar{T}(\lambda) = e^{-i\mathcal{P} + \lambda\mathcal{H} + O(\lambda^2)}. \quad (1.5.3)$$

Assim, podemos eliminar a contribuição do momento ao formar o produto  $T(\lambda)\bar{T}(\lambda)$ . Utilizando  $\lambda = -\frac{\beta}{N}$ , os termos em  $O(\lambda^2)$  se tornam pequenos comparados ao termo  $O(\lambda)$ ,

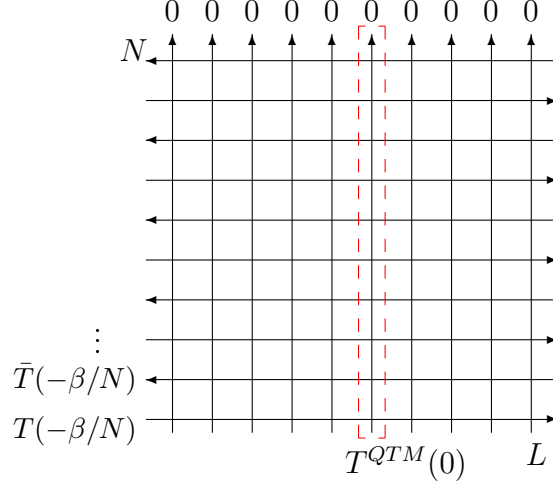


Figura 1.2: Modelo de vértices heterogêneo obtido a partir do mapeamento de Trotter-Suzuki. O destaque em vermelho é a matriz de transferência quântica.

quando o número de Trotter  $N$  vai a infinito. Portanto, nós temos

$$Z_L = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_{NL} = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}[(T(-\tau)\bar{T}(-\tau))^{N/2}] = \text{tre}^{-\beta\mathcal{H}}, \quad \tau = \frac{\beta}{N}. \quad (1.5.4)$$

Agora a quantidade  $Z_{NL}$  pode ser vista como uma função de partição de um modelo de vértices heterogêneo, observe a Figura 1.2. O mapeamento da função de partição do modelo quântico na função de partição de um modelo clássico equivale à versão na rede das integrais de trajetória. Este é o chamado mapeamento de Trotter-Suzuki[38, 39].

A direção de transferência coluna a coluna é mais apropriada para o cálculo (1.5.4), uma vez que o maior auto-valor neste caso é não degenerado. Portanto, definimos a matriz de transferência quântica

$$T^{QTM}(x) = \text{tr}_Q \left[ \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \mathcal{L}_{2i-1,Q}(-\tau + ix) \mathcal{L}_{2i,Q}^{st,A}(-ix - \tau) \right], \quad (1.5.5)$$

com a inserção apropriada do parâmetro espectral  $x$ , de modo a garantir a integrabilidade  $[T^{QTM}(x), T^{QTM}(x')] = 0$ . Sendo assim, a (grande)função de partição pode ser escrita em termos da matriz de transferência quântica como segue

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{str} \left[ (T^{QTM}(0))^L \right], \quad (1.5.6)$$

de modo que se assumirmos que os limites termodinâmico e do número de Trotter podem

ser trocados[39], encontramos o potencial termodinâmico

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z, \quad (1.5.7)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \Lambda_{max}^{QTM}(0), \quad (1.5.8)$$

escrito apenas em termos do maior auto-valor.

Não obstante, o procedimento apresentado aqui apenas possibilita o cálculo das quantidades termodinâmicas a temperatura finita. Seria interessante, além disso, incluir as interações com o campo externo e potencial químico, por exemplo. Nos referiremos a estes parâmetros sob nome de potenciais químicos generalizados. Assumindo que exista um potencial químico generalizado para cada estado da base canônica local(“espécie”), podemos escrever

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr} \left[ (T(-\tau) \bar{T}(-\tau))^{N/2} e^{\beta \sum_{j=1}^{n+m} \mu_j \hat{N}_j} \right] = \text{tre}^{-\beta(\mathcal{H} - \mu \hat{N})}, \quad (1.5.9)$$

sendo  $\hat{N}_j = \sum_{k=1}^L n_{jk}$  o operador número total de “espécies” do tipo  $j$ , podendo  $j$  variar de  $j = 1, \dots, l+r$ . O operador  $n_{jk}$  fornece 1 se no estado em que atua existe uma “espécie” do tipo  $j$  no sítio  $k$  e 0 caso contrário. Como consequência, a matriz de transferência quântica passa ser escrita como

$$T^{QTM}(x) = \text{tr}_Q \left[ e^{\beta \sum_{j=1}^{l+r} \mu_j n_{jQ}} \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \mathcal{L}_{2i-1, Q}(-\tau + ix) \mathcal{L}_{2i, Q}^{st, A}(-ix - \tau) \right]. \quad (1.5.10)$$

Esta modificação para incluir potenciais químicos generalizados sempre é possível, embora nem sempre a integrabilidade seja preservada. A matriz de monodromia quântica sofre a modificação  $\mathcal{T}_Q^{QTM} \rightarrow \mathcal{G}_Q \mathcal{T}_Q^{QTM}$ , com  $\mathcal{G}_Q = e^{\beta \sum_{j=1}^{l+r} \mu_j n_{jQ}}$ . A matriz  $\mathcal{G}_Q$  introduz “torção”(twist) nas condições de contorno e, se ela satisfaz

$$[\mathcal{L}, \mathcal{G} \otimes \mathcal{G}] = 0, \quad (1.5.11)$$

então a álgebra de Yang-Baxter permanece a mesma, de modo que a integrabilidade é preservada.

# Capítulo 2

## Propriedades termodinâmicas a temperatura finita

Neste capítulo, vamos estudar as propriedades termodinâmicas de modelos integráveis invariantes por super-álgebra através do método da matriz de transferência quântica. Para isto, derivaremos um conjunto finito de equações integrais não-lineares para as chamadas funções auxiliares.

Atualmente não existe regra para a escolha destas funções, sendo necessário estudar cada modelo caso a caso. Desta forma, estaremos especialmente interessados em descrever o modelo invariante pela super-álgebra  $su(2|1)$  com generalização de multi-cadeias[47], o que nos remete ao modelo t-J com interações de mais longo alcance, e o modelo invariante pela super-álgebra  $osp(1|2)$ [48].

Deixamos para o capítulo seguinte os últimos avanços na definição de funções auxiliares para modelos invariantes pela álgebra  $su(l)$ , onde trabalhamos diretamente com o autovalor da matriz de transferência linha a linha.

### 2.1 $su(l|r)$

Nesta seção temos por objetivo central estudar as propriedades termodinâmicas de uma cadeia quântica integrável invariante pela super-álgebra  $su(2|1)$ . A termodinâmica do modelo descrito pelo Hamiltoniano (1.3.20) já foi estudada em [40] na ausência de campo magnético, embora as equações integrais não-lineares derivadas já o contemplassem.

Aqui, vamos estender os resultados de [40], não apenas explorando a presença do campo magnético, como também incluindo interação de mais longo alcance[47]. Uma das maneiras de se incluir estas interações é inserindo heterogeneidade na matriz de transferência (1.3.17) pela modificação dos parâmetros espectrais que a compõem. Conforme visto na seção 1.4 isto não destrói a integrabilidade, pois que a álgebra de Yang-Baxter permanece válida. Contudo, se faz necessário a existência de um ponto regular para derivar o Hamiltoniano. Por isto, nesta construção, os parâmetros de heterogeneidade são inseridos de modo a preservar a simetria por translação cíclica por um número maior de sítios, digamos,  $M$ [65, 46].

Em suma, podemos escrever a matriz de transferência da seguinte forma

$$t(\lambda) = \prod_{j=1}^M T_j(\lambda; \mathbf{i}\vec{\theta}). \quad (2.1.1)$$

sendo  $\theta_0 = 0$  e

$$T(\lambda) = \text{str}_{\mathcal{A}} \prod_{i=1}^{\widehat{L}} \left[ \prod_{k=1}^{\widehat{M}} \mathcal{L}_{\mathcal{A},(i-1)M+k}(\lambda, \mathbf{i}\theta_{M-k}) \right], \quad T_j(\lambda; \mathbf{i}\vec{\theta}) = T(\lambda + \mathbf{i}\theta_{j-1}; \mathbf{i}\vec{\theta}). \quad (2.1.2)$$

Tomando a derivada logarítmica da matriz de transferência acima, obteremos o Hamiltoniano na forma geral

$$\mathcal{H}(\vec{\theta}) = \frac{1}{M} \frac{d}{d\lambda} \ln t(\lambda) \Big|_{\lambda=0}, \quad (2.1.3)$$

$$= \frac{1}{M} \sum_{q=0}^{M-1} e^{-iq\mathcal{P}} \mathcal{H}_1(\vec{\theta}_{+q}) e^{iq\mathcal{P}}, \quad (2.1.4)$$

sendo  $\mathcal{P}$  o momento que governa a translação cíclica por um sítio para direita, e

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1(\vec{\theta}) &= \sum_{i=1}^L \sum_{k=1}^M \left[ \prod_{n=1}^{M-k} \mathcal{L}_{M+i+n, Mi}(\mathbf{i}\theta_{M-n}, \mathbf{i}\theta_0) \right] \mathcal{L}_{M(i+1)-k+1, Mi}(\mathbf{i}\theta_{k-1}, \mathbf{i}\theta_0) \times \\ &\quad \times \frac{d}{d\lambda} \mathcal{L}_{Mi, M(i+1)-k+1}(\lambda + \mathbf{i}\theta_0, \mathbf{i}\theta_{k-1}) \Big|_{\lambda=0} \left[ \prod_{n=1}^{\widehat{M-k}} \mathcal{L}_{Mi, Mi+n}(\mathbf{i}\theta_0, \mathbf{i}\theta_{M-n}) \right], \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

com a seguinte notação[46]

$$\vec{\theta}_{+q} = (\theta_{0+q}, \theta_{1+q}, \dots, \theta_{M-1+q}), \quad \vec{\theta} \equiv \vec{\theta}_{+0}, \quad \theta_{k+M} \equiv \theta_k.$$

O caso  $M = 1$  é o modelo t-J super-simétrico que já havíamos comentado na seção 1.3 e que foi originalmente derivado em [66].

O caso  $M = 2$  também já foi obtido em [67], embora as interações de mais longo alcance fossem exibidas na base de Weyl. Em [47] nós escrevemos este mesmo Hamiltoniano completamente em termos dos operadores fermiônicos  $c_{i\tau}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{t-J}(\theta) = & \frac{1}{2(1+\theta^2)} \sum_{j=1}^{2L} 2h_{jj+1}^{t-J} + \theta^2 h_{jj+2}^{t-J} + (-1)^j 4\theta \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} \times \vec{S}_{j+2} + \\ & (-1)^j 4\theta \sum_{p\{j,j+1,j+2\}} (-1)^{\text{sgn}(p)} \left( \vec{s}_{p(j)p(j+1)} \cdot \vec{S}_{p(j+2)} + m_{p(j)p(j+1)} \left( 1 - \sum_{\tau} \frac{n_{p(j+2)\tau}}{2} \right) \right), \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

sendo que a soma sobre  $p\{j, j+1, j+2\}$  denota a soma sobre permutações cíclicas dos índices  $j, j+1, j+2$  com  $\text{sgn}(p)$  a assinatura usual das permutações. Ainda, nós temos os análogos de-localizados da densidade de partículas e dos operadores de spin:

$$m_{jk} = \frac{i}{4} \sum_{\tau} c_{k\tau}^{\dagger} c_{j\tau} - c_{j\tau}^{\dagger} c_{k\tau}, \quad (2.1.7)$$

$$\vec{s}_{jk} = \{s_{jk}^x, s_{jk}^y, s_{jk}^z\} = \left\{ \frac{s_{jk}^+ + s_{jk}^-}{2}, \frac{s_{jk}^+ - s_{jk}^-}{2i}, s_{jk}^z \right\},$$

$$\begin{aligned} 2s_{jk}^+ &= i(c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} - c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}), & 2s_{jk}^- &= i(c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} - c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{k\uparrow}), \\ 4s_{jk}^z &= i(c_{k\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} - c_{j\uparrow}^{\dagger} c_{k\uparrow} - c_{k\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} + c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{k\downarrow}). \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

Na expressão acima estamos negligenciando uma constante aditiva e um termo proporcional ao número de partículas, uma vez que os mesmos apenas afetam o zero de energia e o potencial químico, ambos controláveis pela escolha dos potenciais químicos generalizados. Notemos que neste modelo os números das “espécies” dos três tipos são conservados.

O mapeamento de Trotter-Suzuki para o modelo (2.1.6) segue de modo semelhante ao que apresentamos na seção 1.5. Identificando a célula fundamental na matriz de transferência  $t(\lambda)$ , teremos a seguinte matriz  $\bar{t}(\lambda)$

$$\bar{t}(\lambda) = \prod_{j=1}^M \bar{T}_j(\lambda, i\vec{\theta}) = \bar{t}(\lambda) = e^{-Mi\mathcal{P} + \lambda M\mathcal{H} + O(\lambda^2)}. \quad (2.1.9)$$

sendo

$$\bar{T}(\lambda, i\vec{\theta}) = \text{str}_{\mathcal{A}} \left[ \prod_{i=1}^{\widehat{L}} \left[ \prod_{k=1}^{\widehat{M}} \mathcal{L}_{\mathcal{A},(i-1)M+k}^{st\mathcal{A}}(i\theta_{M-k} + \lambda) \right] \right], \quad \bar{T}_j(\lambda, i\vec{\theta}) = \bar{T}(\lambda - i\theta_{j-1}, i\vec{\theta}), \quad (2.1.10)$$

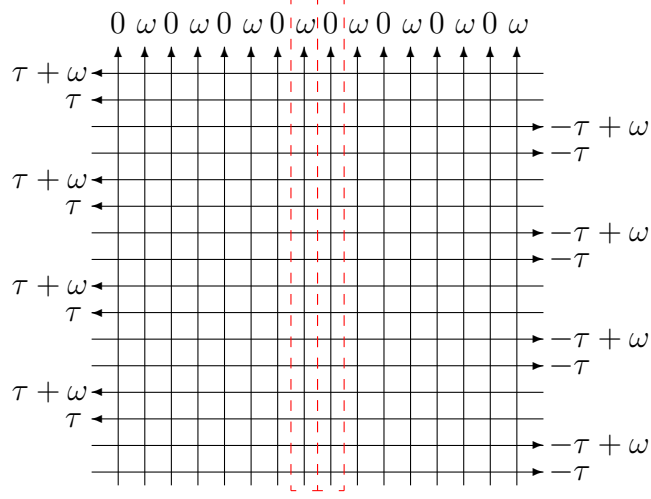


Figura 2.1: Mapeamento de Trotter-Suzuki para a generalização de multi-cadeias com  $M=2$ . O detalhe em vermelho enfatiza as duas matrizes de transferência quântica. Aqui  $\omega = i\theta$  e o tamanho da rede é  $ML$  por  $MN$ .

e por conseguinte podemos definir a matriz de transferência quântica

$$t^{QTM}(x) = \text{tr}_Q \left[ \mathcal{G}_Q \prod_{i=1}^{\frac{N}{2}} \left[ \prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{M(2i-2)+j,Q}(-\tau + i\theta_{j-1}, -ix) \right] \times \right. \\ \left. \times \left[ \prod_{j=1}^M \mathcal{L}_{M(2i-1)+j,Q}^{stQ}(-ix, \tau + i\theta_{j-1}) \right] \right]. \quad (2.1.11)$$

Para estes modelos com interações de mais longo alcance, a energia-livre é obtida a partir do maior auto-valor da matriz de transferência quântica segundo a seguinte expressão

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \ln \Lambda_{max}^{QTM}(-\theta_{j-1}), \quad (2.1.12)$$

veja a Figura 2.1.

Atualmente a melhor forma de calcular o maior auto-valor é obtendo um conjunto de equações integrais não-lineares do tipo formulado por Klümper[36, 37]. As equações integrais finais possuem um número finito de incógnitas, as chamadas funções auxiliares, o que constitui uma grande vantagem comparado ao método mais tradicional, o ansatz de Bethe termodinâmico(TBA)[21, 28, 27]. Formular as equações integrais não-lineares do tipo Klümper para todos os modelos invariantes pela álgebra  $su(l|r)$  constitui um grande problema atual, uma vez que não existe regra para a definição das chamadas funções auxiliares. Mais precisamente, obtemos o auto-valor de (2.1.11) através do ansatz de



Bethe nested[68],

$$\Lambda^{QTM}(x) = \sum_{j=1}^{l+r} \lambda_j(x), \quad \lambda_j(x) = e^{\beta\mu_j} X(x) \prod_{k=1}^{m_{j-1}} \frac{a_{\epsilon_j}(ix - ix_k^{j-1})}{b(ix - ix_k^{j-1})} \prod_{k=1}^{m_j} \frac{a_{\epsilon_j}(ix_k^j - ix)}{b(ix_k^j - ix)}, \quad (2.1.13)$$

$$X(x) = \left[ \prod_{k=1}^M b(-\tau + i(x + \theta_{k-1})) b(-\tau - i(x + \theta_{k-1})) \right]^{\frac{N}{2}}, \quad (2.1.14)$$

sendo  $a_\epsilon(x) = \frac{x+\epsilon}{x+1}$ ,  $b(x) = \frac{x}{1+x}$  e  $\epsilon_j = (-1)^{p_j}$  com  $p_j = 0, 1$  a graduação do estado  $j$ . Além disso,  $x_k^0 = -i\tau - \theta_{\text{mod}(k-1, M)}$  e  $x_k^{l+r} = i\tau - \theta_{\text{mod}(k-1, M)}$ . As equações de Bethe

$$\frac{e^{\beta\mu_j} \prod_{k=1}^{m_{j-1}} \frac{a_{\epsilon_j}(ix_r^j - ix_k^{j-1})}{b(ix_r^j - ix_k^{j-1})}}{e^{\beta\mu_{j+1}} \prod_{k=1}^{m_{j+1}} \frac{a_{\epsilon_{j+1}}(ix_k^{j+1} - ix_r^j)}{b(ix_k^{j+1} - ix_r^j)}} = \epsilon_j \epsilon_{j+1} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq r}}^{m_j} \frac{b(ix_k^j - ix_r^j) a_{\epsilon_{j+1}}(ix_r^j - ix_k^j)}{a_{\epsilon_j}(ix_k^j - ix_r^j) b(ix_r^j - ix_k^j)}, \quad (2.1.15)$$

com  $j = 1, \dots, n + m - 1$  e  $r = 1, \dots, m_j$ , implicam em resíduo nulo para os polos em  $x_k^j$ . Desta forma, as equações de Bethe são vínculos necessários para garantir analiticidade do auto-valor nos polos associados às raízes de Bethe. A ideia é definir um conjunto de funções auxiliares as quais, pelo uso desta propriedade de analiticidade, resultam nas equações integrais não-lineares que codificam as equações de Bethe. Aqui começa nosso estudo de caso.

### 2.1.1 $su(2|1)$

Geralmente, para definir as funções auxiliares, utilizamos as funções  $\lambda_j(x)$  do ansatz de Bethe como blocos de construção. Em termos destes, as funções auxiliares para a generalização de multi-cadeias podem ser escolhidas como sendo as mesmas do caso de cadeia simples[40]. No entanto, nós achamos conveniente executar uma transformação de partícula-buraco na função  $\mathfrak{c}(x)$  a fim de obter equações que podem ser diretamente conectadas com o caso  $su(2)$  no limite  $\mu \rightarrow \infty$ . Desta forma, as funções auxiliares ficam

$$\begin{aligned} \mathfrak{b}(x) &= \frac{\lambda_1(x + \frac{i}{2})}{\lambda_2(x + \frac{i}{2}) + \lambda_3(x + \frac{i}{2})} = \frac{e^{\beta\mu_1}}{e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3}} \frac{\Phi_+(x - \frac{i}{2}) \Phi_-(x + \frac{i}{2}) q_1(x + \frac{3i}{2})}{\Phi_+(x + \frac{i}{2}) q_2^h(x + \frac{i}{2}) q_2(x - \frac{i}{2})} \\ \bar{\mathfrak{b}}(x) &= \frac{\lambda_3(x - \frac{i}{2})}{\lambda_1(x - \frac{i}{2}) + \lambda_2(x - \frac{i}{2})} = \frac{e^{\beta\mu_3}}{e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2}} \frac{\Phi_+(x - \frac{i}{2}) \Phi_-(x + \frac{i}{2}) q_2(x - \frac{3i}{2})}{\Phi_-(x - \frac{i}{2}) q_1^h(x - \frac{i}{2}) q_1(x + \frac{i}{2})} \\ \mathfrak{c}(x) &= \frac{\lambda_2(x)(\lambda_1(x) + \lambda_2(x) + \lambda_3(x))}{\lambda_1(x)\lambda_3(x)} = e^{\beta(\mu_2 - \mu_1 - \mu_3)} \Lambda(x), \end{aligned} \quad (2.1.16)$$

sendo  $q_0(x) = \Phi_+(x) = \left[ \prod_{j=1}^M (x + \theta_{j-1} + i\tau) \right]^{\frac{N}{2}}$ ,  $q_{1,2}(x) = \prod_{k=1}^{m_{1,2}} (x - x_j^{1,2})$ ,  $q_3(x) = \Phi_-(x) = \left[ \prod_{j=1}^M (x + \theta_{j-1} - i\tau) \right]^{\frac{N}{2}}$  e  $q_{1,2}^h(x) = \prod_{k=1}^{m_{1,2}^h} (x - x_j^{h1,2})$  contêm as raízes de Bethe do tipo buraco, fornecendo uma propriedade de fatorização na forma

$$\frac{\lambda_j(x) + \lambda_{j+1}(x)}{e^{\beta\mu_j} + e^{\beta\mu_{j+1}}} = X(x) \frac{q_j^h(x)(\delta_{\epsilon_j, \epsilon_{j+1}} + \delta_{\epsilon_j, -\epsilon_{j+1}} \cdot q_j(x + i\epsilon_j))}{q_{j-1}(x)q_{j+1}(x)}. \quad (2.1.17)$$

Ainda aqui, estamos escolhendo os potenciais químicos generalizados como  $\mu_1 = \frac{H}{2} + \mu$ ,  $\mu_2 = -\sum_{j=1}^M \frac{1}{1+\theta_{j-1}^2}$  e  $\mu_3 = -\frac{H}{2} + \mu$  a fim de corresponder à grande função de partição do modelo sob campo magnético externo.

O maior auto-valor da QTM se encontra no setor  $m_1 = m_2 = \frac{MN}{2}$ . Para  $H = 0$ , as raízes de Bethe  $x_k^1(x_k^2)$  estão situadas sobre uma linha ligeiramente deformada, acima(abaixo) do eixo real, sem cruzar a reta  $\Im(z) = \frac{1}{2}(-\frac{1}{2})$ . Analogamente, as raízes do tipo buraco  $x_k^{h1}(x_k^{h2})$  estão situadas sobre linhas ligeiramente deformadas em relação a  $\Im(z) = 1(-1)$  sem cruzar a reta  $\Im(z) = \frac{3}{2}(-\frac{3}{2})$ . Podemos dizer que o papel dos parâmetros  $\theta_j$  é produzir deformações nas raízes de Bethe ao longo destas linhas, sem destruir as faixas de analiticidade e não-nulidade do caso da cadeia simples. Introduzir campo magnético resulta em consideráveis deslocamentos verticais das raízes, embora estes deslocamentos não violem as hipóteses de analiticidade. Portanto, as funções auxiliares (2.1.16) são analíticas e não nulas em uma faixa contendo o eixo real, além de possuir limite assintótico constante.

Também devemos mencionar que  $\Lambda(x)$ , para o maior auto-valor, possui uma faixa de analiticidade e não-nulidade contendo o conjunto  $-\frac{1}{2} \leq \Im(z) \leq \frac{1}{2}$ . Isto permite relacionar transformadas de Fourier de  $\Lambda(x)$  e  $\Lambda(x \pm \frac{i}{2})$ . Além disso, nós podemos calcular a transformada de Fourier da derivada logarítmica das funções auxiliares,  $\hat{\mathbf{b}}(k)$ ,  $\hat{\bar{\mathbf{b}}}(k)$ , e  $\hat{\mathbf{c}}(k)$ , de modo a obter relações algébricas no espaço  $k$ . Agora, uma observação importante é que as funções

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}(x) = 1 + \mathbf{b}(x) &= \frac{\Lambda(x + \frac{i}{2})}{e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3}} \frac{\Phi_+(x - \frac{i}{2})\Phi_-(x + \frac{3i}{2})q_1(x + \frac{i}{2})}{\Phi_+(x + \frac{i}{2})q_2^h(x + \frac{i}{2})q_2(x - \frac{i}{2})}, \\ \bar{\mathfrak{B}}(x) = 1 + \bar{\mathbf{b}}(x) &= \frac{\Lambda(x - \frac{i}{2})}{e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2}} \frac{\Phi_+(x - \frac{3i}{2})\Phi_-(x + \frac{i}{2})q_2(x - \frac{i}{2})}{\Phi_-(x - \frac{i}{2})q_1^h(x - \frac{i}{2})q_1(x + \frac{i}{2})}, \\ \mathfrak{C}(x) = 1 + \mathbf{c}(x) &= e^{-\beta(\mu_1 + \mu_3)}(e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2})(e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3}) \frac{q_1^h(x)q_2^h(x)}{\Phi_+(x - i)\Phi_-(x + i)}, \end{aligned} \quad (2.1.18)$$

também possuem formas fatoradas em termos de  $q_{1,2}(x)$ ,  $q_{1,2}^h(x)$  e  $\Lambda(x)$  com faixa de analiticidade e não-nulidade contendo o eixo real. Isto nos permite tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica mais uma vez e encontrar outro conjunto de relações algébricas. Em princípio, as funções auxiliares de letra maiúscula não deveriam conter informação adicional quando comparadas às de letra minúscula. No entanto, no processo de cálculo da transformada de Fourier, nós assumimos a analiticidade do auto-valor, o que impõe vínculos não triviais entre as funções  $\hat{\mathbf{b}}(k)$ ,  $\bar{\hat{\mathbf{b}}}(k)$ ,  $\hat{\mathbf{c}}(k)$ ,  $\hat{\mathfrak{B}}(k)$ ,  $\bar{\hat{\mathfrak{B}}}(k)$ , e  $\hat{\mathfrak{C}}(k)$ ,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{b}}(k) &= -\beta K(k) \left( \sum_{j=1}^M \frac{e^{ik\theta_{j-1}}}{M} \right) + F(k)\hat{\mathfrak{B}}(k) - e^{-k}F(k)\bar{\hat{\mathfrak{B}}}(k) - K(k)\hat{\mathfrak{C}}(k), \\ \bar{\hat{\mathbf{b}}}(k) &= -\beta K(k) \left( \sum_{j=1}^M \frac{e^{ik\theta_{j-1}}}{M} \right) - e^k F(k)\hat{\mathfrak{B}}(k) + F(k)\bar{\hat{\mathfrak{B}}}(k) - K(k)\hat{\mathfrak{C}}(k), \\ \hat{\mathbf{c}}(k) = \hat{\Lambda}(k) &= \beta F(k) \left( \sum_{j=1}^M \frac{e^{ik\theta_{j-1}}}{M} \right) + K(k) \left( \hat{\mathfrak{B}}(k) + \bar{\hat{\mathfrak{B}}}(k) \right) + F(k)\hat{\mathfrak{C}}(k),\end{aligned}\quad (2.1.19)$$

sendo  $K(k) = \frac{1}{2 \cosh(\frac{k}{2})}$ ,  $F(k) = \frac{1}{1+e^{|k|}}$  e nós já executamos o limite  $N \rightarrow \infty$ . A igualdade entre  $\hat{\mathbf{c}}(k)$  e  $\hat{\Lambda}(k)$  era esperada, uma vez que a única diferença entre  $\mathbf{c}(x)$  e  $\Lambda(x)$  é devido ao limite assintótico. Transformando as equações (2.1.19) de volta ao espaço real e integrando de  $-\infty$  até  $x$  encontramos

$$\begin{aligned}\ln \mathbf{b}(x) &= -\beta K_\theta(x) + \beta \frac{H}{2} + F * \ln \mathfrak{B}(x) - F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x+i) - K * \ln \mathfrak{C}(x), \\ \ln \bar{\mathbf{b}}(x) &= -\beta K_\theta(x) - \beta \frac{H}{2} - F * \ln \mathfrak{B}(x-i) + F * \ln \bar{\mathfrak{B}}(x) - K * \ln \mathfrak{C}(x), \\ \ln \mathbf{c}(x) &= \beta F_\theta(x) - \beta \mu' + K * (\ln \mathfrak{B}(x) + \ln \bar{\mathfrak{B}}(x)) + F * \ln \mathfrak{C}(x),\end{aligned}\quad (2.1.20)$$

sendo  $\mu' = \mu - \mu_2$ ,  $R_\theta(x) = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M R(x + \theta_{j-1})$ ,  $K(x) = \frac{\pi}{\cosh(\pi x)}$ ,  $F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{1+e^{|k|}} dk$  e  $f * g = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t)g(x-t)dt$ . As equações (2.1.20) constituem um conjunto auto consistente de equações integrais não-lineares. Uma vez resolvidas estas equações, podemos encontrar o maior auto-valor  $\Lambda(x)$  ou, em virtude de (2.2.9), o potencial termodinâmico

$$f = -\mu + e_0 - \frac{1}{M\beta} \sum_{j=1}^M K * (\ln \mathfrak{B}(-\theta_{j-1}) + \ln \bar{\mathfrak{B}}(-\theta_{j-1})) - F * \ln \mathfrak{C}(-\theta_{j-1}), \quad (2.1.21)$$

sendo

$$e_0 = - \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{1+e^{|k|}} \right] \left| \frac{\sum_{j=1}^M e^{ik\theta_{j-1}}}{M} \right|^2 dk,$$

a energia do estado fundamental no limite de semi-preenchimento(half-filling) e campo magnético externo nulo.

### 2.1.2 $su(3)$

O maior auto-valor neste caso também se encontra no setor  $m_1 = m_2 = \frac{MN}{2}$ . A princípio, poderíamos pensar em utilizar as mesmas funções auxiliares do caso  $su(2|1)$  para o modelo (1.3.19). Entretanto, as funções  $q_{1,2}^h(x)$  possuem propriedades de analiticidade diferentes do caso precedente. A equação (2.1.17), que de certo modo define as raízes do tipo buraco, indica que o grau dos polinômios  $q_{1,2}^h(x)$  deixa de ser  $\frac{MN}{2}$  e passa a ser  $MN$ . Mais especificamente, esta duplicação no número de raízes é tal que as duas funções possuem zeros próximos aos eixos  $\Im(z) = \pm i$ . No caso precedente, o fato destas funções possuírem raízes totalmente acima de  $\Im(z) = i$  ou totalmente abaixo de  $\Im(z) = -i$  implicava que uma ou outra função não contribuía na transformada de Fourier para  $k > 0$  ou  $k < 0$ . Logo o número de funções auxiliares propostas era suficiente para formar uma conjunto auto-consistente de equações integrais não-lineares. Visto que isto não é mais possível, faz-se necessário complementar o conjunto de funções auxiliares precedentes.

O conjunto de funções auxiliares para o caso  $su(3)$  foi obtido em [41]. A ideia foi a de utilizar fusão anti-simétrica[69] para obter a representação conjugada do modelo  $su(3)$  no espaço quântico. A integrabilidade é garantida mais uma vez, devido à equação de Yang-Baxter, resultando na mesma equação de Bethe da representação fundamental. O auto-valor da nova matriz de transferência quântica é escrito em termos de produtos dos  $\lambda_j(x)$ , como é típico no processo de fusão[41].

$$\Lambda^c(x) = \lambda_1(x - \frac{i}{2})\lambda_2(x + \frac{i}{2}) + \lambda_1(x - \frac{i}{2})\lambda_3(x + \frac{i}{2}) + \lambda_2(x - \frac{i}{2})\lambda_3(x + \frac{i}{2}), \quad (2.1.22)$$

Nesta fusão, a matriz de transferência fundida possui a mesma dimensão que a matriz de transferência original. Logo podemos pensar na seguinte atribuição

$$\lambda_1^c(x) := \lambda_2(x - \frac{i}{2})\lambda_3(x + \frac{i}{2}), \quad \lambda_2^c(x) := \lambda_1(x - \frac{i}{2})\lambda_3(x + \frac{i}{2}), \quad \lambda_3^c(x) := \lambda_1(x - \frac{i}{2})\lambda_2(x + \frac{i}{2}), \quad (2.1.23)$$

e propor funções auxiliares idênticas a (2.1.16), utilizando os blocos  $\lambda_j^c(x)$ . As funções

auxiliares ficam

$$\begin{aligned}
\mathfrak{b}_1(x) &= \frac{e^{\beta\mu_1}}{e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3}} \frac{\Phi_-(x + \frac{i}{2})\Phi_+(x - \frac{i}{2})q_1(x + \frac{3i}{2})}{\Phi_+(x + \frac{i}{2})q_2^h(x + \frac{i}{2})}, \\
\mathfrak{b}_2(x) &= \frac{e^{\beta\mu_3}}{e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2}} \frac{\Phi_-(x + \frac{i}{2})\Phi_+(x - \frac{i}{2})q_2(x - \frac{3i}{2})}{\Phi_-(x - \frac{i}{2})q_1^h(x - \frac{i}{2})}, \\
\mathfrak{b}_3(x) &= \frac{e^{\beta(\mu_1 + \mu_2 - \mu_3)}}{e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2}} \frac{\Phi_+(x - i)\Phi_-(x + i)q_2(x + 2i)}{\Phi_-(x + 2i)q_1^h(x)}, \\
\mathfrak{b}_4(x) &= \frac{e^{\beta(\mu_2 + \mu_3 - \mu_1)}}{e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3}} \frac{\Phi_+(x - i)\Phi_-(x + i)q_1(x - 2i)}{\Phi_+(x - 2i)q_2^h(x)}, \\
\mathfrak{b}_5(x) &= e^{\beta(\mu_1 + \mu_3 - \mu_2)} \frac{q_1(x + i)q_2(x - i)}{\Lambda(x)q_1(x - i)q_2(x + i)}, \\
\mathfrak{b}_6(x) &= e^{2\beta\mu_2} \frac{\Phi_+(x - \frac{i}{2})\Phi_-(x + \frac{i}{2})q_1(x - \frac{3i}{2})q_2(x + \frac{3i}{2})}{\Lambda^n(x)q_1(x + \frac{i}{2})q_2(x - \frac{i}{2})}, \tag{2.1.24}
\end{aligned}$$

sendo  $\Lambda^n(x) = \frac{\Lambda^c(x)X(x - \frac{i}{2})X(x + \frac{i}{2})}{\Phi_+(x - \frac{i}{2})\Phi_-(x + \frac{i}{2})}$ . A forma produto das funções  $\mathfrak{B}_j(x) = 1 + \mathfrak{b}_j(x)$  por sua vez fica

$$\begin{aligned}
\mathfrak{B}_1(x) &= \frac{\Lambda(x + \frac{i}{2})}{e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3}} \frac{\Phi_+(x - \frac{i}{2})\Phi_-(x + \frac{3i}{2})q_1(x + \frac{i}{2})}{\Phi_+(x + \frac{i}{2})q_2^h(x + \frac{i}{2})}, \\
\mathfrak{B}_2(x) &= \frac{\Lambda(x - \frac{i}{2})}{e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2}} \frac{\Phi_-(x + \frac{i}{2})\Phi_+(x - \frac{3i}{2})q_2(x - \frac{i}{2})}{\Phi_-(x - \frac{i}{2})q_1^h(x - \frac{i}{2})}, \\
\mathfrak{B}_3(x) &= \frac{\Lambda^n(x + \frac{i}{2})}{e^{\beta\mu_3}(e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2})} \frac{q_2(x + i)}{\Phi_-(x + 2i)q_1^h(x)}, \\
\mathfrak{B}_4(x) &= \frac{\Lambda^n(x - \frac{i}{2})}{e^{\beta\mu_1}(e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3})} \frac{q_1(x - i)}{\Phi_+(x - 2i)q_2^h(x)}, \\
\mathfrak{B}_5(x) &= \frac{(e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3})(e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2})}{e^{\beta\mu_2}\Lambda(x)} \frac{q_1^h(x)q_2^h(x)}{\Phi_+(x - i)\Phi_-(x + i)q_1(x - i)q_2(x + i)}, \\
\mathfrak{B}_6(x) &= (e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2})(e^{\beta\mu_2} + e^{\beta\mu_3}) \frac{q_1^h(x - \frac{i}{2})q_2^h(x + \frac{i}{2})}{\Lambda^n(x)q_1(x + \frac{i}{2})q_2(x - \frac{i}{2})}. \tag{2.1.25}
\end{aligned}$$

Assim como no caso  $su(2|1)$ , os auto-valores  $\Lambda(x)$  e  $\Lambda^n(x)$  são analíticos e não nulos em um domínio que contém a faixa  $-\frac{1}{2} \leq \Im(x) \leq \frac{1}{2}$ . Os zeros das funções  $q_1(x)(q_2(x))$ , as raízes de Bethe, também se localizam sobre uma linha ligeiramente deformada, acima(abaixo) do eixo real, sem cruzar as retas  $\Im(z) = \frac{1}{2}(-\frac{1}{2})$ . Desta forma, nós podemos tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica e obter vínculos não triviais entre as funções auxiliares no espaço  $k$ . Após tomar o limite no número de Trotter, transformar de volta ao espaço real e integrar de  $-\infty$  até  $x$  obtemos o seguinte conjunto de equações

integrais não-lineares

$$\begin{pmatrix} \ln \mathfrak{b}_1(x) \\ \ln \mathfrak{b}_2(x) \\ \ln \mathfrak{b}_3(x) \\ \ln \mathfrak{b}_4(x) \\ \ln \mathfrak{b}_5(x) \\ \ln \mathfrak{b}_6(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\beta d_{1,\theta}(x) + \beta H \\ -\beta d_{1,\theta}(x) - \beta H \\ -\beta d_{2,\theta}(x) + \beta H \\ -\beta d_{2,\theta}(x) - \beta H \\ -\beta d_{2,\theta}(x) \\ -\beta d_{1,\theta}(x) \end{pmatrix} + \mathcal{K} * \begin{pmatrix} \ln \mathfrak{B}_1(x) \\ \ln \mathfrak{B}_2(x) \\ \ln \mathfrak{B}_3(x) \\ \ln \mathfrak{B}_4(x) \\ \ln \mathfrak{B}_5(x) \\ \ln \mathfrak{B}_6(x) \end{pmatrix}, \quad (2.1.26)$$

sendo

$$\mathcal{K}(x) = \begin{pmatrix} K_0(x) & K_1(x) & K_3(x) & K_4(x) & K_3(x) & K_1(x) \\ K_2(x) & K_0(x) & K_5(x) & K_3(x) & K_3(x) & K_2(x) \\ K_3(x) & K_4(x) & K_0(x) & K_1(x) & K_1(x) & K_3(x) \\ K_5(x) & K_3(x) & K_2(x) & K_0(x) & K_2(x) & K_3(x) \\ K_3(x) & K_3(x) & K_2(x) & K_1(x) & K_0(x) & K_6(x) \\ K_2(x) & K_1(x) & K_3(x) & K_3(x) & K_6(x) & K_0(x) \end{pmatrix}, \quad (2.1.27)$$

com

$$\begin{aligned} d_1(x) &= \frac{2\pi \cosh(\frac{\pi x}{3})}{\sqrt{3} \cosh(\pi x)}, & d_2(x) &= \frac{2\pi \sinh(\frac{\pi x}{3})}{\sqrt{3} \sinh(\pi x)}, & K_0(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{1}{1 + e^{|k|} + e^{2|k|}} dx, \\ K_1(x) &= - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{e^{-k} + e^{-\frac{k}{2} + \frac{3|k|}{2}}}{1 + e^{|k|} + e^{2|k|}} dx, & K_2(x) &= - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{e^k + e^{\frac{k}{2} + \frac{3|k|}{2}}}{1 + e^{|k|} + e^{2|k|}} dx, \\ K_3(x) &= - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{e^{\frac{3|k|}{2}}}{1 + e^{|k|} + e^{2|k|}} dx, & K_4(x) &= - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{e^{-\frac{3k}{2}}}{1 + e^{|k|} + e^{2|k|}} dx, \\ K_5(x) &= - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{e^{\frac{3k}{2}}}{1 + e^{|k|} + e^{2|k|}} dx, & K_6(x) &= - \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \frac{2e^{\frac{3|k|}{2}} + e^{\frac{|k|}{2}} + e^{-\frac{|k|}{2}}}{1 + e^{|k|} + e^{2|k|}} dx. \end{aligned} \quad (2.1.28)$$

A partir da solução destas equações, obtemos a energia-livre do modelo (1.3.19) por

$$\begin{aligned} f &= e_0 - \frac{1}{M\beta} \left( \sum_{j=1}^M d_1 * \ln \mathfrak{B}_1(-\theta_{j-1}) + d_1 * \ln \mathfrak{B}_2(-\theta_{j-1}) + d_2 * \ln \mathfrak{B}_3(-\theta_{j-1}) \right. \\ &\quad \left. + d_2 * \ln \mathfrak{B}_4(-\theta_{j-1}) + d_2 * \ln \mathfrak{B}_5(-\theta_{j-1}) + d_1 * \ln \mathfrak{B}_6(-\theta_{j-1}) \right), \end{aligned} \quad (2.1.29)$$

sendo  $e_0$  a energia do estado fundamental por sítio a campo nulo

$$e_0 = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1 + e^{|k|}}{1 + e^{|k|} + e^{2|k|}} \left| \frac{\sum_{j=1}^M e^{ik\theta_{j-1}}}{M} \right|^2 dk. \quad (2.1.30)$$

Note que no caso específico do modelo (1.3.19) devemos fazer  $M = 1$ .

### 2.1.3 Diagrama de fases $su(2|1)$

Nós podemos resolver as equações integrais por iteração, sendo as convoluções calculadas no espaço de Fourier pelo algoritmo da transformada rápida de Fourier. Desta forma é possível calcular o potencial termodinâmico como função da temperatura, do campo magnético e do potencial químico.

Um outro procedimento, igualmente importante, permite evitarmos o cálculo de derivadas numéricas na determinação das quantidades físicas como a entropia e o calor específico. Para tanto, derivamos diretamente as equações integrais, derivadas estas que resultam nas quantidades termodinâmicas que desejamos quando aplicadas ao próprio potencial termodinâmico. O vínculo entre as funções auxiliares “maiúsculas” e “minúsculas” passa a ser

$$\partial_r \log A = \frac{a}{A} \partial_r \log a, \quad \partial_r^2 \log A = \frac{a}{A} \left( \partial_r^2 \log a - \frac{\partial_r \log a \partial_s \log a}{A} \right), \quad (2.1.31)$$

sendo  $r(s)$  qualquer variável entre  $T$ ,  $\mu$  or  $H$  e  $a(A)$  as funções auxiliares.

Com a expressão acima, todas as derivadas do potencial termodinâmico até segunda ordem podem ser obtidas. Entretanto, nós gostaríamos de eliminar  $\mu$  em favor de  $n$ , a densidade de partículas. Isto pode ser feito através do método de Newton. Como a compressibilidade  $\kappa_H = \left( \frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_{H,T}$  está à nossa disposição, nós podemos fixar a densidade de partícula desejada e encontrar o potencial químico correspondente, dentro de uma precisão estipulada. Portanto, nós podemos estudar as propriedades termodinâmicas como função de  $n$ ,  $T$  e  $H$ .

Nosso interesse é descrever o diagrama tridimensional  $n - \theta - H$  do modelo (2.1.6). Para tanto, nós analisamos a entropia a temperatura baixa, mas não nula. Em virtude das leis fundamentais da termodinâmica a entropia se anula em  $T = 0$ . Entretanto, à temperatura pequena, mas finita, a entropia não é nula e se acumula nas proximidades das transições de fase quântica[70]. Embora o valor absoluto da entropia seja pequeno, nós podemos utilizá-lo para traçar o diagrama de fases, tanto mais porque os picos de entropia se tornam pronunciados quanto mais aproximamos da transição de fase.

Iniciemos descrevendo dois limites especiais, o plano  $H - \theta$  a  $n = 1$  que é o modelo de Heisenberg com interações competitivas[46] e o plano  $n - H$  a  $\theta = 0$  que é o modelo t-J usual[40].

Fase	Spin	Carga
I	antiferro comensurável	metal comensurável
II	antiferro comensurável	metal incomensurável
III	antiferro comensurável	isolante
IV	antiferro incomensurável	metal comensurável
V	antiferro incomensurável	metal incomensurável
VI	antiferro incomensurável	isolante
VII	ferro	metal comensurável
VIII	ferro	metal incomensurável
IX	ferro	isolante
X	densidade nula	densidade nula

Tabela 2.1: Classificação das fases

O primeiro caso é mostrado na Figura 2.2a e se refere ao limite  $\mu \rightarrow \infty$ . Este caso foi considerado primeiramente em [65, 71] e consiste em uma fase isolante com três tipos diferentes de ordenamento magnético, sendo estes o ordenamento antiferromagnético comensurável III, antiferromagnético incomensurável IV e ferromagnético IX. A solução das equações integrais não-lineares se mostrou uma valiosa ferramenta para determinar este diagrama de fases[46]. Além disso, as funções auxiliares estão intimamente relacionadas às chamadas “dressed-energy function” (energia vestida) no limite  $T \rightarrow 0$ [40]. Desta forma, as próprias funções auxiliares, soluções das equações integrais, nos oferecem informações adicionais sobre a natureza das transições de fase[72], veja o apêndice B.

É interessante notar que as equações integrais acima (2.1.20) definidas por meio de uma transformação de partícula-buraco na função  $\mathfrak{c}$  possuem a vantagem, em relação às equações usuais para o modelo t-J[40], de que o limite  $n \rightarrow 1$  é obtido naturalmente. Isto ocorre porque a função modificada  $\mathfrak{c}$  se comporta como  $e^{-\beta\mu'}$  neste limite e, portanto, as convoluções contendo  $\ln \mathfrak{C}$  se anulam, resultando nas equações do modelo de Heisenberg com interações competitivas[46].

Em [71] foi investigado minuciosamente o diagrama de fases do limite de semi-preenchimento, Figura 2.2a). Explorando a invariância conforme e calculando correções de tamanho fi-



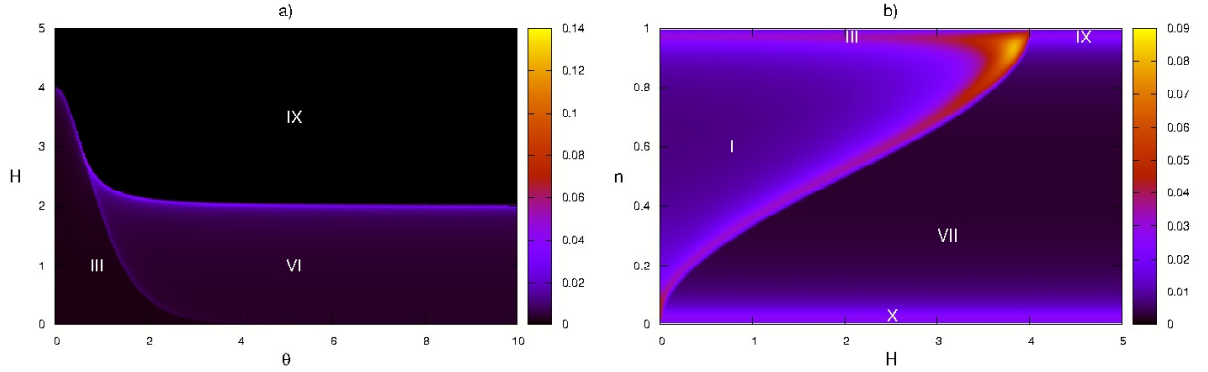


Figura 2.2: Diagrama de fases obtido a partir do perfil de entropia a  $T = 0.005$ : a) limite de semi-preenchimento ( $n \rightarrow 1$ ) b) limite cadeia simples ( $\theta \rightarrow 0$ ).

nito, foi possível mostrar uma descontinuidade no expoente crítico associado ao decaimento algébrico da função de correlação entre spins, quando do cruzamento da linha que separa as fases III e VI. Infelizmente, mesmo com esta evidência de uma transição do tipo comensurável-incomensurável, a linha de transição só pôde ser calculada numericamente. Por outro lado, a linha de transição separando a fase ferromagnética das demais pode ser calculada exatamente[71]. Em virtude da simetria de translação por dois sítios, podemos propor duas excitações na forma de onda de spin com momento  $p = \frac{2\pi k}{2L} \pmod{\pi}$ , uma para os sítios pares e outra para os sítios ímpares. Portanto, para cada valor de momento haverá um módulo de dois estados para o Hamiltoniano no setor com um spin para baixo. Diagonalizar o Hamiltoniano neste subespaço fornece a dispersão dos magnons na forma

$$E^\pm(p) = \frac{1}{1 + \theta^2} \left( -2 + \theta^2(\cos 2p - 1) \pm \sqrt{\theta^2 \sin^2 2p + 4 \cos^2 p} \right), \quad (2.1.32)$$

cujo gráfico apresentamos na Figura 2.3. Isto é suficiente para caracterizar esta linha de transição, pois que em um campo magnético ligeiramente menor que o valor crítico, o estado ferromagnético se torna instável em relação à criação destes magnons e, portanto, o campo magnético crítico é o mínimo da relação de dispersão, considerada nula a energia do estado ferromagnético.

A relação de dispersão sofre uma mudança qualitativa ao variarmos o parâmetro  $\theta$ , consoante ao que ocorre com os “driving terms” das equações integrais acima. Para  $\theta$  menor que  $\frac{\sqrt{3}}{3}$  o mínimo ocorre em  $p = 0$ , enquanto para  $\theta$  maior que  $\frac{\sqrt{3}}{3}$  existem dois mínimos degenerados de momento  $p = \pm p_g$ , refletindo uma quebra espontânea da simetria

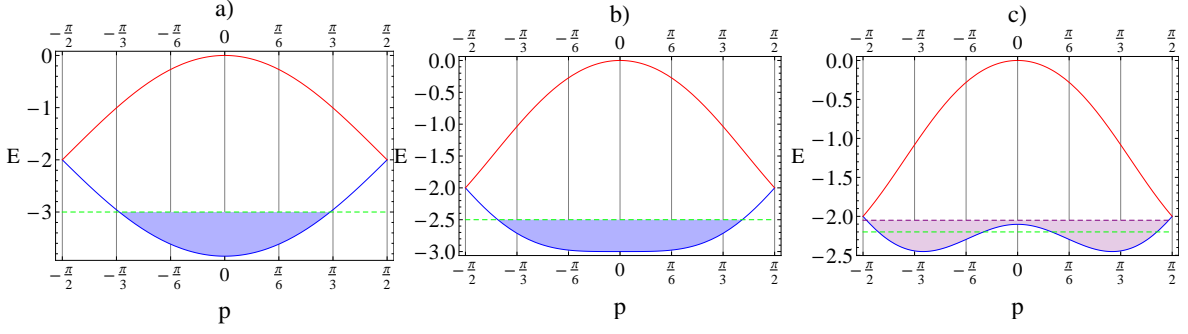


Figura 2.3: Relação de dispersão para ondas de spin/buraco: a)  $\theta = 0.2$ , b)  $\theta = \frac{\sqrt{3}}{3}$ , c)  $\theta = 0.95$ . A simetria de paridade é quebrada para  $\theta > \frac{\sqrt{3}}{3}$ . As ondas de buraco criadas sobre um “substrato” ferromagnético não interagem, sendo possível preencher o espectro de excitação de um buraco até a densidade nula. Isto permite estudar exatamente a transição comensurável-incomensurável entre fases ferromagneticamente ordenadas.

de paridade. Para ser mais claro, podemos formar combinações lineares destas duas ondas de spin degeneradas de modo a obter auto-estados do operador de paridade com autovalores opostos  $\pm 1$ . Podemos notar que a relação de dispersão é quadrática ao longo de toda a linha de transição, exceto no ponto triplo onde a mesma se torna quártica.

O segundo limite especial  $\theta \rightarrow 0$  é mostrado na Figura 2.2b. Neste limite nós temos o modelo t-J usual, que é uma cadeia simples sem termos de três corpos que quebrem explicitamente a reversão temporal. Este caso foi primeiramente estudado em [40] onde as propriedades termodinâmicas foram calculadas a campo magnético nulo. Variando o campo magnético externo e a densidade de partículas, nós mostramos que o modelo possui quatro fases diferentes, I, III, VII, IX e uma fase adicional trivial X (densidade nula  $n \rightarrow 0$ ). Não há transições do tipo comensurável-incomensurável aqui. As fases I e VII são ambas metálicas<sup>1</sup> (líquidos de Luttinger), diferindo uma da outra pelo comportamento magnético. A fase I é antiferromagnética e sem gap, enquanto VII é ferromagnética com gap para excitações de spin. As fases III e IX já haviam aparecido no limite anterior. Estas são as análogas isolantes de I e VII.

O comportamento das funções de correlação no estado fundamental, e para grandes

<sup>1</sup>Neste trabalho propomos que todas as fases sem gap para as excitações de carga são metálicas, embora ainda se faz necessário estudar funções de correlação de quatro pontos para ratificar tal afirmação. No entanto, tal estudo está além dos métodos utilizados neste trabalho.

comprimentos de onda, foi calculado a partir das correções de tamanho finito sobre o espectro[73], enquanto as equações integrais não-lineares descrevendo a termodinâmica a temperaturas finitas foram apresentadas em [40]. Ambos os resultados confirmaram características do líquido de Luttinger da fase I. Por exemplo, o cálculo da função de Green eletrônica (tempos iguais), a campo magnético e temperatura zero, fornece uma distribuição de momento com uma singularidade algébrica no momento de Fermi  $\langle n_p \rangle = \langle n_{p_F} \rangle - c|p - p_F|^\eta \text{sgn}(p - p_F)$ , onde  $\eta$  diminui monotonicamente de  $\frac{1}{8}$  até 0, na medida que saímos do limite de semi-preenchimento e vamos para densidade nula. Entretanto, ambas as referências não estudaram completamente o diagrama de fases (Figure 2.2b), uma vez que os campos magnéticos e as densidades não foram apropriadamente escolhidos de forma adentrar a fase VII. Pelo fato de que a fase VII é adjacente à fase IX, devemos ter um líquido de Luttinger com graus de liberdade de spin “congelados” (veja a discussão abaixo). Isto se deve ao fato do campo magnético já ser suficientemente forte para ordenar o sistema em um estado ferromagnético, tal como poderia ser observado do perfil de magnetização.

Com o objetivo de melhor descrever o diagrama de fases de (2.1.6), nós escolhemos mostrar quatro seções de campo constante do diagrama tridimensional com valores  $H = 0$ ,  $H = 0.25$ ,  $H = 3.0$ ,  $H = 4.5$ . Podemos ver dos diagramas das Figuras 2.2a e 2.2b que estas quatro seções devem incorporar todas as fases possíveis.

Em  $H = 0$ , Figura 2.4a, nós temos um líquido de spin antiferromagnético. Chamamos a atenção ao fato de que não existe transição comensurável-incomensurável estritamente em  $n = 1$ , uma vez que o comportamento magnético apenas se modifica na presença de campo externo e que o grau de liberdade de carga se encontra congelado no limite de semi-preenchimento. Portanto, a linha de transição separando as fases I e II é do tipo carga e é aberta em  $n = 1$ . A fase I foi descrita acima como uma fase metálica comensurável antiferromagnética comensurável[40]. A fase II é metálica incomensurável antiferromagnética comensurável, uma vez que a transição de spin comensurável-incomensurável pode ocorrer apenas na presença de campo magnético externo, Figura 2.2a. A distinção acima entre as fases I e II também está de acordo com o comportamento qualitativo das funções auxiliares, Figuras B.1 e B.2 no apêndice B.

Para  $H = 4.5$ , Figura 2.4b, devemos ter ordenamento magnético ferromagnético em todo plano  $n - \theta$ . Isto se deve ao fato de que as várias interações competindo com o orde-

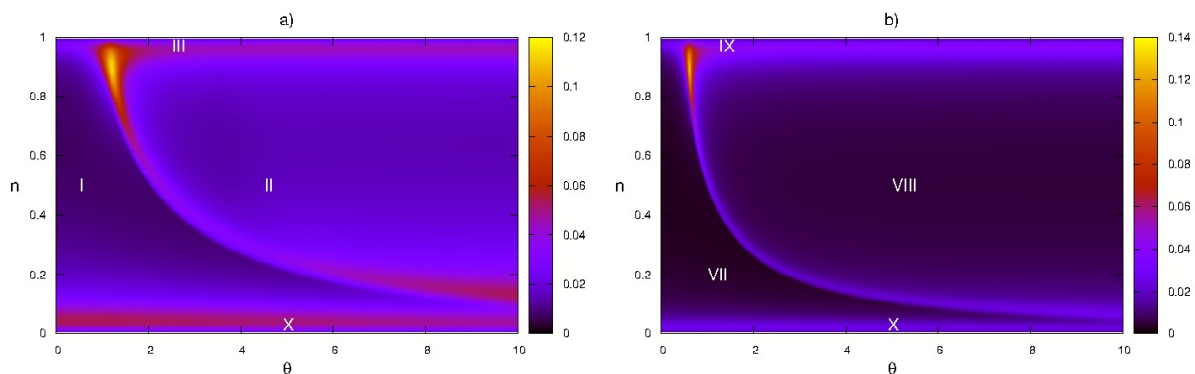


Figura 2.4: Diagrama de fases obtido a partir do perfil de entropia a  $T = 0.005$ : a)  $H = 0$  e b)  $H = 4.5$ .

namento ferromagnético podem contribuir apenas quando existem partículas populando a cadeia. Portanto, tais interações exercem sua completa influência no limite de semi-preenchimento. Desde que neste limite campos magnéticos maiores que 4 já são suficientes para promover o ordenamento ferromagnético, o mesmo será verdade para qualquer densidade de partícula. Pelas mesmas razões do caso de campo nulo, não pode haver transições do tipo comensurável-incomensurável no limite de semi-preenchimento. Portanto, a linha separando as fases VII e VIII é do tipo carga e termina com ponto aberto em  $n = 1$ . As fases VII e IX foram descritas como metal comensurável, ferromagnética comensurável e isolante ferromagnética, respectivamente. A fase VIII é a fase metálica incomensurável ferromagnética.

Semelhantemente às ondas de spin propostas para descrever a linha de transição separando o estado ferromagnético na Figura 2.2a, podemos propor ondas de buraco para descrever a linha de transição separando a fase isolante na Figura 2.4b. A relação de dispersão para a excitação de um buraco também é dada por (2.1.32). Desta análise, poderíamos calcular o potencial químico crítico que leva ao limite de semi-preenchimento. Entretanto, existe uma diferença significativa entre as ondas de buraco e as ondas de spin que foram descritas anteriormente. Para ondas de buraco, as excitações com mais buracos podem ser facilmente calculadas, uma vez que estas ondas não interagem se o “substrato” em que são formadas tiver ordenamento ferromagnético. Isto também pode ser visto das equações do ansatz de Bethe para a matriz de transferência linha a linha

$$\begin{aligned} \left[ \frac{a_+(\lambda_r^1)a_+(\lambda_r^1 - i\theta)}{b(\lambda_r^1)b(\lambda_r^1 - i\theta)} \right]^L &= \left[ \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq r}}^{m_1} \frac{a_-(\lambda_r^1 - \lambda_k^1)b(\lambda_k^1 - \lambda_r^1)}{b(\lambda_r^1 - \lambda_k^1)a_+(\lambda_k^1 - \lambda_r^1)} \right] \prod_{k=1}^{m_2} \frac{b(\lambda_k^2 - \lambda_r^1)}{a_-(\lambda_k^2 - \lambda_r^1)}, \\ \prod_{k=1}^{m_1} \frac{a_-(\lambda_r^2 - \lambda_k^1)}{b(\lambda_r^2 - \lambda_k^1)} &= \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq r}}^{m_2} \frac{a_+(\lambda_r^2 - \lambda_k^2)b(\lambda_k^2 - \lambda_r^2)}{b(\lambda_r^2 - \lambda_k^2)a_-(\lambda_k^2 - \lambda_r^2)}. \end{aligned} \quad (2.1.33)$$

No setor  $m_1 = 2L - N$ ,  $m_2 = 0$ , o segundo conjunto de equações se torna trivial, enquanto o primeiro não possui termos de espalhamento. Portanto, este conjunto de setores se assemelha aos férmions livres, sendo o princípio de exclusão implementado pela desigualdade das raízes do ansatz de Bethe. Além disso, o estado fundamental é obtido pelo preenchimento dos níveis mais baixos de energia da excitação de um buraco. Desta forma, as fases metálicas da Figura 2.4b correspondem, na realidade, a *um* limite não interagente do Líquido de Luttinger, os férmions livres.

Esta propriedade nos permite determinar a linha de transição remanescente na Figura 2.4b, que separa as fases VII e VIII. Para  $\theta$  maior que  $\frac{\sqrt{3}}{3}$ , podemos transitar da fase comensurável para a fase incomensurável variando a densidade de partículas. A linha de transição é obtida fixando o nível de Fermi no máximo local da relação de dispersão (2.1.32), veja Figura 2.3. Seja  $h$  o nível de Fermi coincidente com máximo local, então a equação paramétrica da linha de transição é dada por

$$(\theta, n) = \left( \sqrt{-\left(1 + \frac{4}{h}\right)}, \begin{cases} \frac{\arccos\left(\frac{4+7h+2h^2}{4+h}\right)}{2\pi} & \text{se } -2 \leq h \leq 0 \\ 1 - \frac{\arccos\left(\frac{4+7h+2h^2}{4+h}\right)}{2\pi} & \text{se } -3 \leq h \leq -2 \end{cases} \right), \quad (2.1.34)$$

que está em excelente acordo com os resultados numéricos a temperatura finita ( $T = 0.005$ ) obtidos a partir das equações integrais não-lineares.

A simplicidade dos férmions livres também permite calculemos exatamente algumas funções de correlação a qualquer distância. Por exemplo, consideremos a correlação  $G(j_2 - j_1) = \langle c_{j_1 \uparrow} c_{j_2 \uparrow}^\dagger \rangle$  para  $j_1$  e  $j_2$  ímpares. No limite termodinâmico encontramos

$$G(x) = \frac{1}{\pi} \int_{E^+(p) \leq E_F} \frac{e^{-ipx}}{1 + S^{+2}(p)} dp + \frac{1}{\pi} \int_{E^-(p) \leq E_F} \frac{e^{-ipx}}{1 + S^{-2}(p)} dp, \quad (2.1.35)$$

sendo  $S^\pm(p) = \frac{2 \cos(p)}{\theta \sin 2p \pm \sqrt{\theta^2 \sin^2 2p + 4 \cos^2 p}}$ . Adicionalmente, vamos nos limitar à região em que  $\theta$  é menor que 1 e  $n$  maior que  $\frac{1}{2}$ . Desta forma, nós podemos ignorar completamente o

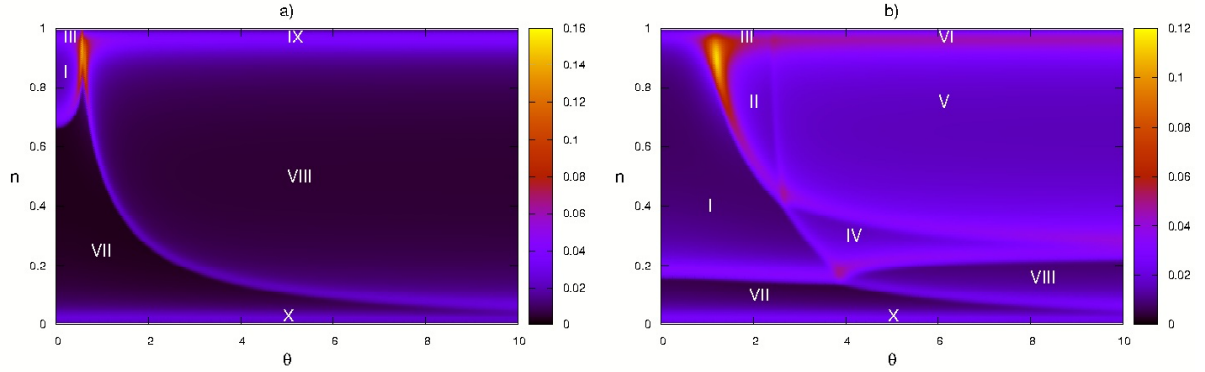


Figura 2.5: Diagrama de fases obtido pelo perfil de entropia a  $T = 0.005$ : a)  $H = 3$  e b)  $H = 0.25$ .

espectro mais energético  $E^+(p)$ , enquanto ainda podemos observar diferenças qualitativas quando saímos de VII para VIII. Encontramos

$$\Re\{G(x)\} = \begin{cases} \frac{2}{\pi x} \sin p_F x & \text{na fase VII} \\ \frac{4}{\pi x} \sin((p_{F_2} - p_{F_1})\frac{x}{2}) \cos((p_{F_1} + p_{F_2})\frac{x}{2}) & \text{na fase VIII} \end{cases}, \quad (2.1.36)$$

sendo  $p_F$  o único momento de Fermi positivo na fase comensurável, enquanto  $p_{F_1}$  e  $p_{F_2}$  são os dois momentos de Fermi na fase incomensurável. Como esperado, no limite termodinâmico  $p_{F_2} - p_{F_1}$  não precisa ser comensurável com  $p_{F_2} + p_{F_1}$ , exceto por um número infinitamente contável de valores de  $n$ . Portanto, o sistema está em uma fase incomensurável flutuante (“floating”)[74], e pode exibir oscilações moduladas sem período definido.

Em seguida, nós examinamos o caso  $H = 3$ , Figura 2.5a. Todas as fases neste diagrama já foram descritas anteriormente. Neste gráfico, além de exibirmos a evolução das linhas de transição na medida que modificamos o campo magnético externo, existe uma mudança interessante associada à terminação das linhas de transição no limite de semi-preenchimento. Aqui o ponto de transição que separa as fases I, VII e VIII não é aberto como nos gráficos anteriores. De I a VII, ou I até VIII através de  $n = 1$ , existe uma transição magnética passando de antiferromagnético comensurável para ferromagnético. Embora a linha decrescente, que marca a transição de carga, seja aberta na referida terminação, a linha crescente, associada à transição magnética, é fechada, em correspondência com a Figura 2.2a.

O último caso,  $H = 0.25$ , é apresentado na Figura 2.5b, que inclui duas novas fa-

ses. Neste caso nós temos uma mistura de efeitos de spin e carga, portanto a situação é mais complicada. Não existe uma descrição simples como antes. Entretanto, podemos especular com bases nas funções auxiliares que a fase IV é metálica comensurável antiferromagnética incomensurável. Tal fase só existe porque ocorre um cruzamento entre as linhas de transição do tipo carga e do tipo spin. Em razão disso, a fase II se torna limitada, dando lugar a outra fase ilimitada, V. Esta fase expressa incomensurabilidade de carga e spin, sendo, portanto, a fase metálica incomensurável antiferromagnética incomensurável.

Como já fora mencionado, associado a cada uma das dez fases existe um comportamento das funções auxiliares qualitativamente diferentes. Nós mostramos isto no Apêndice B, onde as funções auxiliares para alguns pontos típicos de cada fase das Figuras 2.4 e 2.5 podem ser comparadas.

Em todos os diagramas apresentados aqui, nós escolhemos estudar as transições de fase como função de  $n$  ao invés de  $\mu$ . Todavia, nós podemos seguir [75] e considerar  $\mu$  como voltagem externa. É um fato que, exatamente a  $T = 0$ , não é necessário tomar  $\mu \rightarrow \infty$  para restituir o limite de semi-preenchimento. Comparando as equações integrais ou observando o comportamento das funções auxiliares, nós vemos que a condição é que  $\frac{\ln \mathfrak{C}}{\beta}$  se anule, ou equivalentemente,  $\frac{\ln \mathfrak{C}}{\beta} \leq 0$ . Portanto nós encontramos

$$\mu' = \max_x \left[ F_\theta(x) + \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{K}{\beta} * (\ln \mathfrak{B} \bar{\mathfrak{B}})(x) \right], \quad (2.1.37)$$

sendo  $\mathfrak{B}$  e  $\bar{\mathfrak{B}}$  determinados das equações integrais não-lineares no modelo de Heisenberg com interações competitivas[46]. Para campo magnético e  $\theta$  nulos, nós obtemos  $\mu' = 2 \ln 2$ , de acordo com [75]. Semelhantemente, o limite  $n \rightarrow 0$  requer que  $\frac{\ln \mathfrak{B}}{\beta}$  e  $\frac{\ln \bar{\mathfrak{B}}}{\beta}$  se anule para qualquer  $H$ , e  $\frac{\ln \mathfrak{C}}{\beta}$  pode ser aproximado por  $\frac{\ln \mathfrak{C}}{\beta}$ . Portanto, nas fases triviais temos  $\mu' = -\frac{H}{2}$ . Seguindo os argumentos de [75], se iniciarmos com um valor fixo de  $\mu$  tal que  $n = 1$  para um dado  $\theta$ , variando  $\theta$  podemos obter  $n < 1$  se o novo  $\theta$  possui um valor maior  $\mu(\theta)$  correspondendo a  $n = 1$ . Portanto, nós teríamos um aparecimento de “holons” sem modificar a voltagem aplicada. Entretanto, como  $\mu$  é sempre negativo na ausência de campo magnético, não podemos dizer que isto é um ordenamento espontâneo de carga. Transições de primeira ordem estão associadas, em termos de funções auxiliares, a pontos de máximo com valor maior que o limite assintótico em  $x \rightarrow \infty$ . Como podemos ver do apêndice B, não existe soluções com tal comportamento, seja para  $\frac{\ln \mathfrak{B}}{\beta}$  ou  $\frac{\ln \mathfrak{C}}{\beta}$  (considerando

o mar de Dirac invertido).

Esperamos que estes resultados possam ser úteis na descrição de experimentos recentes em sistemas quase unidimensionais; ver Conclusão.

## 2.2 $osp(1|2)$

Nesta seção nós derivamos as equações integrais não-lineares que descrevem o maior auto-valor da matriz de transferência quântica do modelo invariante pela super-álgebra  $osp(1|2)$ . Investigamos a correção mais relevante a baixas temperaturas e determinamos a carga central efetiva do modelo.

### 2.2.1 Equações integrais não-lineares para o maior auto-valor a temperatura finita

A matriz de transferência linha a linha é completamente invariante pela super-álgebra, já que em sua definição tomamos super produto tensoriais e super traços. Por outro lado, para calcular a função de partição de uma cadeia quântica  $Z = \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}}]$ , devemos calcular um traço simples, o que naturalmente se traduz na definição (1.5.10). A repercussão disto no ansatz de Bethe é que devemos modificar os valores esperados dos operadores diagonais da álgebra de Yang-Baxter sobre o estado de referência. Além disso, não existe a alternância de sinais devido ao super-traço. A expressão final para os auto-valores da matriz de transferência quântica para o modelo invariante pela álgebra  $osp(1|2)$  fica

$$\begin{aligned} \Lambda^{QTM}(x) = & (a(\tau + ix)f(\tau - ix))^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^n -\frac{a(ix_j - ix)}{b(ix_j - ix)} + \\ & (b(\tau + ix)b(\tau - ix))^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^n \frac{\bar{a}(ix - ix_j)f(ix - ix_j) - e^2(ix - ix_j)}{b(ix - ix_j)f(ix - ix_j)} \\ & + (f(\tau + ix)a(\tau - ix))^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^n -\frac{b(ix - ix_j)}{f(ix - ix_j)} = \lambda_1(x) + \lambda_2(x) + \lambda_3(x), \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

sendo que as raízes de Bethe  $x_k$  satisfazem o sistema não linear de equações

$$\left( \frac{b(\tau + ix_k)b(\tau - ix_k)}{a(\tau + ix_k)f(\tau - ix_k)} \right)^{\frac{N}{2}} = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n -\frac{b(ix_k - ix_j)f(ix_k - ix_j)}{\bar{a}(ix_k - ix_j)f(ix_k - ix_j) - e^2(ix_k - ix_j)} \frac{a(ix_k - ix_j)}{b(ix_k - ix_j)}, \quad (2.2.2)$$



$a, \bar{a}, b, e, f$  como em (1.3.22). Aqui as equações de Bethe implicam em cancelamento simultâneo dos polos de  $\lambda_1(x) + \lambda_2(x)$  e  $\lambda_2(x) + \lambda_3(x)$ , o que é uma consequência do vínculo

$$\lambda_1(x + \frac{i}{4})\lambda_3(x - \frac{i}{4}) = \lambda_2(x + \frac{i}{4})\lambda_2(x - \frac{i}{4}), \quad (2.2.3)$$

Isto difere da seção anterior, já que para o modelo  $osp(1|2)$  o cancelamento de polos se traduz nas equações de Bethe para um tipo de raiz apenas. Em outras palavras, não temos ansatz de Bethe nested.

Nós podemos definir o auto-valor

$$S^{QTM}(x) = \frac{\Phi_+(x - \frac{i}{4})Q(x - i)Q(x + \frac{i}{2})}{\Phi_+(x - \frac{5i}{4})Q(x)} + \frac{\Phi_-(x + \frac{i}{4})Q(x + i)Q(x - \frac{i}{2})}{\Phi_-(x + \frac{5i}{4})Q(x)}, \quad (2.2.4)$$

cujos polos sobre as raízes de Bethe  $x_k$  se tornam singularidades removíveis devido às equações de Bethe. Além disso, esta função satisfaz uma relação funcional hierárquica da qual podemos obter o auto-valor de interesse através do produto de  $S^{QTM}$ . Em outras palavras, podemos introduzir uma espécie de sistema- $Y$

$$\begin{aligned} y(x) &= \frac{\Phi_+(x - \frac{3i}{2})\Phi_-(x + \frac{3i}{2})Q(x - \frac{3i}{4})Q(x + \frac{3i}{4})\Lambda^{QTM}(x)}{\Phi_+(x - \frac{i}{2})\Phi_-(x + \frac{i}{2})Q(x + \frac{5i}{4})Q(x - \frac{5i}{4})}, \\ Y(x) &= \frac{\Phi_+(x - \frac{3i}{2})\Phi_-(x + \frac{3i}{2})S^{QTM}(x + \frac{i}{4})S^{QTM}(x - \frac{i}{4})}{\Phi_+(x - \frac{i}{2})\Phi_-(x + \frac{i}{2})Q(x + \frac{5i}{4})Q(x - \frac{5i}{4})}, \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

com  $Y(x) = 1 + y(x)$ .

Todavia, devemos notar que o auto-valor  $S^{QTM}$  não aparece na hierarquia de fusão [76] e parece mesmo contrastar com o que conhecemos da teoria de representação para super-álgebra  $osp(1|2)$ . Quando a super-álgebra  $osp(1|2)$  não possui deformação quântica, não deveríamos esperar uma representação de dimensão 2 [77]. A possibilidade de definir a matriz  $S$  como em (2.2.4) aponta a direção oposta. Em vista disto, tomaremos o cuidado de referir à relação funcional  $Y(x) = 1 + y(x)$  apenas como uma hierarquia funcional e não como uma hierarquia de fusão até que maior esclarecimento seja obtido.

Podemos estudar as propriedades de analiticidade de  $S^{QTM}$  e  $\Lambda^{QTM}$  para transformar as equações de Bethe em um sistema de equações integrais não-lineares. As raízes de Bethe associadas ao maior auto-valor aparecem em pares de complexo conjugados  $x_k^c \pm i\alpha_k$ , onde  $x_k^c$  é o centro real e  $\alpha_k$  é a parte imaginária. Para os nossos propósitos, é suficiente saber que a parte imaginária destas raízes de Bethe é, em módulo, menor que  $\frac{1}{2}$ . Além disso,

ambos auto-valores possuem uma faixa de analiticidade e não nulidade (ANZ) contendo, pelo menos,  $|\Im z| \leq \frac{1}{2}$ .

Explorando a analogia entre o sistema- $Y$  para descrever a termodinâmica da representação de spin-1 para o modelo invariante pela álgebra  $su(2)$ [42, 45] e (2.2.5), utilizaremos as seguintes funções auxiliares

$$\begin{aligned} \mathfrak{b}(x) &= \frac{\lambda_3(x + \frac{i}{4})}{\lambda_1(x + \frac{i}{4}) + \lambda_2(x + \frac{i}{4})} = \frac{\Phi_-(x + \frac{3i}{4})\Phi_-(x + \frac{i}{4})\Phi_+(x - \frac{3i}{4})Q(x + \frac{3i}{2})}{\Phi_-(x + \frac{7i}{4})\Phi_-(x + \frac{5i}{4})\Phi_+(x + \frac{i}{4})S^{QTM}(x)}, \\ \bar{\mathfrak{b}}(x) &= \frac{\lambda_1(x - \frac{i}{4})}{\lambda_2(x - \frac{i}{4}) + \lambda_3(x - \frac{i}{4})} = \frac{\Phi_+(x - \frac{3i}{4})\Phi_+(x - \frac{i}{4})\Phi_-(x + \frac{3i}{4})Q(x - \frac{3i}{2})}{\Phi_+(x - \frac{7i}{4})\Phi_+(x - \frac{5i}{4})\Phi_-(x - \frac{i}{4})S^{QTM}(x)}, \\ y_c(x) &= \frac{1}{y(x)} = \frac{\Phi_+(x - \frac{i}{2})\Phi_-(x + \frac{i}{2})Q(x + \frac{5i}{4})Q(x - \frac{5i}{4})}{\Phi_+(x - \frac{3i}{2})\Phi_-(x + \frac{3i}{2})Q(x - \frac{3i}{4})Q(x + \frac{3i}{4})\Lambda^{QTM}(x)}, \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

sendo que nós realizamos transformações de partícula-buraco em todas as funções em relação a [42, 45], incluindo  $y(x)$ , cuja função transformada correspondente é  $y_c(x)$ . Também introduzimos as funções trivialmente relacionadas

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}(x) &= \mathfrak{b}(x) + 1 = \frac{\Phi_+(x - \frac{3i}{4})Q(x + \frac{i}{2})\Lambda^{QTM}(x + \frac{i}{4})}{\Phi_+(x + \frac{i}{4})S^{QTM}(x)}, \\ \bar{\mathfrak{B}}(x) &= \bar{\mathfrak{b}}(x) + 1 = \frac{\Phi_-(x + \frac{3i}{4})Q(x - \frac{i}{2})\Lambda^{QTM}(x - \frac{i}{4})}{\Phi_-(x - \frac{i}{4})S(x)}, \\ Y_c(x) &= y_c(x) + 1 = \frac{S^{QTM}(x + \frac{i}{4})S^{QTM}(x - \frac{i}{4})}{Q(x - \frac{3i}{4})Q(x + \frac{3i}{4})\Lambda^{QTM}(x)}. \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

Resolvendo (2.2.7) para  $Q(x)$ ,  $S^{QTM}(x)$  e  $\Lambda^{QTM}(x)$  no espaço de Fourier, substituindo o resultado em (2.2.6), transformando de volta ao espaço real e integrando de  $-\infty$  a  $x$ , nós obtemos

$$\begin{bmatrix} \log \mathfrak{b}(x) \\ \log \bar{\mathfrak{b}}(x) \\ \log y_c(x) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_1(x) & F_2(x) & F_3(x) \\ F_2(-x) & F_1(x) & F_3(-x) \\ F_3(-x) & F_3(x) & F_4(x) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \log \mathfrak{B}(x) \\ \log \bar{\mathfrak{B}}(x) \\ \log Y_c(x) \end{bmatrix} - \beta \begin{bmatrix} dt'(x - \frac{i}{4}) \\ dt'(x + \frac{i}{4}) \\ dt'(x) \end{bmatrix} \quad (2.2.8)$$

sendo

$$\begin{aligned} dt(x) &= -i \log \left[ \frac{e^{-\frac{2\pi x}{3}} + e^{\frac{\pi i}{3}}}{e^{-\frac{2\pi x}{3}} - e^{\frac{\pi i}{3}}} \right] - i \log \left[ \frac{e^{-\frac{2\pi x}{3}} - e^{-\frac{\pi i}{3}}}{e^{-\frac{2\pi x}{3}} + e^{-\frac{\pi i}{3}}} \right], \\ F(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{|k|}{2}} - e^{-|k|}}{1 + e^{-|k|} - e^{-\frac{|k|}{2}}} e^{ikx} dk = \frac{d}{idx} \log \left[ \frac{\Gamma(\frac{1}{6} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{2}{3} + \frac{ix}{3})\Gamma(1 - \frac{ix}{3})}{\Gamma(\frac{1}{6} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{2}{3} - \frac{ix}{3})\Gamma(1 + \frac{ix}{3})} \right], \end{aligned}$$

$F_1(x) = F(x)$  e  $F_j(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{F}_j(k) dk$  com

$$F_2(k) = \begin{cases} \frac{e^{-\frac{k}{2}} - e^{-k} + e^{-2k}}{1 + e^{-k} - e^{-\frac{k}{2}}}, & \text{se } k \geq 0 \\ \frac{e^{\frac{k}{2}}}{1 + e^k - e^{\frac{k}{2}}}, & \text{se } k < 0 \end{cases}.$$

$$F_3(k) = e^{-\frac{k}{4}} F_1(k) + e^{\frac{k}{4}} F_2(k),$$

$$F_4(k) = e^{\frac{k}{4}} F_3(k) + e^{-\frac{k}{4}} F_3(-k) + 1.$$

Note que já tomamos o limite do número de Trotter, isto é,  $dt'(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{dt(x - \frac{i\beta}{N}) - dt(x + \frac{i\beta}{N})}{-\frac{2i\beta}{N}}$ . Finalmente a energia-livre é obtida da seguinte quantidade tomada em  $x = 0$

$$f(x) = -\frac{1}{\beta} \log \Lambda^{QTM}(x) = e(x) - \frac{1}{\beta} dt'(x) * \left( \log \mathfrak{B} \left( x + \frac{i}{4} \right) + \log \bar{\mathfrak{B}} \left( x - \frac{i}{4} \right) + \log Y_c(x) \right), \quad (2.2.9)$$

sendo que

$$e(x) = -i \frac{d}{dx} \log \left[ \frac{\Gamma(\frac{5}{6} - \frac{ix}{3}) \Gamma(1 - \frac{ix}{3}) \Gamma(\frac{1}{3} + \frac{ix}{3}) \Gamma(\frac{1}{2} + \frac{ix}{3})}{\Gamma(\frac{5}{6} + \frac{ix}{3}) \Gamma(1 + \frac{ix}{3}) \Gamma(\frac{1}{3} - \frac{ix}{3}) \Gamma(\frac{1}{2} - \frac{ix}{3})} \right], \quad (2.2.10)$$

fornece a energia do estado fundamental por sítio,  $e(0) = -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}}$ .

## 2.2.2 Calor específico e carga central efetiva

Como descrito anteriormente, podemos resolver as equações integrais por iteração, utilizando a transformada rápida de Fourier para calcular as convoluções. Para mostrar a eficiência destas equações, calculamos o calor específico (a potencial químico constante) e a suscetibilidade a campo nulo. Note que, a baixas temperaturas, o calor específico se comporta linearmente, evidenciando a ausência de gap, o que se daria por um comportamento exponencial. Mais do que isso, a linearidade indica não apenas invariância por escala como também invariância conforme.

A carga central da teoria de campos conforme associada pode ser extraída a partir da correção mais relevante de baixas temperaturas ao calor específico nulo. Podemos encarar esta carga central como a carga central verdadeira da teoria associada à regularização de rede via matriz de transferência quântica, ou a carga central efetiva da teoria associada ao Hamiltoniano (1.3.23) e, conseqüentemente, à matriz de transferência linha a linha. Isto significa que a carga central do modelo, obtida diretamente das correções de tamanho finito ( $T = 0$ ), pode diferir da carga central efetiva obtida por correções de baixa temperatura

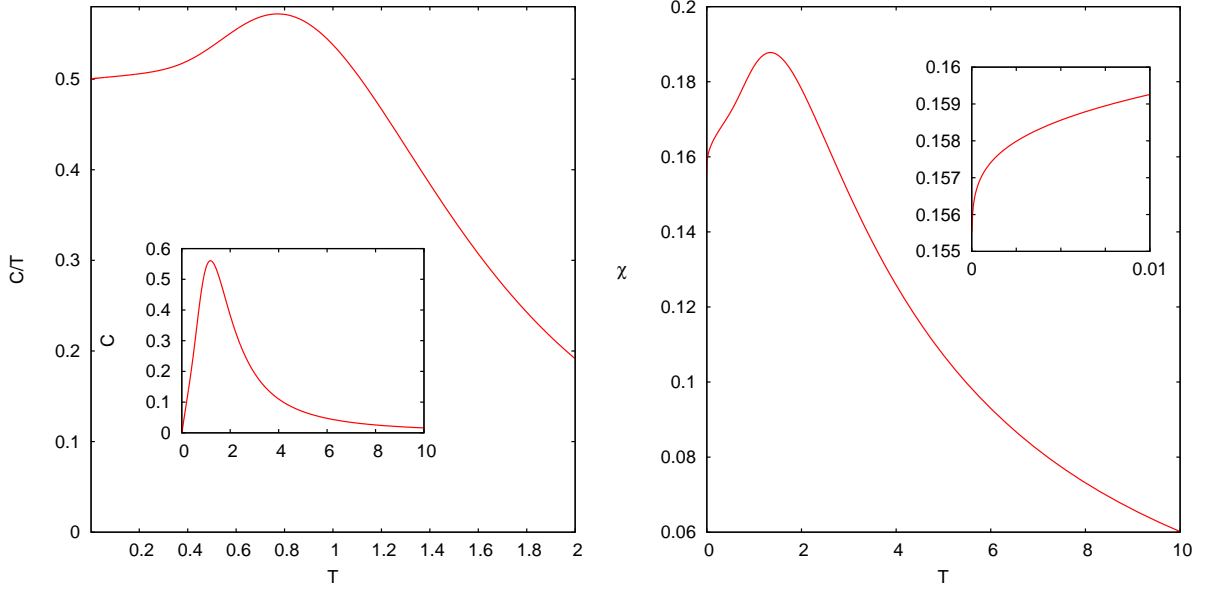


Figura 2.6: No painel esquerdo nós mostramos o calor específico dividido pela temperatura  $C/T$  (no detalhe mostramos  $C$  vs.  $T$ ). No painel direito nós mostramos a suscetibilidade magnética como função da temperatura e no detalhe nós destacamos a existência de correções logarítmicas.

( $L = \infty$ ). Veremos que isto se dá, de fato, para o modelo (1.3.23), invariante pela super-álgebra  $osp(1|2)$ . Para tanto, calcularemos agora a carga central efetiva, reservando o cálculo da carga central verdadeira para o próximo capítulo.

Se fizermos a mudança de variáveis  $s = \pm(s' + \frac{3}{2\pi} \ln \beta)$ , temos que correção da energia-livre em relação à energia do estado fundamental fica

$$\begin{aligned}
f(x) - e(x) = & -\frac{1}{2\pi\beta} \left\{ \int_{-\frac{3}{2\pi} \log \beta}^{\infty} dt'_+(x - s' + \frac{i}{4}) l\mathfrak{B}^+(s') + dt'_-(x + s' + \frac{i}{4}) l\mathfrak{B}^-(s') ds' \right. \\
& + \int_{-\frac{3}{2\pi} \log \beta}^{\infty} dt'_+(x - s' - \frac{i}{4}) l\bar{\mathfrak{B}}^+(s') + dt'_-(x + s' - \frac{i}{4}) l\bar{\mathfrak{B}}^-(s') ds' \\
& \left. + \int_{-\frac{3}{2\pi} \log \beta}^{\infty} dt'_+(x - s') lY_c^+(s') + dt'_-(x + s') lY_c^-(s') ds' \right\}, \quad (2.2.11)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
l\mathbf{b}^\pm(x) &:= \log \mathbf{b}(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log \beta)), & l\mathfrak{B}^\pm(x) &:= \log \mathfrak{B}(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log \beta)), \\
l\bar{\mathbf{b}}^\pm(x) &:= \log \bar{\mathbf{b}}(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log \beta)), & l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(x) &:= \log \bar{\mathfrak{B}}(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log \beta)), \\
ly^\pm(x) &:= \log y(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log \beta)), & lY^\pm(x) &:= \log Y(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log \beta)), \\
dt'_\pm(x) &:= dt'(x \mp \frac{3}{2\pi} \log \beta) \approx \frac{2\pi}{\beta \sin(\frac{\pi}{3})} e^{\pm \frac{2\pi x}{3}}.
\end{aligned} \tag{2.2.12}$$

Por causa de aproximação (2.2.12) encontramos

$$\begin{aligned}
f(x) - e(x) = -\frac{1}{\beta^2 \sin(\frac{\pi}{3})} &\left\{ e^{\frac{2\pi x}{3}} \int_{-\frac{3}{2\pi} \ln \beta}^{\infty} e^{-\frac{2\pi s}{3}} \begin{bmatrix} e^{\frac{\pi i}{6}} \\ e^{-\frac{\pi i}{6}} \\ 1 \end{bmatrix}^t \cdot \begin{bmatrix} l\mathfrak{B}^+(s) \\ l\bar{\mathfrak{B}}^+(s) \\ lY^+(s) \end{bmatrix} ds + \right. \\
&\left. + e^{-\frac{2\pi x}{3}} \int_{-\frac{3}{2\pi} \ln \beta}^{\infty} e^{-\frac{2\pi s}{3}} \begin{bmatrix} e^{-\frac{\pi i}{6}} \\ e^{\frac{\pi i}{6}} \\ 1 \end{bmatrix}^t \cdot \begin{bmatrix} l\mathfrak{B}^-(s) \\ l\bar{\mathfrak{B}}^-(s) \\ lY^-(s) \end{bmatrix} ds \right\}, \tag{2.2.13}
\end{aligned}$$

e as equações integrais ficam

$$\begin{bmatrix} l\mathbf{b}^\pm(s) \\ l\bar{\mathbf{b}}^\pm(s) \\ ly_c^\pm(s) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_1(x) & F_2(x) & F_3(x) \\ F_2(-x) & F_1(x) & F_3(-x) \\ F_3(-x) & F_3(x) & F_4(x) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} l\mathfrak{B}^\pm(s) \\ l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(s) \\ lY_c^\pm(s) \end{bmatrix} - \frac{2\pi e^{-\frac{2\pi s}{3}}}{\sin(\frac{\pi}{3})} \begin{bmatrix} e^{\pm \frac{\pi i}{6}} \\ e^{\mp \frac{\pi i}{6}} \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{2.2.14}$$

Se construirmos as quantidades

$$\Delta_\pm = \int_{-\frac{3 \ln \beta}{2\pi} \approx -\infty}^{\infty} \begin{bmatrix} l\mathfrak{B}^\pm(s) \\ l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(s) \\ lY^\pm(s) \end{bmatrix}^t \cdot \begin{bmatrix} l\mathbf{b}^{\pm'}(s) \\ l\bar{\mathbf{b}}^{\pm'}(s) \\ ly^{\pm'}(s) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} l\mathfrak{B}^{\pm'}(s) \\ l\bar{\mathfrak{B}}^{\pm'}(s) \\ lY^{\pm'}(s) \end{bmatrix}^t \cdot \begin{bmatrix} l\mathbf{b}^\pm(s) \\ l\bar{\mathbf{b}}^\pm(s) \\ ly^\pm(s) \end{bmatrix} ds, \tag{2.2.15}$$

podemos mostrar que as contribuições do kernel em (2.2.14) se cancelam exatamente por conta da simetria  $F_{ij}(x) = F_{ji}(-x)$ . Desta forma, obtemos

$$\begin{aligned}
f(x) - e(x) &\approx -\frac{3}{8\pi^2 \beta^2} \left( e^{\frac{2\pi x}{3}} \Delta_+ + e^{-\frac{2\pi x}{3}} \Delta_- \right) = \\
&- \frac{3 \cosh(\frac{2\pi x}{3})}{4\pi^2 \beta^2} (L_+(\mathbf{b}(\infty)) + L_+(\bar{\mathbf{b}}(\infty)) + L_+(y_c(\infty))) = \\
&- \frac{3 \cosh(\frac{2\pi x}{3})}{4\pi^2 \beta^2} \left( 2L_+\left(\frac{1}{2}\right) + L_+\left(\frac{1}{3}\right) \right). \tag{2.2.16}
\end{aligned}$$

A função de di-log de Rogers satisfaz, entre outras, as seguintes relações funcionais[81, 42]

$$L_+(v) + L_+(1/v) = \frac{\pi^2}{6}, \quad (2.2.17)$$

$$2L_+\left(\frac{1}{n}\right) + \sum_{j=2}^n L_+\left(\frac{1}{j^2-1}\right) = \frac{\pi^2}{6}, \quad (2.2.18)$$

de onde encontramos

$$f(x) - e(x) \approx -\frac{\cosh\left(\frac{2\pi x}{3}\right)}{4\beta^2} \Rightarrow c_{eff} = \frac{3}{2\pi}v_s = 1, \quad (2.2.19)$$

sendo  $v_s = \frac{2\pi}{3}$  a velocidade do som[78].

Podemos ver que a carga central efetiva está de pleno acordo com o resultado numérico, ver Figura 2.6. Isto demonstra os predicados da formulação das equações integrais aqui derivadas, tanto no que diz respeito ao lado prático de extrair valores numéricos, como do ponto de vista analítico para obter resultados exatos.

Em [48] foi a primeira vez que este tipo de equações integrais foi derivado para modelos  $osp(n|2m)$  invariantes. Esperamos que o nosso avanço possa dar maior ensejo a futuros estudos para modelos com este tipo de simetria.

# Capítulo 3

## Correções de tamanho finito

Neste capítulo estaremos interessados em calcular correções de tamanho finito, o que pode ser feito diretamente a partir da matriz de transferência linha a linha. Para isto, utilizaremos a mesma metodologia aplicada no capítulo anterior, isto é, derivaremos conjuntos finitos de equações integrais não-lineares. É nesta linguagem que nós vamos discorrer sobre os nossos recentes desenvolvimentos para derivação das equações integrais dos modelos  $su(l)$  invariantes. Assim, nós evitamos quaisquer complicações advindas do mapeamento de Trotter-Suzuki para abarcar o problema na essência. Além disso, obtemos a carga central do modelo  $osp(1|2)$  invariante apresentado no capítulo 1.

### 3.1 Em direção à formulação sistemática das equações integrais não-lineares para modelos $su(l)$ invariantes

A grande dificuldade de formular as equações integrais não-lineares para um modelo Yang-Baxter integrável está na forma não sistemática de fornecer as funções auxiliares relevantes. Além disso, para um mesmo problema, pode haver mais de um conjunto de funções auxiliares que resultam em um conjunto finito e completo de equações integrais não-lineares[72]. Neste contexto, é relevante encontrar uma forma “canônica” de se obter um sistema de equações e relacioná-lo aos demais.

Investigamos, aqui, uma proposta de fornecer as funções auxiliares de forma sistemá-

tica. As funções auxiliares são definidas em termos do chamado fluxo de Bäcklund[79].

O fluxo de Bäcklund consiste em conjunto de relações funcionais cuja consistência resulta no sistema- $T$ [34] para fusão de matrizes de transferência. Assim, esta “tecnologia” sintetiza as relações funcionais da fusão bem como as relações entre as matrizes de transferência que aparecem nos diferentes níveis do ansatz de Bethe nested.

No que segue, iremos nos restringir à matriz de transferência linha a linha de modelos invariantes pela álgebra  $su(l)$ . Particularmente, estamos interessados no espectro da representação fundamental cujos pesos de Boltzmann são dados por

$$\mathcal{L}(\lambda) = P - \frac{\lambda}{2}\text{Id} \Rightarrow T(\lambda) = \text{tr}_A \mathcal{L}_{AL}(\lambda) \dots \mathcal{L}_{A1}(\lambda). \quad (3.1.1)$$

Note que, por questões de conveniência, modificamos ligeiramente a parametrização correspondente à solução (1.2.28).

Apesar de nosso interesse particular por esta matriz de transferência, sabemos que as matrizes obtidas por fusão no espaço auxiliar pertencem à mesma família de operadores comutantes. Assim sendo, o problema também envolve, naturalmente, o cálculo do espectro destas matrizes.

### 3.1.1 Linearização do sistema- $T$

Com a escolha da parametrização anterior, existem dois pontos singulares para a matriz  $\mathcal{L}$ : em  $\lambda = -2$  resulta o projetor simétrico, enquanto em  $\lambda = 2$  resulta o projetor anti-simétrico. Disto resulta uma hierarquia de fusão entre matrizes de transferência com diferentes representações no espaço auxiliar. Manipulando esta hierarquia, pode-se provar por indução o chamado sistema- $T$ [34]

$$T_s^a(\lambda + 1)T_s^a(\lambda - 1) = T_{s-1}^a(\lambda)T_{s+1}^a(\lambda) + T_s^{a+1}(\lambda)T_s^{a-1}(\lambda). \quad (3.1.2)$$

Aqui  $a$  e  $s$  denotam uma representação que corresponde a um Young tableaux retangular com  $a$  linhas e  $s$  colunas. Em outras palavras,  $a$  é o índice anti-simétrico e  $s$  o índice simétrico. Nos espaços quânticos tomamos a representação fundamental, equivalente a  $a = 1$  e  $s = 1$ .

Vamos considerar o sistema- $T$  como equação fundamental da qual queremos deduzir o espectro de  $T_1^1(\lambda)$ . Nosso problema, no entanto, requer algo mais além das equações



(3.1.2). Este sistema de equações é um conjunto de relações funcionais bilineares e, por si só, não proibem que os índices simétrico  $s$  e anti-simétrico  $a$  não possam ser negativos. Ao sistema- $T$  devemos fornecer condições de contorno, cujo conhecimento adquirimos através da hierarquia de fusão realizada explicitamente. Temos

$$T_s^0(\lambda) = \phi(\lambda + s) \quad \Rightarrow \quad T_s^{-1}(\lambda) = 0, \quad (3.1.3)$$

$$T_s^l(\lambda) = \phi(\lambda - s - l) \quad \Rightarrow \quad T_s^{l+1}(\lambda) = 0, \quad (3.1.4)$$

$$T_0^a(\lambda) = \phi(\lambda - a) \quad \Rightarrow \quad T_{-1}^a(\lambda) = 0, \quad (3.1.5)$$

sendo  $\phi(\lambda) = (-\frac{\lambda}{2})^L$  um polinômio de grau  $L$ . Com esta escolha, todas as matrizes  $T_s^a(\lambda)$  serão polinômios de grau  $L$  e, por isso mesmo, basta o conhecimento de um número finito de pontos distintos  $(v_m, T_s^a(v_m))$  para que se determine estas matrizes. Além disso, acresce notar que as condições de contorno (3.1.3-3.1.5) são auto-consistentes.

Como estas matrizes comutam, a relação funcional (3.1.2) vale também para os auto-valores associado a um mesmo auto-estado. Assumida as condições de contorno e de analiticidade anteriores, vemos que não é necessário conhecer o auto-valor para todo parâmetro espectral  $\lambda \in \mathbb{C}$ . A partir de um número finito de pontos, é possível reconstruir a função analítica  $T_s^a(\lambda)$ . Isto nos permite estabelecer uma relação entre matrizes de transferência de modelos integráveis quânticos e as funções  $\tau$  da integrabilidade clássica, que satisfazem as chamadas equações bilineares de Hirota da diferença (HBDE)[79]

$$\tau_n(k, m)\tau_n(k-1, m+1) = \tau_n(k-1, m)\tau_n(k, m+1) + \tau_{n+1}(k, m)\tau_{n-1}(k-1, m+1). \quad (3.1.6)$$

De fato, se mapearmos cada termo de (3.1.2) em (3.1.6) na sequência em que são apresentados, teremos a relação entre índices

$$\begin{bmatrix} a \\ s \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n \\ k \\ m \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \tau_n(k, m) \equiv T_{k+m}^n(k-m-n). \quad (3.1.7)$$

De outra forma podemos dizer que se  $T_s^a(\lambda)$  satisfaz os sistema- $T$ , então  $T_{k+m}^n(k-m-n)$  satisfaz HBDE.

É possível estabelecer outros mapeamentos do sistema- $T$  para HBDE se reordenarmos os termos da equação, reconhecendo a comutatividade da soma e do produto de números

em  $\mathbb{C}$ . Tem-se  $\tau_n(k, m) \equiv T_{\pm(k+m)}^{\pm n}(\pm(k-m-n))$  ou  $\tau_n(k, m) \equiv T_{\pm n}^{\pm(k+m)}(\pm(k-m-n))$ . Para todos os propósitos, estes outros mapeamentos não fornecem nenhuma informação adicional.

A vantagem de trabalhar com HBDE ao invés do sistema- $T$  é que explicitamos o fato de precisar apenas de conjunto discreto de argumentos  $\lambda$  para resolver este sistema de equações bilineares da diferença.

Agora nós vamos mostrar que HBDE possui uma representação de curvatura nula [79], o que permite “linearizar” este sistema de equações funcionais. Consideremos uma função vetorial  $\psi_n(k, m)$  onde  $n$  denota a componente e  $(k, m)$  denotam coordenadas numa rede retangular. Sejam  $P(k, m)$  e  $M(k, m)$  operadores de translação na rede tais que  $P(k, m)\psi(k+1, m) = \psi(k, m)$  e  $M(k, m)\psi(k, m+1) = \psi(k, m)$ , a condição de curvatura nula implica na relação de consistência para estes operadores

$$P(k, m) \cdot M(k+1, m) = M(k, m) \cdot P(k, m+1), \quad (3.1.8)$$

uma vez que as translações sucessivas de  $\psi(k+1, m+1)$  para  $\psi(k, m)$  não devem depender do caminho escolhido. Se propusermos as matrizes de translação

$$(P(k, m))_{nn'} = \delta_{n, n'-1} + \delta_{n, n'} V^n(k, m), \quad V^n(k, m) = \frac{\tau_n(k+1, m)\tau_{n+1}(k, m)}{\tau_n(k, m)\tau_{n+1}(k+1, m)}, \quad (3.1.9)$$

$$(M(k, m))_{nn'} = \delta_{n, n'} + \delta_{n, n'+1} W^n(k, m), \quad W^n(k, m) = \frac{\tau_{n-1}(k, m+1)\tau_{n+1}(k, m)}{\tau_n(k, m)\tau_n(k, m)}, \quad (3.1.10)$$

a condição de curvatura nula implica que os termos não triviais de ordem 0 e 2 nos “potenciais”  $V$  e  $W$  são automaticamente satisfeitos, enquanto que o termo não trivial de ordem 1 pode ser escrito como

$$H_n(k, m) = H_{n+1}(k, m), \quad H_n(k, m) := \frac{\tau_n(k-1, m)\tau_n(k, m+1) + \tau_{n+1}(k, m)\tau_{n-1}(k-1, m+1)}{\tau_n(k, m)\tau_n(k-1, m+1)}. \quad (3.1.11)$$

Se levarmos em conta a condição de contorno (3.1.3) encontramos  $H_0(k, m) = 1$ , de onde segue que  $H_n(k, m) = 1$  para todo  $n$  e, portanto, HBDE é satisfeita. Desta forma, podemos afirmar que a conjunção de condição de curvatura nula e condições de contorno implicam em HBDE e, sendo assim, podemos trocar HBDE pelo sistema linear equivalente  $P(k, m)\psi(k+1, m) = \psi(k, m)$  e  $M(k, m)\psi(k, m+1) = \psi(k, m)$ . Renormalizando a função

de onda vetorial por  $f_n(k, m) = \psi_n(k, m)\tau_n(k, m)$ , encontramos

$$\tau_{n+1}(k+1, m)f_n(k, m) = \tau_n(k, m)f_{n+1}(k+1, m) + \tau_{n+1}(k, m)f_n(k+1, m), \quad (3.1.12)$$

$$\tau_n(k, m+1)f_n(k, m) = \tau_{n+1}(k, m)f_{n-1}(k, m+1) + \tau_n(k, m)f_n(k, m+1), \quad (3.1.13)$$

ou nas variáveis diretas

$$T_{s+1}^{a+1}(\lambda)F_s^a(\lambda) = T_s^a(\lambda)F_{s+1}^{a+1}(\lambda) + T_s^{a+1}(\lambda-1)F_{s+1}^a(\lambda+1), \quad (3.1.14)$$

$$T_{s+1}^a(\lambda-1)F_s^a(\lambda) = T_s^{a+1}(\lambda-1)F_{s+1}^{a-1}(\lambda) + T_s^a(\lambda)F_{s+1}^a(\lambda-1), \quad (3.1.15)$$

onde  $f_n(k, m) \equiv F_{k+m}^n(k-m-n)$ .

### 3.1.2 Quase dualidade e fluxo de Bäcklund

Nas equações (3.1.14) e (3.1.15) encaramos  $T_s^a(\lambda)$  como potencial e  $F_s^a(\lambda)$  como função de onda. Queremos mostrar agora que existe uma quase dualidade entre potencial e função de onda[79].

Voltando às coordenadas cone de luz, podemos definir  $t_n(k, m) = \frac{\tau_n(k, m)}{f_n(k, m)}$  para  $f_n(k, m) \neq 0$ , de onde segue que as equações (3.1.14) e (3.1.15) são escritas como

$$t_n(k, m) - t_n(k, m-1) = \underbrace{\frac{f_{n-1}(k, m)f_{n+1}(k, m-1)}{f_n(k, m-1)f_n(k, m)}}_{\bar{W}^n(k, m-1)} t_{n+1}(k, m-1), \quad (3.1.16)$$

$$t_n(k, m) - t_{n-1}(k-1, m) = \underbrace{\frac{f_{n-1}(k, m)f_n(k-1, m)}{f_{n-1}(k-1, m)f_n(k, m)}}_{\bar{V}^{n-1}(k-1, m)} t_{n+1}(k, m-1). \quad (3.1.17)$$

Na forma acima, rapidamente identificamos os operadores de translação

$$(\bar{P}(k, m))_{nn'} = \delta_{n, n'+1} + \delta_{n, n'} \bar{V}^{n-1}(k-1, m), \quad (3.1.18)$$

$$(\bar{M}(k, m))_{nn'} = \delta_{n, n'} + \delta_{n, n'-1} \bar{W}^n(k, m-1), \quad (3.1.19)$$

que naturalmente devem satisfazer a condição de curvatura nula para que o potencial  $\tau_n(k, m)$  seja unicamente definido para cada sítio da rede  $(k, m)$

$$\bar{P}(k, m) \cdot \bar{M}(k-1, m) = \bar{M}(k, m) \cdot \bar{P}(k, m-1). \quad (3.1.20)$$

Novamente os termos de ordem 0 e 2 nos potenciais são satisfeitos automaticamente, enquanto que o termo de ordem 1 resulta em

$$\bar{H}_n(k, m) = \bar{H}_{n-1}(k, m), \quad \bar{H}_n(k, m) := \frac{f_n(k-1, m)f_n(k, m+1) + f_{n+1}(k, m)f_{n-1}(k-1, m+1)}{f_n(k, m)f_n(k-1, m+1)} \quad (3.1.21)$$

de modo que resta apenas avaliar as condições de contorno para provar que  $f_n(k, m)$  também satisfaz HBDE.

As condições de contorno (3.1.3-3.1.5) impostas a (3.1.14) e (3.1.15) implicam em condições de contorno para as funções  $F_s^a(\lambda)$ . Por exemplo, vamos tentar obter condições de contorno análogas a (3.1.4).

Utilizando  $a = l$  em (3.1.14) obtemos  $F_s^{l+1}(\lambda) = 0$ . Em seguida, utilizando  $a = l$  em (3.1.15), temos que a forma mais geral da função  $F_s^l(\lambda)$  é  $\phi(\lambda - s - l)y(\lambda + s)$ , sendo  $y(\lambda)$  uma função qualquer. Utilizando, agora,  $a = l - 1$  em (3.1.14), obtemos  $F_s^{l-1}(\lambda) = F_{s+1}^{l-1}(\lambda) + y(\lambda + s + 1)T_s^{l-1}(\lambda)$ . Agora, colocando primeiramente  $s = 0$  em (3.1.14) e depois  $a = l$ , encontramos  $F_1^l(\lambda + 1)\phi(\lambda - 2 - l) = 0$ . Se usarmos  $\phi = 0$ , teremos um problema trivial; por outro lado  $F_1^l(\lambda) = 0 \Rightarrow y(\lambda) = 0 \Rightarrow F_s^l(\lambda) = 0$  e

$$F_s^{l-1}(\lambda) = F_{s+1}^{l-1}(\lambda + 1) \Rightarrow F_s^{l-1}(\lambda) := Q_{l-1}(\lambda - s). \quad (3.1.22)$$

Note que é necessário fazer uso da auto-consistência das condições de contorno (3.1.3-3.1.5). Procedendo como explicado acima, encontramos as seguintes condições de contorno

$$F_s^0(\lambda) = Q_{l-1}(\lambda + s) \Rightarrow F_s^{-1}(\lambda) = 0, \quad (3.1.23)$$

$$F_s^{l-1}(\lambda) = Q_{l-1}(\lambda - s - (l - 1)) \Rightarrow F_s^l(\lambda) = 0, \quad (3.1.24)$$

$$F_0^a(\lambda) = Q_{l-1}(\lambda - a) \Rightarrow F_{-1}^a(\lambda) = 0. \quad (3.1.25)$$

Uma vez que a condição de contorno (3.1.3) é semelhante a (3.1.23), temos que (3.1.21) fornece  $\bar{H}_n(k, m) = 1$  e, portanto, as funções  $F_s^a(\lambda)$  também satisfazem HBDE nas coordenadas cone de luz ou sistema- $T$  nas coordenadas diretas:

$$F_s^a(\lambda + 1)F_s^a(\lambda - 1) = F_{s-1}^a(\lambda)F_{s+1}^a(\lambda) + F_s^{a+1}(\lambda)F_s^{a-1}(\lambda). \quad (3.1.26)$$

Logo, temos uma quase dualidade entre potencial  $T_s^a(\lambda)$  e função de onda  $F_s^a(\lambda)$  nas equações (3.1.14) e (3.1.15). A grande diferença entre estas funções reside na condição

$t = 0$	0	1	0				
$t = 1$	0	$Q_1(\lambda + s)$	$\bar{Q}_1(\lambda - s)$	0			
$t = 2$	0	$Q_2(\lambda + s)$	${}^2F_s^1(\lambda)$	$\bar{Q}_2(\lambda - s)$	0		
$t = 3$	0	$Q_3(\lambda + s)$	${}^3F_s^1(\lambda)$	${}^3F_s^2(\lambda)$	$\bar{Q}_3(\lambda - s)$	0	
$t = 4$	0	$\phi(\lambda + s)$	$T_s^1(\lambda)$	$T_s^2(\lambda)$	$T_s^3(\lambda)$	$\bar{\phi}(\lambda - s)$	0
	$a = -1$	$a = 0$	$a = 1$	$a = 2$	$a = 3$	$a = 4$	$a = 5$

Tabela 3.1: Fluxo de Bäcklund. Denotamos  $Q_4(\lambda) = \phi(\lambda)$  e  $\bar{Q}_j(\lambda) = Q_j(\lambda - j)$ .

de contorno (3.1.24), que nos mostra que o índice anti-simétrico  $a = l$  anula a função de onda.

Como as funções  $F_s^a(\lambda)$  também satisfazem um sistema- $T$ , podemos encontrar uma representação de curvatura nula para estas, do que resulta novas funções com condições de contorno semelhantes a (3.1.23-3.1.25), mas com possíveis valores de índice anti-simétrico reduzido por uma unidade. Desta forma, podemos introduzir um índice extra  $t$  que irá representar a sucessão de “potenciais” e “funções de onda”. Denotamos  ${}^tF_s^a(\lambda)$  uma função genérica, de modo que  ${}^lF_s^a(\lambda) = T_s^a(\lambda)$ . Este conjunto de funções satisfaz as relações funcionais

$${}^{t+1}F_{s+1}^{a+1}(\lambda){}^tF_s^a(\lambda) = {}^{t+1}F_s^a(\lambda){}^tF_{s+1}^{a+1}(\lambda) + {}^{t+1}F_s^{a+1}(\lambda - 1){}^tF_{s+1}^a(\lambda + 1), \quad (3.1.27)$$

$${}^{t+1}F_{s+1}^a(\lambda - 1){}^tF_s^a(\lambda) = {}^{t+1}F_s^{a+1}(\lambda - 1){}^tF_{s+1}^{a-1}(\lambda) + {}^{t+1}F_s^a(\lambda){}^tF_{s+1}^a(\lambda - 1), \quad (3.1.28)$$

que é o chamado fluxo de Bäcklund.

A título de exemplo, explicitamos as funções envolvidas no fluxo de Bäcklund para o modelo  $su(4)$  invariante na Tabela 3.1.

O sistema de equações funcionais (3.1.27) e (3.1.28) devem ser resolvidos em função dos termos nos contornos, isto é, das funções  $Q_j(\lambda)$  e  $\phi(\lambda)$ . Em [79] nos é apresentado uma solução explícita em forma de determinante. Para os nossos propósitos, no entanto, as equações funcionais do fluxo de Bäcklund em si são mais relevantes que a solução, a qual pode ser obtida facilmente de forma recursiva. Em outras palavras, escolhemos um valor máximo para o índice simétrico  $s = s_m$  e resolvemos a equação (3.1.27) para  ${}^{t+1}F_{s+1}^{a+1}(\lambda)$  começando com  $(t, a, s) = (1, 0, 0), (1, 0, 1), \dots, (1, 0, s_m - 1)$ . Resolvido para todos índices simétrico, incrementa-se o índice anti-simétrico até a equação de índices

$(1, l-1, s_m-1)$ . Por fim, incrementa-se o índice “temporal”  $t$  até a equação de índices  $(l-1, l-1, s_m-1)$ . Isto nos permite obter, por exemplo, as expressões

$${}^2F_1^1(\lambda) = Q_2(\lambda-2) \frac{Q_1(\lambda+2)}{Q_1(\lambda)} + Q_2(\lambda) \frac{Q_1(\lambda-2)}{Q_1(\lambda)}, \quad (3.1.29)$$

$${}^3F_1^1(\lambda) = Q_3(\lambda) \left( \frac{Q_1(\lambda-2)}{Q_1(\lambda)} + \frac{Q_2(\lambda-2)Q_1(\lambda+2)}{Q_2(\lambda)Q_1(\lambda)} \right) + Q_3(\lambda-2) \frac{Q_2(\lambda+2)}{Q_2(\lambda)}, \quad (3.1.30)$$

$$(3.1.31)$$

$${}^4F_1^1(\lambda) = \phi(\lambda) \left( \left( \frac{Q_1(\lambda-2)}{Q_1(\lambda)} + \frac{Q_2(\lambda-2)Q_1(\lambda+2)}{Q_2(\lambda)Q_1(\lambda)} \right) + \frac{Q_3(\lambda-2)Q_2(\lambda+2)}{Q_3(\lambda)Q_2(\lambda)} \right) + \phi(\lambda-2) \frac{Q_3(\lambda+2)}{Q_3(\lambda)}. \quad (3.1.32)$$

### 3.1.3 Propriedades de analiticidade e equações integrais não-lineares

Uma vez obtido as expressões de todos os termos do fluxo de Bäcklund, ainda resta o problema de obter as funções do contorno  $Q_j(\lambda)$ . Por conta do sistema- $T$  (3.1.26), em cada “tempo”  $t$ , é necessário que a função  $Q_t$  seja um polinômio de mesmo grau das funções deste sistema. Além disso, para que as funções  ${}^tF_s^a(\lambda)$  sejam analíticas, é necessário que as singularidades associadas aos zeros de  $Q_j(\lambda)$  sejam removíveis, do que resulta as equações de Bethe para os zeros  $\lambda_j^t$  de  $Q_t(\lambda)$ :

$$\frac{Q_{t+1}(\lambda_j^t-2)Q_t(\lambda_j^t+2)Q_{t-1}(\lambda_j^t)}{Q_{t+1}(\lambda_j^t)Q_t(\lambda_j^t-2)Q_{t-1}(\lambda_j^t+2)} = -1, \quad \begin{matrix} t=1, \dots, l-1 \\ j=1, \dots, M_t \end{matrix}, \quad (3.1.33)$$

onde  $Q_0(\lambda) = 1$  e  $Q_l(\lambda) = \phi(\lambda)$ .

A natureza das funções  ${}^tF_s^a(\lambda)$  torna-se evidente agora. Estas funções nada mais são que as matrizes de transferência que resultam da sucessão de problemas auxiliares no ansatz de Bethe nested. Para inserir estes operadores no espaço  $\bigotimes_{j=1}^L \mathbb{C}^l$ , em que atua a matriz de transferência de interesse  $T_1^1(\lambda)$ , é necessário entender cada matriz  ${}^tF_s^a(\lambda)$  como uma soma direta, em que cada bloco carrega uma função com  $Q_{t+1}(\lambda)$  diferente e que define os parâmetros verticais de heterogeneidade. Com isto, vemos que a família de operadores comutantes não abrange apenas as derivadas de  $T_1^1(\lambda)$  e as outras representações  $T_s^a(\lambda)$ , mas todos operadores presentes no fluxo de Bäcklund.

Para estudar as propriedades de analiticidade é conveniente realizar algumas translações. Definamos de modo geral  ${}^t\tilde{F}_s^a(x) = {}^tF_s^a(-ix + l - t + a)$ , o que inclui o caso  $a = 0$

para as funções  $Q_t(\lambda)$ . Por abuso de linguagem, nós vamos omitir o símbolo  $\sim$  daqui para frente. Com esta translação, as equações funcionais do fluxo de Bäcklund ficam

$${}^{t+1}F_{s+1}^{a+1}(x) {}^tF_s^a(x) = {}^{t+1}F_s^a(x+i) {}^tF_{s+1}^{a+1}(x-i) + {}^{t+1}F_s^{a+1}(x-i) {}^tF_{s+1}^a(x+i), \quad (3.1.34)$$

$${}^{t+1}F_{s+1}^a(x) {}^tF_s^a(x) = {}^{t+1}F_s^{a+1}(x-i) {}^tF_{s+1}^{a-1}(x+i) + {}^{t+1}F_s^a(x+i) {}^tF_{s+1}^a(x-i), \quad (3.1.35)$$

e as condições de contorno se tornam mais simétricas

$${}^tF_s^0(x) = Q_t(x+si) \quad \Rightarrow \quad {}^tF_s^{-1}(x) = 0, \quad (3.1.36)$$

$${}^tF_s^t(x) = Q_t(x-si) \quad \Rightarrow \quad {}^tF_s^{t+1}(x) = 0, \quad (3.1.37)$$

$${}^tF_0^a(x) = Q_t(x) \quad \Rightarrow \quad {}^tF_{-1}^a(x) = 0. \quad (3.1.38)$$

O maior auto-valor de  $T_1^1(x)$  é não degenerado quando  $\text{mod}(L, l) = 0$ . Os setores são  $M_t = t\frac{L}{l}$  e todas as raízes  $x_j^t$  são reais. Além disso, os zeros de  ${}^tF_s^a(x)$  se encontram próximo às linhas  $\Im(z) = -a - s$  e  $\Im(z) = t + s - a$ .

Através das equações (3.1.34) e (3.1.35) podemos facilmente definir funções auxiliares e imediatamente encontrar a forma fatorizada das funções minúsculas e maiúsculas. Para isto, basta dividir estas equações por um dos termos do lado direito. A escolha da parcela do lado direito é arbitrária, sendo que uma escolha corresponde a conjugação partícula-buraco da outra. Desta forma, temos as funções auxiliares

$${}^t b_s^a(x - {}^t\alpha_s^a i) = \frac{{}^{t+1}F_s^{a+1}(x-i) {}^tF_{s+1}^a(x+i)}{{}^{t+1}F_s^a(x+i) {}^tF_{s+1}^{a+1}(x-i)} \quad {}^t B_s^a(x - {}^t\alpha_s^a i) = \frac{{}^{t+1}F_{s+1}^{a+1}(x) {}^tF_s^a(x)}{{}^{t+1}F_s^a(x+i) {}^tF_{s+1}^{a+1}(x-i)}, \quad (3.1.39)$$

$${}^t \bar{b}_s^a(x - {}^t\tilde{\alpha}_s^a i) = \frac{{}^{t+1}F_s^a(x+i) {}^tF_{s+1}^a(x-i)}{{}^{t+1}F_s^{a+1}(x-i) {}^tF_{s+1}^{a-1}(x+i)} \quad {}^t \bar{B}_s^a(x - {}^t\tilde{\alpha}_s^a i) = \frac{{}^{t+1}F_{s+1}^a(x) {}^tF_s^a(x)}{{}^{t+1}F_s^{a+1}(x-i) {}^tF_{s+1}^{a-1}(x+i)}, \quad (3.1.40)$$

sendo  ${}^t\alpha_s^a$  e  ${}^t\tilde{\alpha}_s^a$  parâmetros convenientes que fixamos a fim de fazer o melhor uso das hipóteses de analiticidade e para controlar o comportamento do kernel das equações integrais.

Este conjunto de funções auxiliares é infinito uma vez que existe uma infinidade de valores admissíveis para o índice simétrico  $s$ . No entanto, não é necessário utilizar todas estas funções auxiliares. No caso  $su(2)$ , por exemplo, se fixarmos  $s = 0$  obtemos as mesmas funções auxiliares de [35]. Já no caso  $su(3)$ , se fixarmos  $s = 0$  não obtemos as mesmas funções auxiliares de [41]. A título de comparação, definimos

$$\boxed{j}_x = \lambda_j(x) = \phi(x+i) \frac{Q_{j-1}(x+i(-k+j+2))Q_j(x+i(-k-1+j))}{Q_{j-1}(x+i(-k+j))Q_j(x+i(-k+1+j))}, \quad (3.1.41)$$

$$\begin{array}{cccc}
\dot{j}_{1,1} & \dot{j}_{1,2} & \dot{j}_{1,3} & \cdots & \dot{j}_{1,s} \\
\dot{j}_{2,1} & \dot{j}_{2,2} & \dot{j}_{2,3} & \cdots & \dot{j}_{1,s} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\dot{j}_{a,1} & \dot{j}_{a,2} & \dot{j}_{a,3} & \cdots & \dot{j}_{a,s}
\end{array}
_x = \prod_{n=1}^a \prod_{m=1}^s \boxed{j_{n,m}}_{x-i(2n-a)+i(2m-s)}, \quad (3.1.42)$$

de modo que as funções do fluxo de Bäcklund podem ser escritas como

$${}^t F_s^a(x) \propto \begin{array}{cccc} & & & \cdots & \\ & & & \cdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & \cdots & \end{array}^{su(t)}_{(a,s)x} = \sum_{\{j_{n,m}\}^{su(t)}} \begin{array}{cccc} \dot{j}_{1,1} & \dot{j}_{1,2} & \dot{j}_{1,3} & \cdots & \dot{j}_{1,s} \\ \dot{j}_{2,1} & \dot{j}_{2,2} & \dot{j}_{2,3} & \cdots & \dot{j}_{1,s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dot{j}_{a,1} & \dot{j}_{a,2} & \dot{j}_{a,3} & \cdots & \dot{j}_{a,s} \end{array}_x, \quad (3.1.43)$$

sendo que  $\{j_{n,m}\}^{su(t)}$  denota todos os conjuntos de índices admissíveis, isto é, que satisfazem  $j_{n-1,m} < j_{n,m}$  e  $j_{n,m-1} \leq j_{n,m}$ , com  $1 \leq j_{n,m} \leq t$ .

Com estas definições, podemos escrever as funções auxiliares (3.1.39) e (3.1.40) para o caso  $su(3)$  e  $s = 0$  como

$$\text{i) } \frac{\boxed{1}}{\boxed{2}} \quad \text{ii) } \frac{\boxed{2}}{\boxed{1}} \quad \text{iii) } \frac{\boxed{1} + \boxed{2}}{\boxed{3}} \quad \text{iv) } \frac{\boxed{3}}{\boxed{1} + \boxed{2}} \quad \text{v) } \frac{\boxed{1} + \boxed{2}}{\boxed{1} + \boxed{2}} \quad \text{vi) } \frac{\boxed{1} + \boxed{2}}{\boxed{1} + \boxed{2}},$$

sendo que apenas iii e v aparecem em [41]. Devemos dizer ainda que apenas quatro destas seis funções auxiliares aparentam formar um conjunto fechado. Podemos utilizar i, ii, iii, iv ou iii, iv, v, vi.

Mais geralmente, a representação das funções auxiliares (3.1.39) e (3.1.40) em termos de Young tableaux fica

$${}^t \theta_s^a(x) = \frac{\begin{array}{cccc} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{array}^{su(t+1)}_{(a+1,s+1)x} \cdot \begin{array}{ccc} & & \\ & & \\ & & \end{array}^{su(t)}_{(a,s)x} - \begin{array}{cccc} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{array}^{su(t)}_{(a+1,s+1)x} \cdot \begin{array}{ccc} & & \\ & & \\ & & \end{array}^{su(t+1)}_{(a,s)x}}{\begin{array}{cccc} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{array}^{su(t)}_{(a+1,s+1)x} \cdot \begin{array}{ccc} & & \\ & & \\ & & \end{array}^{su(t+1)}_{(a,s)x}}, \quad (3.1.44)$$



$${}^t\bar{b}_s^a(x) = \frac{\begin{array}{c} \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} su(t) \\ (a,s+1)x-i \end{array} \cdot \begin{array}{c} \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} su(t+1) \\ (a,s)x \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} su(t+1) \\ (a,s+1)x-i \end{array} \cdot \begin{array}{c} \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} su(t) \\ (a,s)x \end{array} - \begin{array}{c} \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} su(t) \\ (a,s+1)x-i \end{array} \cdot \begin{array}{c} \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} su(t+1) \\ (a,s)x \end{array} \end{array} \end{array} \quad (3.1.45)$$

Agora passamos a algumas tentativas de obtenção das equações integrais não-lineares.

### Tentativa 1

Para obter equações integrais não-lineares para os modelos invariante pela álgebra  $su(l)$ , nós vamos adotar o seguinte conjunto de funções auxiliares:  $b_k(x) = {}^{l-1}b_0^{k-1}(x)$  e  $\bar{b}_k(x) = {}^{l-1}\bar{b}_0^k(x)$  com  $k = 1, \dots, l-1$ . No caso  $su(2)$  isto fornece as mesmas funções auxiliares de [35] e no caso  $su(3)$  isto equivale a escolher as funções iii, iv, v e vi acima. Os parâmetros de translação  $\alpha$  e  $\bar{\alpha}$  são escolhidos infinitesimalmente positivos e negativos, respectivamente. Seguindo o procedimento já descrito nas seções precedentes, obtemos o seguinte conjunto de equações integrais não-lineares

$$\begin{bmatrix} \ln \bar{b}_1(x) \\ \ln \bar{b}_2(x) \\ \ln \bar{b}_3(x) \\ \vdots \\ \ln \bar{b}_{l-1}(x) \end{bmatrix} = iL \begin{bmatrix} \vec{dt}(x) \\ \vec{dt}(x) \\ \vec{dt}(x) \\ \vdots \\ \vec{dt}(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \overleftarrow{K}_1^d & -\overleftarrow{K}_2^o & -\overleftarrow{K}_3^o & \dots & -\overleftarrow{K}_{l-1}^o \\ -\overleftarrow{K}_1^o & \overleftarrow{K}_2^d & -\overleftarrow{K}_3^o & \dots & -\overleftarrow{K}_{l-1}^o \\ -\overleftarrow{K}_1^o & -\overleftarrow{K}_2^o & \overleftarrow{K}_3^d & \dots & -\overleftarrow{K}_{l-1}^o \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\overleftarrow{K}_1^o & -\overleftarrow{K}_2^o & -\overleftarrow{K}_3^o & \dots & \overleftarrow{K}_{l-1}^d \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \ln \vec{B}_1(x) \\ \ln \vec{B}_2(x) \\ \ln \vec{B}_3(x) \\ \vdots \\ \ln \vec{B}_{l-1}(x) \end{bmatrix}, \quad (3.1.46)$$

sendo

$$\ln \bar{b}_j(x) = \begin{bmatrix} \ln b_j(x) \\ \ln \bar{b}_j(x) \end{bmatrix}, \quad \ln \vec{B}_j(x) = \begin{bmatrix} \ln B_j(x) \\ \ln \bar{B}_j(x) \end{bmatrix}, \quad \vec{dt}(x) = \begin{bmatrix} dt(x) \\ -dt(x) \end{bmatrix}, \quad \overleftarrow{K}_j^{d,o} = \begin{bmatrix} K_j^{d,o} & -K_j^{d,o} \\ -K_j^{d,o} & K_j^{d,o} \end{bmatrix}, \quad (3.1.47)$$

onde o driving term é dado por

$$dt(x) = -i \log(e^{\frac{\pi x}{l}} - e^{\frac{i\pi}{l}}) + i \log(e^{\frac{\pi x}{l}} - e^{\frac{-i\pi}{l}}) + \frac{2\pi(l-1)}{l}, \quad (3.1.48)$$

e os kernels no espaço de Fourier são

$$K_j^d = \frac{1}{\sum_{m=0}^{l-1} e^{2m|k|}} + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq j}}^{l-1} K_m^o(k), \quad K_j^o(k) = \begin{cases} \frac{e^{2jk}}{\sum_{m=0}^{l-1} e^{2mk}} & \text{se } k \geq 0 \\ \frac{e^{-2(l-j)k}}{\sum_{m=0}^{l-1} e^{-2mk}} & \text{se } k < 0 \end{cases}. \quad (3.1.49)$$

O auto-valor fica

$$\log T_1^1(x) = L \log \left[ \frac{\Gamma(1 + \frac{1}{2l} - \frac{ix}{2l})\Gamma(\frac{1}{2l} + \frac{ix}{2l})}{\Gamma(\frac{3}{2l} - \frac{ix}{2l})\Gamma(1 - \frac{1}{2l} + \frac{ix}{2l})} \right] + L \log \left[ \frac{1 + ix}{2} \right] + \sum_{j=1}^{l-1} f_j * \log B_j(x) - \bar{f}_j * \log \bar{B}_j(x), \quad (3.1.50)$$

sendo  $f_j$  e  $\bar{f}_j$  dados no espaço de Fourier por

$$f_j(k) = \frac{e^{2(j-1)k}}{\sum_{m=0}^{l-1} e^{2mk}}, \quad \bar{f}_j(k) = f_j(k) - \delta_{1j}. \quad (3.1.51)$$

Notemos que (3.1.50) fornece a expressão correta para a energia do estado fundamental por sítio.

Resolvendo as equações (3.1.46) no caso mais simples e não trivial,  $su(3)$ , encontramos uma peculiaridade. Em geral resolvemos estas equações iterativamente, começando com um chute inicial trivial,  $\log B_j = 0$ . Fazendo isso para o nosso sistema de equações, obtemos a solução da Figura 3.1a) que está em desacordo com a solução exata, tal como obtida resolvendo as equações de Bethe diretamente ( $L = 6$ ). De duas coisas uma, ou o sistema de equações está errado ou ele tem mais de uma solução, em outras palavras, o processo iterativo possui mais de um ponto fixo. De fato, a segunda afirmação é verdadeira, pois que utilizamos a solução correta como chute inicial e obtivemos a solução numérica correta, Figura 3.1b).

Não é difícil entender o porquê desta multiplicidade de pontos fixos. Na formulação das equações integrais a informação do ansatz de Bethe é dada em termos da ausência de singularidades (associadas às raízes de Bethe) na faixa de analiticidade, do que podemos relacionar as transformadas de Fourier do auto-valor em diferentes eixos paralelos ao eixo real. As equações de Bethe são codificadas desde que estes eixos delimitem um domínio onde se encontrem as singularidades removíveis. De outra forma, as equações de Bethe são irrelevantes para configurar a faixa de analiticidade que não envolva estas singularidades. Na derivação das equações acima nota-se que codificamos a informação de apenas um conjunto de raízes  $x_k^1$  do ansatz de Bethe nested. Por outro lado, uma tentativa de codificar o outro conjunto de raízes  $x_k^2$  resulta, através deste conjunto de funções auxiliares, em Kernel divergente para  $k$  grande, inviabilizando os cálculos numéricos. Desta forma, as equações acima, embora corretas, não determinam a solução do problema.

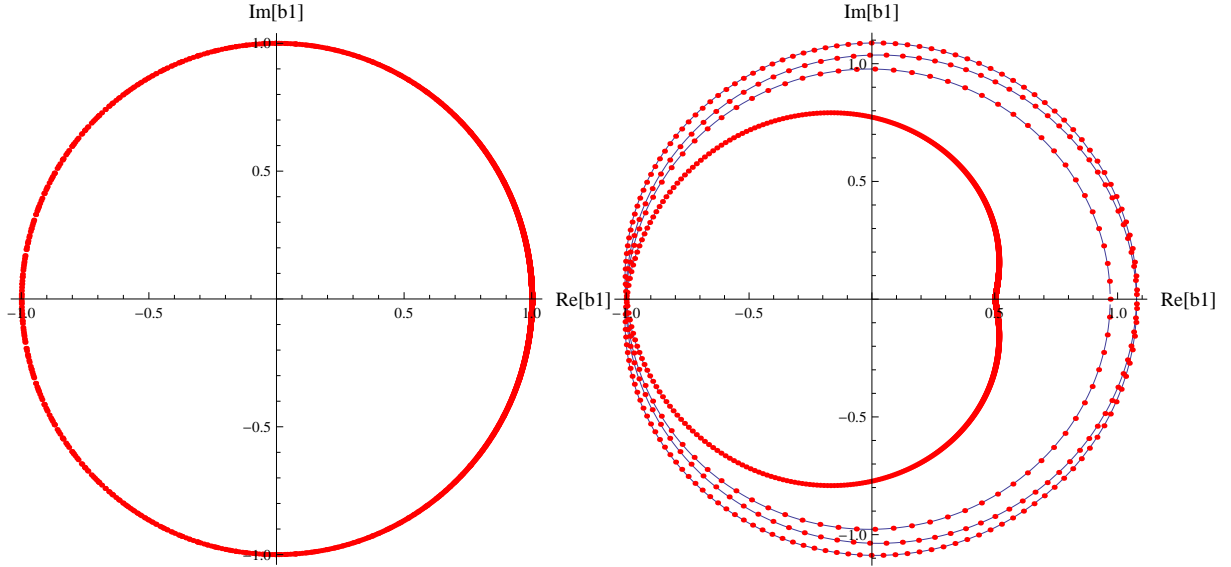


Figura 3.1: a) Solução numérica  $b_1([-15, 15])$  para as equações integrais não-lineares usando o chute inicial  $b_j(x) = 0$ . b) Solução numérica para as equações integrais não-lineares usando como chute inicial a solução correta. A linha azul é a solução correta obtida pelas equações de Bethe,  $L = 6$ .

## Tentativa 2

Nesta segunda tentativa nós vamos considerar as funções auxiliares  $b_k(x) = {}^k b_0^0(x)$  e  $\bar{b}_k(x) = {}^k \bar{b}_0^1(x)$  com  $k = 1, \dots, l-1$ , que aparentam fechar o sistema de equações segundo a contagem de incógnitas. Mais uma vez, para o modelo invariante pela álgebra  $su(2)$  esta proposta reproduz as funções auxiliares conhecidas[35]. Para o modelo invariante pela álgebra  $su(3)$  as funções auxiliares aqui escolhidas equivalem a escolher as funções auxiliares i, ii, iii, iv acima.

Tomando a transformada de Fourier para obter um sistema linear nas funções auxiliares, perceberemos que a solução das equações no espaço de Fourier nos leva a um Kernel divergente para  $l \geq 4$ . Em outras palavras, não existe parâmetros de translação  $\alpha$  e  $\tilde{\alpha}$  que suprimam este efeito, pelo que ficamos restritos aos casos  $l = 2, 3$ .

Este sistema de funções auxiliares parecia, à primeira vista, bastante atraente visto que poderíamos tê-lo deduzido diretamente da forma do auto-valor no ansatz de Bethe algébrico, sem mesmo nos referir ao fluxo de Bäcklund. Mas, diante das dificuldades acima mencionadas, nos limitaremos a olhar o resultado deste sistema para  $su(3)$ , dado

também que o caso  $su(2)$  é idêntico à formulação de [35].

Para o caso  $su(2)$  temos liberdade de escolha dos parâmetros de translação  $|\alpha, \bar{\alpha}| \leq 1$ . Já no caso  $su(3)$  somos obrigados a escolher  $\alpha_1 = -\bar{\alpha}_1 = 1$  e  $\alpha_2 = -\bar{\alpha}_2 = 0$  se quisermos que o kernel não divirja para  $k \rightarrow \pm\infty$ , de modo que podemos resolver as seguintes equações numericamente

$$\begin{bmatrix} \ln b_1(x) \\ \ln \bar{b}_1(x) \\ \ln b_2(x) \\ \ln \bar{b}_2(x) \end{bmatrix} = iL \begin{bmatrix} dt_1(x) \\ dt_2(x) \\ dt_3(x) \\ dt_4(x) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} K_1(x) & -K_1^v(x) & -K_2^o(x+2i) & K_2^o(x+2i) \\ -K_1(x-2i) & K_1^v(x-2i) & K_2^o(x) & -K_2^o(x) \\ -K_2^o(x) & -K_2^o(x) & K_2^d(x) & -K_2^d(x) \\ K_2^o(x) & K_2^o(x) & -K_2^d(x) & K_2^d(x) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \ln B_1(x) \\ \ln \bar{B}_1(x) \\ \ln B_2(x) \\ \ln \bar{B}_2(x) \end{bmatrix}, \quad (3.1.52)$$

sendo os driving-terms dados por

$$dt(x) = i \log \left( 1 + e^{\frac{\pi x}{3}} \right) - i \log \left( 1 + e^{\frac{2\pi i}{3} + \frac{\pi x}{3}} \right), \quad (3.1.53)$$

$dt_1(x) = dt(x)$ ,  $dt_2(x) = -\bar{d}t(x)$ ,  $dt_3(x) = dt(x) + \bar{d}t(x)$ ,  $dt_4(x) = -\bar{d}t(x) - dt(x)$ , e os elementos do kernel por

$$\begin{aligned} K_1(k) &= \frac{1}{1 + e^{2|k|} + e^{4|k|}}, & K_1^v(k) &= \begin{cases} \frac{e^{-2k} + e^{-6k}}{1 + e^{-2k} + e^{-4k}}, & \text{se } k \geq 0 \\ \frac{1 + e^{2k}}{1 + e^{2k} + e^{4k}}, & \text{se } k < 0 \end{cases} \\ K_2(k) &= \frac{1}{1 + e^{-2|k|} + e^{-4|k|}}, & K_2^o(k) &= \begin{cases} \frac{1}{1 + e^{-2k} + e^{-4k}}, & \text{se } k \geq 0 \\ \frac{e^{2k}}{1 + e^{2k} + e^{4k}}, & \text{se } k < 0 \end{cases}. \end{aligned} \quad (3.1.54)$$

Diferentemente da tentativa anterior, o procedimento numérico para resolver estas equações integrais resultam na solução correta, independentemente do chute inicial. Aqui, a informação dos dois níveis das equações de Bethe foi imposta pelo simples fato de relacionarmos as transformadas de  ${}^2F_1^1(x \pm i)$  e  ${}^3F_1^1(x \pm i\epsilon)$ , com  $\epsilon \rightarrow 0$ . Contudo, esta formulação de equações integrais, mesmo para o caso  $su(3)$ , não é suficientemente satisfatória. Por causa da restrição nos parâmetros de translação  $\alpha$ , podemos calcular o auto-valor apenas no eixo  $\Im[x] = 0$ :

$$\begin{aligned} \log T_1^1(x) &= L \log \left[ \frac{\Gamma(\frac{7}{6} - \frac{ix}{6})\Gamma(\frac{1}{6} + \frac{ix}{6})}{\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{ix}{6})\Gamma(\frac{5}{6} + \frac{ix}{6})} \right] + L \log \left[ \frac{1 + ix}{2} \right] + \\ &+ f_1 * (\log B_1 + \log \bar{B}_1) + f_2^d * \log B_2 + f_2 * \log \bar{B}_2, \end{aligned} \quad (3.1.55)$$

sendo

$$f_1(k) = \frac{e^{2k}}{1 + e^{2k} + e^{4k}}, \quad f_2(k) = \frac{e^{4k}}{1 + e^{2k} + e^{4k}}, \quad f_2^d(k) = 1 - f_2(k). \quad (3.1.56)$$

Desta forma, temos divergências nas convoluções devido a  $\log B_2$  toda vez que estivermos perto de um zero de Bethe  $x_k^1$ . Com efeito, para obter alta precisão no cálculo numérico do auto-valor, devemos realizar uma discretização muito fina no espaço real, a fim de que a integração sobre os picos seja bem “representada”. Perdemos, assim, não apenas em precisão, o que pode ser controlado por esta discretização fina, mas com maior certeza em velocidade de cálculo que era para ser um predicação deste método.

Existem outras possibilidades para definir as funções auxiliares, tanto a partir do fluxo de Bäcklund como analisando o “Bethe strap”[76] de cada modelo. Nesta segunda abordagem, que não detalharemos aqui, nós conseguimos obter as mesmas funções auxiliares dos modelos invariantes pela álgebra  $su(2)$ ,  $su(3)$ , e  $su(4)$ [35, 41, 44] e muitas outras funções auxiliares que não foram utilizadas. Todavia, sendo esta abordagem baseada em tentativa e erro, ainda não constitui uma sistematização.

## 3.2 $osp(1|2)$

Visto que a formulação sistemática das funções auxiliares ainda se encontra em estado incipiente, mesmo quando restrito aos modelos invariantes pela álgebra  $su(l)$ , sigamos no estudo de caso, abordando, na presente seção, o modelo invariante pela super-álgebra  $osp(1|2)$ .

Nesta seção nós derivamos as equações integrais não-lineares que descrevem o maior auto-valor da matriz de transferência linha a linha a tamanho finito  $L$ . Em seguida, investigamos a correção de tamanho finito mais relevante e determinamos a carga central do modelo.

### 3.2.1 Equações integrais não-lineares para o maior auto-valor a tamanho finito

Os auto-valores da matriz de transferência (1.3.17) podem ser obtidos por meio do ansatz de Bethe algébrico[80]. Considerando a “torção”(twist)  $\mathcal{J}_A \rightarrow \mathcal{G}_A \mathcal{J}_A$ , encontramos

os auto-valores na forma

$$\begin{aligned} \Lambda(\lambda) = & -e^{i\eta}(-a(\lambda))^L \prod_{j=1}^n -\frac{a(\mu_j - \lambda)}{b(\mu_j - \lambda)} + (b(\lambda))^L \prod_{j=1}^n \frac{\bar{a}(\lambda - \mu_j)f(\lambda - \mu_j) - e^2(\lambda - \mu_j)}{b(\lambda - \mu_j)f(\lambda - \mu_j)} \\ & - e^{-i\eta}(-f(\lambda))^L \prod_{j=1}^n -\frac{b(\lambda - \mu_j)}{f(\lambda - \mu_j)} = \lambda_1(\lambda) + \lambda_2(\lambda) + \lambda_3(\lambda), \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

sendo que introduzimos “twist” nas condições de contorno  $\mathcal{T}_A \rightarrow \mathcal{G}_A \mathcal{T}_A$  com  $\mathcal{G}_{ij} = e^{i\eta(2-j)}\delta_{ij}$ .

As raízes de Bethe  $\mu_j$  devem satisfazer as equações de Bethe

$$\left(-\frac{b(\mu_k)}{a(\mu_k)}\right)^L = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n -\frac{b(\mu_k - \mu_j)f(\mu_k - \mu_j)}{\bar{a}(\mu_k - \mu_j)f(\mu_k - \mu_j) - e^2(\mu_k - \mu_j)} \frac{a(\mu_j - \mu_k)}{b(\mu_j - \mu_k)}. \quad (3.2.2)$$

Devemos notar que, embora o auto-valor seja composto por três parcelas, existe apenas um tipo de raiz de Bethe, em contraste com o modelo t-J (ver capítulo anterior). Isto significa que não temos ansatz de Bethe “nested” e que a equação de Bethe acima é suficiente para induzir cancelamento de polos em ambas as somas  $\lambda_1(\mu) + \lambda_2(\mu)$  e  $\lambda_2(\mu) + \lambda_3(\mu)$ , do que resulta um auto-valor analítico. Para que isto ocorra, deve existir um vínculo entre as três funções

$$\lambda_1\left(\mu - \frac{1}{4}\right)\lambda_3\left(\mu + \frac{1}{4}\right) = \lambda_2\left(\mu - \frac{1}{4}\right)\lambda_2\left(\mu + \frac{1}{4}\right). \quad (3.2.3)$$

Isto é consequência da existência de uma hierarquia funcional[48] para a matriz de transferência (1.3.17).

Para o nosso desenvolvimento posterior, introduzimos as funções  $\tilde{\Lambda}(x) = \Lambda(ix + \frac{3}{4})$ ,  $\Phi(x) = x^L$  e  $Q(x) = \prod_{j=1}^m (x - x_j)$ , onde transformamos as raízes de Bethe como  $\mu_j = \frac{1}{2} - ix_j$ . Diferentemente da estrutura de raízes 2-strings na matriz de transferência quântica, as novas raízes de Bethe  $x_j$  são reais para o maior auto-valor, que se encontra no setor  $n = L$ . Exatamente em  $\eta = 0$ , nós não conseguimos resolver as equações de Bethe para o maior auto-valor neste setor. Entretanto, se nós variarmos  $\eta$  adiabaticamente iniciando em um valor finito e aproximando de zero, encontramos uma raiz de Bethe se deslocando para o infinito sobre o eixo real. Isto explica a tripla degenerescência do maior auto-valor em  $\eta = 0$ . Nestas circunstâncias, um comportamento semelhante ocorre para o maior auto-valor no setor  $n = L + 1$  quando duas raízes vão ao infinito, tornando este o maior auto-valor no setor  $n = L$  igual ao maior auto-valor do setor  $n = L - 1$ .

Definindo a função

$$S(x) = \underbrace{e^{i\frac{\eta}{2}}\Phi(x - \frac{i}{2})\frac{Q(x+i)Q(x-\frac{i}{2})}{Q(x)}}_{s_1(x)} \underbrace{-e^{-i\frac{\eta}{2}}\Phi(x + \frac{i}{2})\frac{Q(x-i)Q(x+\frac{i}{2})}{Q(x)}}_{s_2(x)}, \quad (3.2.4)$$

$$s_1(x) = e^{i\frac{\eta}{2}}\Phi(x - \frac{i}{2})\frac{Q(x+i)Q(x-\frac{i}{2})}{Q(x)}, \quad (3.2.5)$$

$$s_2(x) = -e^{-i\frac{\eta}{2}}\Phi(x + \frac{i}{2})\frac{Q(x-i)Q(x+\frac{i}{2})}{Q(x)}, \quad (3.2.6)$$

que é inteira se as equações de Bethe (3.2.2) forem satisfeitas, encontramos

$$\tilde{\Lambda}(x) = -(-1)^L \left[ \frac{S(x + \frac{i}{4})S(x - \frac{i}{4}) + \Phi(x + \frac{i}{4})\Phi(x - \frac{i}{4})Q(x + \frac{5i}{4})Q(x - \frac{5i}{4})}{Q(x + \frac{3i}{4})Q(x - \frac{3i}{4})} \right]. \quad (3.2.7)$$

Além disso, as equações de Bethe garantem que a função  $S(x)$  associada ao maior autovalor é a analítica e não nula (ANZ) dentro da faixa  $|\Im z| \leq 1$ . Já a função  $\tilde{\Lambda}(x)$ , apesar do cancelamento dos polos devido às equações de Bethe, ainda possui dois zeros reais simétricos em relação à origem. Isto implica que esta função não é ANZ em uma faixa contendo o eixo real.

Ao invés de resolver as equações de Bethe diretamente para sistemas muito grandes, podemos tentar resolver o problema funcional de encontrar uma função da forma (3.2.4) que seja ANZ na faixa mencionada. Para reformular o problema, introduzimos duas funções auxiliares

$$\begin{aligned} \mathfrak{b}(x) &= \frac{s_1(x + i\alpha)}{s_2(x + i\alpha)} = -e^{i\eta} \frac{\Phi(x - \frac{i}{2} + i\alpha)Q(x + i + i\alpha)Q(x - \frac{i}{2} + i\alpha)}{\Phi(x + \frac{i}{2} + i\alpha)Q(x - i + i\alpha)Q(x + \frac{i}{2} + i\alpha)}, \\ \bar{\mathfrak{b}}(x) &= \frac{s_2(x - i\alpha)}{s_1(x - i\alpha)} = -e^{-i\eta} \frac{\Phi(x + \frac{i}{2} - i\alpha)Q(x - i - i\alpha)Q(x + \frac{i}{2} - i\alpha)}{\Phi(x - \frac{i}{2} - i\alpha)Q(x + i - i\alpha)Q(x - \frac{i}{2} - i\alpha)}, \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

com  $0 < \alpha < \frac{1}{2}$ . Estas funções possuem limite assintótico constante

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \mathfrak{b}(x) = -e^{i\eta} \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \bar{\mathfrak{b}}(x) = -e^{-i\eta}. \quad (3.2.9)$$

Isto nos permite tomar a transformada de Fourier da derivada logarítmica destas funções e de outras funções intimamente relacionadas com as primeiras:

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}(x) = 1 + \mathfrak{b}(x) &= \frac{-e^{i\frac{\eta}{2}}S(x + i\alpha)Q(x + i\alpha)}{\Phi(x + \frac{i}{2} + i\alpha)Q(x - i + i\alpha)Q(x + \frac{i}{2} + i\alpha)}, \\ \bar{\mathfrak{B}}(x) = 1 + \bar{\mathfrak{b}}(x) &= \frac{-e^{-i\frac{\eta}{2}}S(x - i\alpha)Q(x - i\alpha)}{\Phi(x - \frac{i}{2} - i\alpha)Q(x + i - i\alpha)Q(x - \frac{i}{2} - i\alpha)}. \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

Devido à faixa ANZ provida pelas equações de Bethe, as transformadas de Fourier de  $S(x \pm i\alpha)$  podem ser facilmente relacionadas por meio do teorema de Cauchy.

Resolvendo (3.2.10) para  $Q(x)$  e  $S(x)$  no espaço de Fourier, substituindo o resultado na transformada de Fourier de (3.2.8), transformando de volta para o espaço real, e integrando o resultado de  $-\infty$  até  $x$ , encontramos

$$\begin{aligned}\log \mathfrak{b}(x) &= -F * \log \mathfrak{B}(x) + F * \log \bar{\mathfrak{B}}(x + 2\alpha i) + i(L dt(x + i\alpha) + \eta - \pi \operatorname{sgn}(\eta)), \\ \log \bar{\mathfrak{b}}(x) &= F * \log \mathfrak{B}(x - 2\alpha i) - F * \log \bar{\mathfrak{B}}(x) - i(L dt(x - i\alpha) + \eta - \pi \operatorname{sgn}(\eta)),\end{aligned}\tag{3.2.11}$$

sendo

$$dt(x) = -i \log \left[ \frac{e^{-\frac{2\pi x}{3}} + e^{\frac{\pi i}{3}}}{e^{-\frac{2\pi x}{3}} - e^{\frac{\pi i}{3}}} \right] - i \log \left[ \frac{e^{-\frac{2\pi x}{3}} - e^{-\frac{\pi i}{3}}}{e^{-\frac{2\pi x}{3}} + e^{-\frac{\pi i}{3}}} \right],$$

e

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{|k|}{2}} - e^{-|k|}}{1 + e^{-|k|} - e^{-\frac{|k|}{2}}} e^{ikx} dk = \frac{d}{idx} \log \left[ \frac{\Gamma(\frac{1}{6} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{2}{3} + \frac{ix}{3})\Gamma(1 - \frac{ix}{3})}{\Gamma(\frac{1}{6} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{2}{3} - \frac{ix}{3})\Gamma(1 + \frac{ix}{3})} \right].$$

O auto-valor  $S(x)$  fica

$$\log S(x) = G_1 * \log \mathfrak{B}(x - i\alpha) + \bar{G}_1 * \log \bar{\mathfrak{B}}(x + i\alpha) - LD_S(x) + \frac{\pi i}{2},\tag{3.2.12}$$

sendo

$$D_S(x) = \log \left[ \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{2}{3} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{2}{3} - \frac{ix}{3})}{\Gamma(\frac{1}{6} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{6} - \frac{ix}{3})\Gamma(1 + \frac{ix}{3})\Gamma(1 - \frac{ix}{3})} \right],$$

e

$$G_1(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{G}_1(k) dk \quad \text{sendo} \quad \hat{G}_1(k) = \begin{cases} \frac{e^{-k}}{1 + e^{-k} - e^{-\frac{k}{2}}}, & \text{se } k \geq 0 \\ \frac{1 - e^{\frac{k}{2}}}{1 + e^k - e^{\frac{k}{2}}}, & \text{se } k < 0 \end{cases}.$$

Agora queremos usar a relação funcional da hierarquia para obter  $\tilde{\Lambda}(x)$ . Se introduzirmos o sistema- $Y$  como

$$\begin{aligned}y(x) &= \frac{(-1)^L \tilde{\Lambda}(x) Q(x - \frac{3i}{4}) Q(x + \frac{3i}{4})}{\Phi(x - \frac{i}{4}) \Phi(x + \frac{i}{4}) Q(x + \frac{5i}{4}) Q(x - \frac{5i}{4})}, \\ Y(x) &= \frac{-S(x + \frac{i}{4}) S(x - \frac{i}{4})}{\Phi(x - \frac{i}{4}) \Phi(x + \frac{i}{4}) Q(x + \frac{5i}{4}) Q(x - \frac{5i}{4})},\end{aligned}\tag{3.2.13}$$

então a hierarquia de fusão (3.2.7) pode ser escrita simplesmente como  $Y(x) = 1 + y(x)$ .

Uma vez conhecido o auto valor  $S(x)$ , podemos determinar a função  $Y(x)$ . Tomando a



transformada da derivada logarítmica de  $Y(x)$  e procedendo como anteriormente, encontramos

$$\log Y(x) = G_2 * \log \mathfrak{B}(x - i\alpha) + \bar{G}_2 * \log \bar{\mathfrak{B}}(x + i\alpha) + LD_Y(x), \quad (3.2.14)$$

sendo

$$D_Y(x) = -\log \left[ \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{1}{12} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{1}{12} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{3} + \frac{1}{12} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{3} + \frac{1}{12} - \frac{ix}{3})}{\Gamma(\frac{5}{6} + \frac{1}{12} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{5}{6} + \frac{1}{12} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{12} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{12} - \frac{ix}{3})} \right],$$

e

$$G_2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{G}_2(k) dk \quad \text{sendo} \quad \hat{G}_2(k) = \begin{cases} \frac{e^{-\frac{3k}{4}}}{1+e^{-k}-e^{-\frac{k}{2}}}, & \text{se } k \geq 0 \\ \frac{e^{-\frac{k}{4}}(1+e^{\frac{3k}{2}}-e^k)}{1+e^k-e^{\frac{k}{2}}}, & \text{se } k < 0 \end{cases}.$$

Note que em (3.2.14)  $\alpha$  deve ser maior ou igual a  $\frac{1}{4}$  para regularizar  $G_2(k < 0)$ . Resolvida as equações integrais, encontramos  $Y(x)$  e, imediatamente,  $y(x)$  por conta do vínculo entre estas duas funções. Além disso, a transformada de Fourier da derivada logarítmica de  $y(x)$  nos permite relacionar esta função ao auto-valor de interesse. O resultado final fica

$$\log \tilde{\Lambda}(x) = G_3 * (\log \mathfrak{B}(x - i\alpha) - \log \bar{\mathfrak{B}}(x + i\alpha)) + \log y(x) + LD_\Lambda(x) + \pi i \text{Mod}(L, 2), \quad (3.2.15)$$

sendo

$$D_\Lambda(x) = \log(x + \frac{i}{4}) - \log(x - \frac{3i}{4}) - 2\pi i - \log \left[ \frac{\Gamma(\frac{2}{3} + \frac{1}{12} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{2}{3} + \frac{1}{12} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{5}{6} + \frac{1}{12} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{5}{6} + \frac{1}{12} - \frac{ix}{3})}{\Gamma(\frac{7}{6} + \frac{1}{12} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{7}{6} + \frac{1}{12} - \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{3} + \frac{1}{12} + \frac{ix}{3})\Gamma(\frac{1}{3} + \frac{1}{12} - \frac{ix}{3})} \right],$$

e

$$G_3(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{G}_3(k) dk \quad \text{sendo} \quad \hat{G}_3(k) = \begin{cases} \frac{-e^{-\frac{3k}{4}}(1-e^{-\frac{k}{2}})}{1+e^{-k}-e^{-\frac{k}{2}}}, & \text{se } k \geq 0 \\ \frac{e^{\frac{3k}{4}}(1-e^{\frac{k}{2}})}{1+e^k-e^{\frac{k}{2}}}, & \text{se } k < 0 \end{cases}.$$

A solução numérica das equações integrais (3.2.11) permite calcular o maior auto-valor. Na Figura 3.2 nós apresentamos  $\frac{\log \tilde{\Lambda}(0)}{L}$  vs.  $\frac{1}{L^2}$  para  $\eta = 0.6$ . O aspecto linear da curva enfatiza a invariância conforme no limite do contínuo, onde o coeficiente angular é proporcional à carga central. Os resultados numéricos obtidos aqui são consistentes com as expressões analíticas descritas na seção seguinte.

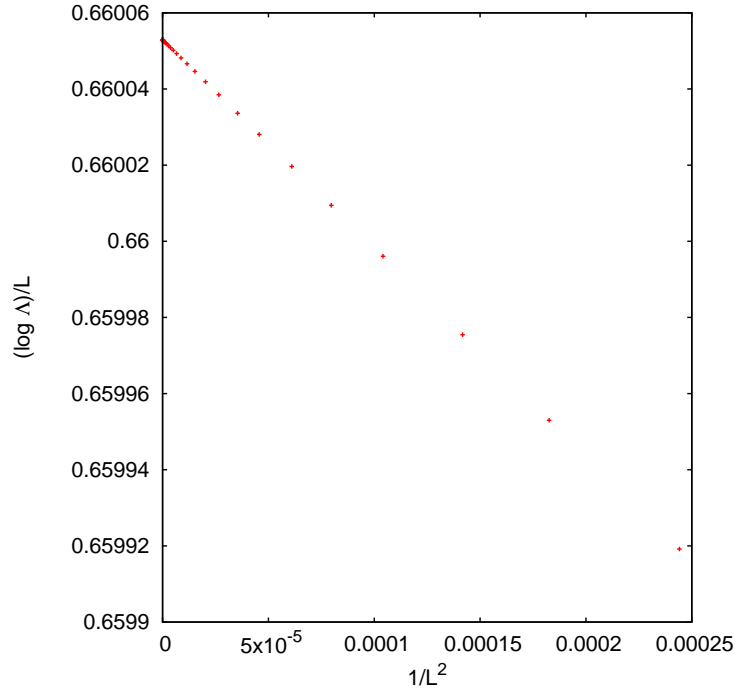


Figura 3.2: Maior auto-valor  $\frac{\log \tilde{\Lambda}(0)}{L}$  vs.  $\frac{1}{L^2}$  para  $\eta = 0.6$ ,  $L = 80, 160, \dots, 4000$ . Enquanto o coeficiente linear tende ao valor exato  $D_Y(0) + D_\Lambda(0)$ , o coeficiente angular fornece uma aproximação numérica da carga central.

### 3.2.2 Carga central

Normalmente o conjunto de funções auxiliares utilizadas para derivar as equações integrais não-lineares é diferente daquele que obtivemos na seção anterior quando o auto-valor de interesse não corresponde à representação mais fundamental na hierarquia funcional (fusão para o modelo  $su(2)$ ). Veja, por exemplo, [42]. No apêndice C nós derivamos as equações integrais de conformidade com a proposta de funções auxiliares em [42, 45]. Todavia, por conta das propriedades de analiticidade, restringimos o intervalo de  $\eta$  a  $[\frac{\pi}{3}, \pi]$  na formulação usual, ao passo que para as equações que derivamos aqui tal restrição não existe. Por outro lado, nossa escolha na seção precedente reduz o número de equações pelo preço do auto-valor ser obtido de forma indireta.

Agora nós vamos considerar a correção de tamanho finito mais relevante para a matriz de transferência, o que permite calcular a carga central[34, 35].

Vamos assumir

$$\log Y(x) = Lf + \sigma(L), \quad (3.2.16)$$

sendo  $\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\sigma(L)}{L} \rightarrow 0$  e  $f > 0$ . Isto de fato é verdade já que  $D_Y(x) > 0$  para todo  $x$ .

Usando a relação  $y(x) = Y(x) - 1$ , encontramos

$$\log y(x) = Lf + \sigma + \log(1 - e^{-Lf - \sigma}) = Lf + \sigma - \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-n(Lf + \sigma)}}{n}}_{\delta}. \quad (3.2.17)$$

Note que  $\lim_{L \rightarrow \infty} L^\gamma \delta = 0$  para qualquer  $\gamma \geq 0$ . Portanto,  $\log y(x)$  e  $\log Y(x)$  possuem o mesmo comportamento algébrico e a diferença  $\delta = \log Y(x) - \log y(x)$  decai exponencialmente com o tamanho do sistema  $L$ . Por conta disto, encontramos

$$\begin{aligned} \log \tilde{\Lambda}(x) &= -L(D_Y(x) + D_\Lambda(x)) - \delta + \\ &\{G_2(x - i\alpha) + G_3(x - i\alpha)\} * \log \mathfrak{B}(x) + \{\bar{G}_2(x + i\alpha) - G_3(x + i\alpha)\} * \log \bar{\mathfrak{B}}(x), \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

e, portanto, todas as contribuições que decaem algebricamente com o tamanho do sistema provém das convoluções. Observemos, agora, que os kernels em (3.2.18) estão relacionados com o driving-term de (3.2.11)

$$G_2(x) + G_3(x) = dt'(x + \frac{3i}{4}), \quad \bar{G}_2(x) - G_3(x) = dt'(x - \frac{3i}{4}). \quad (3.2.19)$$

Todas as correções que não decaem exponencialmente podem ser calculadas de

$$\text{cor}(x) = dt'(x + \frac{i}{2}) * \log \mathfrak{B}(x) + dt'(x - \frac{i}{2}) * \log \bar{\mathfrak{B}}(x). \quad (3.2.20)$$

Seja  $s$  a variável de integração das convoluções, após a mudança de variáveis  $s = \pm(s' + \frac{3}{2\pi} \log L)$  obtemos

$$\begin{aligned} \text{cor}(x) &= \int_{-\frac{3}{2\pi} \log L}^{\infty} dt'_+(x - s' + \frac{i}{2}) l\mathfrak{B}^+(s') + dt'_-(x + s' + \frac{i}{2}) l\mathfrak{B}^-(s') ds' + \\ &\int_{-\frac{3}{2\pi} \log L}^{\infty} dt'_+(x - s' - \frac{i}{2}) l\bar{\mathfrak{B}}^+(s') + dt'_-(x + s' - \frac{i}{2}) l\bar{\mathfrak{B}}^-(s') ds', \end{aligned} \quad (3.2.21)$$

sendo que definimos

$$\begin{aligned} l\mathfrak{b}^\pm(x) &:= \log \mathfrak{b}(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log L)) & l\mathfrak{B}^\pm(x) &:= \log \mathfrak{B}(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log L)), \\ l\bar{\mathfrak{b}}^\pm(x) &:= \log \bar{\mathfrak{b}}(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log L)) & l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(x) &:= \log \bar{\mathfrak{B}}(\pm(x + \frac{3}{2\pi} \log L)), \\ dt'_\pm(x) &:= dt'(x \mp \frac{3}{2\pi} \log L) \approx \pm \frac{4}{L} e^{\pm \frac{2\pi x}{3}} \sin \frac{\pi}{3} \pmod{2\pi}. \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

Por causa da aproximação (3.2.22), temos

$$\text{cor}(x) = \frac{4}{3L} \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \left\{ e^{\frac{2\pi x}{3}} \int_{-\frac{3}{2\pi} \log L}^{\infty} e^{-\frac{2\pi s}{3}} \left( e^{\frac{\pi i}{3}} l\mathfrak{B}^+(s) + e^{-\frac{\pi i}{3}} l\bar{\mathfrak{B}}^+(s) \right) ds + \right. \\ \left. e^{-\frac{2\pi x}{3}} \int_{-\frac{3}{2\pi} \log L}^{\infty} e^{-\frac{2\pi s}{3}} \left( e^{-\frac{\pi i}{3}} l\mathfrak{B}^-(s) + e^{\frac{\pi i}{3}} l\bar{\mathfrak{B}}^-(s) \right) ds \right\}. \quad (3.2.23)$$

Agora utilizamos  $x = s \pm \frac{3}{2\pi} \log L$  em (3.2.11)

$$\begin{bmatrix} l\mathfrak{b}^\pm(s) \\ l\bar{\mathfrak{b}}^\pm(s) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F(s) & -F(s + \frac{i}{2}) \\ -F(s - \frac{i}{2}) & F(s) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} l\mathfrak{B}^\pm(s) \\ l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(s) \end{bmatrix} - 4 \begin{bmatrix} e^{\frac{\pm \pi i}{3}} \\ e^{\frac{\mp \pi i}{3}} \end{bmatrix} \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) e^{-\frac{2\pi s}{3} + i} \begin{bmatrix} \eta - \pi \text{sgn}(\eta) \\ \pi \text{sgn}(\eta) - \eta \end{bmatrix}, \quad (3.2.24)$$

e construímos as seguintes quantidades

$$\Delta_\pm := \int_{-\frac{3}{2\pi} \log L}^{\infty} \begin{bmatrix} l\mathfrak{B}^\pm(s) \\ l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(s) \end{bmatrix}^t \cdot \begin{bmatrix} l\mathfrak{b}^{\pm'}(s) \\ l\bar{\mathfrak{b}}^{\pm'}(s) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} l\mathfrak{B}^{\pm'}(s) \\ l\bar{\mathfrak{B}}^{\pm'}(s) \end{bmatrix}^t \cdot \begin{bmatrix} l\mathfrak{b}^\pm(s) \\ l\bar{\mathfrak{b}}^\pm(s) \end{bmatrix} ds. \quad (3.2.25)$$

Por causa da simetria do kernel  $F(s) = F(-s)$ , os termos que envolvem convoluções se cancelam exatamente em  $\Delta_\pm$ . Encontramos

$$\Delta_\pm \approx \frac{16\pi}{3} \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \int_{-\frac{3}{2\pi} \log L}^{\infty} e^{-\frac{2\pi s}{3}} \left( e^{\pm \frac{\pi i}{3}} l\mathfrak{B}^\pm(s) + e^{\mp \frac{\pi i}{3}} l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(s) \right) ds + \\ 4 \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) e^{-\frac{2\pi s}{3}} \left[ e^{\pm \frac{\pi i}{3}} l\mathfrak{B}^\pm(s) + e^{\mp \frac{\pi i}{3}} l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(s) - i(\eta - \pi \text{sgn}(\eta))(l\mathfrak{B}^\pm(s) - l\bar{\mathfrak{B}}^\pm(s)) \right]_{-\frac{3}{2\pi} \log L}^{\infty}. \quad (3.2.26)$$

Lembremos agora que  $l\mathfrak{B}^\pm(-\frac{3}{2\pi} \log L) = \log \mathfrak{B}(0)$  e semelhantemente para  $l\bar{\mathfrak{B}}^\pm$ . A partir da definição das funções auxiliares (3.2.8) e do padrão de raízes de Bethe (situadas sobre o eixo real), podemos encontrar a seguinte desigualdade

$$|\mathfrak{b}(0)|, |\bar{\mathfrak{b}}(0)| \leq \left( \frac{1}{2\sqrt{2}} \right)^L, \quad (3.2.27)$$

que, com o limite assintótico (3.2.9), nos permite calcular a segunda linha de (3.2.26) para sistemas grandes. Fazendo a mudança de variáveis  $z = \mathfrak{b}(x), \bar{\mathfrak{b}}(x)$  em (3.2.25), encontramos

$$\Delta_\pm = 2 \left( L_+(\mathfrak{b}(\pm\infty)) + L_+(\bar{\mathfrak{b}}(\pm\infty)) \right), \quad (3.2.28)$$

sendo  $L_+(v) = \int_0^v \frac{\log(1+z)}{z} - \frac{\log(z)}{1+z} dz$  a função di-log de Rogers que satisfaz a relação funcional[81]

$$L_+(v) + L_+(1/v) = \frac{\pi^2}{6}. \quad (3.2.29)$$

Portanto, utilizando (3.2.9), (3.2.23), (3.2.26), (3.2.27), (3.2.28) e (3.2.29), obtemos

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{6L\text{cor}(x)}{\pi} = \cosh \left( \frac{2\pi x}{3} \right) \left( 1 - 3 \left( 1 - \frac{|\eta|}{\pi} \right)^2 \right). \quad (3.2.30)$$

Desta forma, a carga central é  $c = 1 - 3 \left( 1 - \frac{|\eta|}{\pi} \right)^2$ , fornecendo  $c = -2$  no limite  $\eta \rightarrow 0$  [82].

O fato da carga central do modelo ser negativa pode parecer um contrassenso se esta determinasse as correções de temperatura finita às propriedades do estado fundamental. De fato, haveria uma região de baixas temperaturas em que o calor específico seria negativo. Todavia, o que se nota do capítulo anterior é que a carga central efetiva, por vezes, difere da carga central verdadeira, a primeira sendo sempre positiva enquanto o mesmo nem sempre vale para última. Considerado este ponto, resta saber qual é a relação entre as duas quantidades visto que, embora sejam elas diferentes, devem estar de alguma forma relacionadas por se tratarem do mesmo modelo. Em [83] temos a relação

$$c_{eff} = c - 24h, \quad (3.2.31)$$

e considerando que para o modelo  $osp(1|2)$  a menor dimensão conforme é  $h = -\frac{1}{8}$  [82], nossos resultados estão de pleno acordo com o esperado.

# Capítulo 4

## Influência das condições de contorno na entropia do modelo de seis-vértices simétrico

No capítulo anterior nós vimos que variando as condições de contorno, no caso geradas por “twist”, modifica-se o maior auto-valor da matriz de transferência linha a linha. Mas estas correções são apreciáveis apenas no que diz respeito às correções de tamanho finito e, por conseguinte, a carga central do modelo. As propriedades termodinâmicas intensivas como energia-livre por sítio, entropia por sítio e calor específico permanecem inalteradas.

No presente capítulo estudaremos a influência das condições de contorno nas propriedades intensivas de modelos clássicos. Para isto, utilizaremos como arquétipo o modelo de vértices, senão o mais simples, pelo menos o mais bem estudado, que é o modelo de seis-vértices simétrico.

### 4.1 Simetrias

Recapitulando, a função de partição de um modelo estatístico clássico é a soma sobre todas as configurações ( $\varepsilon$ ) do peso estatístico global daquela configuração, que por sua vez é um produto dos pesos locais  $\omega_\varepsilon^{(i,j)}$

$$Z = \sum_{\langle \varepsilon \rangle} \prod_{i=1}^N \prod_{j=1}^L \omega_\varepsilon^{(i,j)}, \quad (4.1.1)$$

o que define um problema combinatorial complicado. O peso estatístico  $\omega_\varepsilon^{(i,j)}$  pode assumir os valores  $a(\lambda)$ ,  $b(\lambda)$  e  $c(\lambda)$ , que estão associados às diferentes configurações de vértices do modelo de seis-vértices (veja a Figura 4.1)

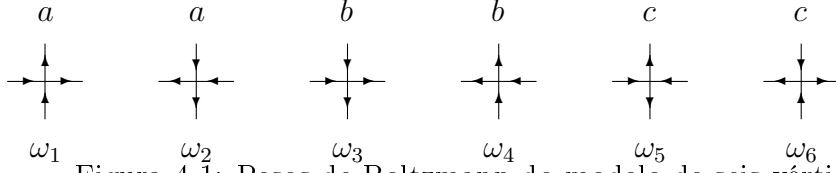


Figura 4.1: Pesos de Boltzmann do modelo de seis-vértices.

Estes pesos de Boltzmann são elementos de matriz da chamada matriz  $\check{R}$  [8, 9], que é dada por

$$\check{R}(\lambda) = \begin{pmatrix} a(\lambda) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c(\lambda) & b(\lambda) & 0 \\ 0 & b(\lambda) & c(\lambda) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(\lambda) \end{pmatrix}. \quad (4.1.2)$$

Via de regra, impomos que a matriz  $R$  seja uma solução da equação de Yang-Baxter

$$\check{R}_{12}(\lambda - \mu) \check{R}_{23}(\lambda) \check{R}_{12}(\mu) = \check{R}_{23}(\mu) \check{R}_{12}(\lambda) \check{R}_{23}(\lambda - \mu), \quad (4.1.3)$$

que restringe os pesos de Boltzmann segundo a variedade integrável

$$\Delta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab}, \quad (4.1.4)$$

para qualquer valor de parâmetro espectral. Por um lado isto impõe várias restrições ao problema, por outro lado permite obtermos resultados exatos para certas condições de contorno.

A associatividade da equação de Yang-Baxter dá origem à álgebra de Yang-Baxter [22]

$$\check{R}(\lambda - \mu) (\mathcal{T}_A(\lambda) \otimes \mathcal{T}_A(\mu)) = (\mathcal{T}_A(\mu) \otimes \mathcal{T}_A(\lambda)) \check{R}(\lambda - \mu), \quad (4.1.5)$$

sendo  $\mathcal{T}_A(\lambda) = \mathcal{L}_{AL}(\lambda - \mu_L) \cdots \mathcal{L}_{A1}(\lambda - \mu_1)$  a matriz de monodromia,  $\mathcal{L}_{12}(\lambda) = P_{12} \check{R}_{12}(\lambda)$ ,  $P_{12}$  o permutador e  $\mathcal{A}$  denota o espaço auxiliar ao longo da direção horizontal.

A álgebra de Yang-Baxter é invariante por transformações sobre a matriz de monodromia [84], tal que  $\mathcal{T}_A(\lambda) \rightarrow \mathcal{G}_A \mathcal{T}_A(\lambda)$ , e dado que a matriz  $\mathcal{G}$  satisfaça

$$[\check{R}(\lambda - \mu), \mathcal{G} \otimes \mathcal{G}] = 0. \quad (4.1.6)$$

Para valores gerais de  $\Delta$  ( $\Delta \neq 1$ ), esta condição implica que a matriz  $\mathcal{G}$  é diagonal ou anti-diagonal[84], do que resulta

$$\mathcal{G}^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \alpha_1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{G}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \alpha_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.1.7)$$

Para os propósitos a seguir, nós vamos nos restringir aos casos  $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ , que nos fornecem as matrizes relevantes para estudar as condições de contorno livre. Quando  $\Delta = 1$ , temos simetria  $SU(2)$ , o que implica que  $\mathcal{G}$  pode ser qualquer matriz  $2 \times 2$ [84].

## 4.2 Condições de contorno toroidais e livre

As equações (4.1.5-4.1.6) fornecem a propriedade de comutatividade das matrizes de transferência  $T^{(i)}(\lambda) = \text{Tr}_{\mathcal{A}} \left[ \mathcal{G}_{\mathcal{A}}^{(i)} \mathcal{T}_{\mathcal{A}}(\lambda) \right]$ ,

$$[T^{(i)}(\lambda), T^{(i)}(\mu)] = 0, \quad \forall \lambda, \mu \quad i = 0, 1. \quad (4.2.1)$$

Entretanto, vale notar que  $T^{(0)}(\lambda)$  não comuta com  $T^{(1)}(\lambda)$ . Após uma representação conveniente da matriz de monodromia

$$\mathcal{T}_{\mathcal{A}}(\lambda) = \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix}, \quad (4.2.2)$$

vemos claramente que a matriz de transferência pode ser escrita de modo simplificado na forma

$$T^{(0)}(\lambda) = A(\lambda) + D(\lambda), \quad (4.2.3)$$

$$T^{(1)}(\lambda) = B(\lambda) + C(\lambda), \quad (4.2.4)$$

sendo estas as matrizes de transferência com condições periódicas e anti-periódicas de contorno, respectivamente.

As matrizes  $T^{(i)}(\lambda)$ , quando multiplicadas sucessivamente, formam a função de partição de um modelo de vértices clássico bidimensional com  $N \times L$  sítios e sob determinadas condições de contorno. Em se tratando das condições de contorno livre, nós temos que a função de partição (4.1.1) pode ser escrita como

$$Z_{free} = \sum_{\phi_k, \theta_j=0,1} \text{Tr}_V \left[ \bigotimes_{k=1}^L \mathcal{G}_{V_k}^{(\phi_k)} \prod_{j=1}^N T^{(\theta_j)}(\lambda_j) \right], \quad (4.2.5)$$



sendo que para as arestas externas nós podemos ter todas as possíveis configurações de flechas entrando e saindo. A matriz  $\mathcal{G}_V^{(\phi)}$  é obtida de (4.1.7) e define a condição periódica ou anti-periódica na direção vertical  $V$ . O produto  $\bigotimes_{k=1}^L \mathcal{G}_{V_k}^{(\phi_k)}$  gera todas as possíveis configurações de flechas entrando e saindo ao longo da direção vertical, quando  $\phi_k = 0, 1$  para  $k = 1, \dots, L$ . Por outro lado, o produto das matrizes de transferência com  $\theta_j = 0, 1$  para  $j = 1, \dots, N$  produz todos os produtos de  $T^{(0)}(\lambda)$  e  $T^{(1)}(\lambda)$  e, portanto, todas as possíveis configurações de flechas entrando e saindo ao longo da direção horizontal.

No caso homogêneo ( $\lambda_j = \lambda, \mu_k = \mu = 0$ ) a expressão (4.2.5) é simplesmente dada por

$$Z_{free} = \text{Tr}_V \left[ \bigotimes_{k=1}^L \left( \begin{array}{cc} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{array} \right)_k (A(\lambda) + D(\lambda) + B(\lambda) + C(\lambda))^N \right]. \quad (4.2.6)$$

Naturalmente, as condições de contorno livre podem ser vistas como uma soma sobre um grande número de condições de contorno mais restritas. As condições periódicas de contorno ( $P$ ) em ambas as direções consiste do termo  $\phi_k = \theta_j = 0, \forall j, k$  em (4.2.5). Este termo, para uma rede homogênea, pode ser escrito simplesmente como

$$Z_{PP} = \text{Tr}_V [(T^{(0)}(\lambda))^N] = \text{Tr}_V [(A(\lambda) + D(\lambda))^N], \quad (4.2.7)$$

e foi estudado em [18]. Por outro lado, o caso anti-periódico ( $A$ ) na direção horizontal e periódico na direção vertical ( $\theta_j = 1, \phi_k = 0, \forall j, k$ ) pode ser escrito, para uma rede homogênea, como

$$Z_{AP} = \text{Tr}_V [(T^{(1)}(\lambda))^N] = \text{Tr}_V [(B(\lambda) + C(\lambda))^N]. \quad (4.2.8)$$

Este caso foi considerado em [55] no regime antiferroelétrico ( $\Delta < -1$ ).

Além dos casos mais comuns como o periódico e o anti-periódico  $Z_{PP}$ ,  $Z_{AP}$ ,  $Z_{PA}$ , bem como aquele que considera anti-periodicidade em ambas direções  $Z_{AA}$ , temos outras condições mistas de contorno menos triviais. Podemos organizá-las em uma matriz.

$$M_{N,L} = \begin{pmatrix} Z_{1,1} & Z_{1,2} & \cdots & Z_{1,2^L} \\ Z_{2,1} & Z_{2,2} & \cdots & Z_{2,2^L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ Z_{2^N,1} & Z_{2^N,2} & \cdots & Z_{2^N,2^L} \end{pmatrix}, \quad Z_{free} = \sum_{j=1}^{2^N} \sum_{k=1}^{2^L} Z_{j,k}, \quad (4.2.9)$$

sendo que  $Z_{j,k}$  é a função de partição de uma rede  $N \times L$  com  $(j-1)_{10} = \{\theta_N, \dots, \theta_1\}_2$  e  $(k-1)_{10} = \{\phi_L, \dots, \phi_1\}_2$  definindo fechamento periódico ou anti-periódico ao longo

das direções horizontal e vertical, respectivamente. Na notação acima deve ser entendido que a representação binária de  $j - 1$  fornece o vetor  $\{\phi_L, \dots, \phi_1\}$  e semelhantemente para  $k - 1$  e  $\{\theta_N, \dots, \theta_1\}$ . Mais explicitamente, para inteiros  $j$  e  $k$ , temos  $j - 1 = \theta_1 2^0 + \theta_2 2^1 + \dots + \theta_N 2^{N-1}$  e  $k - 1 = \phi_1 2^0 + \phi_2 2^1 + \dots + \phi_L 2^{L-1}$ ; ainda

$$Z_{j,k} = \text{Tr}_V \left[ \bigotimes_{m=1}^L \mathcal{G}_{V_m}^{(\phi_m)} \prod_{n=1}^N T^{(\theta_n)}(\lambda) \right], j = 1, \dots, 2^N, k = 1, \dots, 2^L, \quad (4.2.10)$$

onde para um dado  $j$  e  $k$  do lado esquerdo nós temos um conjunto de  $\phi_m$  e  $\theta_n$  do lado direito. Em particular, os contornos que denominamos homogêneos são os termos  $Z_{1,1} = Z_{PP}$ ,  $Z_{2^N,1} = Z_{AP}$ ,  $Z_{1,2^L} = Z_{PA}$  e  $Z_{2^N,2^L} = Z_{AA}$ .

Para ilustrar, vamos considerar as possibilidades quando  $L = N = 2$ . Por um lado, a primeira coluna ( $k = 1$ ) da matriz (4.2.9), que significa  $(0)_{10} = \{\phi_2 = 0, \phi_1 = 0\}_2$ , representa o caso em que temos condições periódicas de contorno na direção vertical. Isto se deve a fato de que  $\mathcal{G}_{V_m}^{(0)}$  é matriz identidade (4.1.7). Por outro lado, nós temos os seguintes casos ao longo da direção horizontal:

i) condição periódica quando  $j = 1$ , o que implica novamente  $\theta_n = 0$  para  $n = 1, 2$  e portanto

$$Z_{1,1} = \text{Tr}_V [(T^{(0)}(\lambda))^2];$$

ii) periódica e anti-periódica quando  $j = 2$  ( $(1)_{10} = \{\theta_2 = 0, \theta_1 = 1\}_2$ )

$$Z_{2,1} = \text{Tr}_V [T^{(0)}(\lambda)T^{(1)}(\lambda)];$$

iii) anti-periódica e periódica quando  $j = 3$  ( $(2)_{10} = \{\theta_2 = 1, \theta_1 = 0\}_2$ )

$$Z_{3,1} = \text{Tr}_V [T^{(1)}(\lambda)T^{(0)}(\lambda)];$$

iv) finalmente, quando  $j = 4$ , temos o caso anti-periódica ( $(3)_{10} = \{\theta_2 = 1, \theta_1 = 1\}_2$ )

$$Z_{4,1} = \text{Tr}_V [(T^{(1)}(\lambda))^2].$$

Para os elementos da matriz  $M_{N,L}$  mais gerais, devemos levar em conta também os fechamentos  $\mathcal{G}_V^{(\phi)}$  ( $k > 1$ ) que revertem ou não as configurações das bordas verticais, dependendo do valor de  $k$ . Embora nós tenhamos escrito explicitamente  $Z_{2,1}$  e  $Z_{3,1}$  no exemplo acima, estas funções de partição, na realidade, se anulam devido à propriedade de conservação de flechas ao longo do contorno.

Mais especificamente, nós temos elementos triviais que resultam em funções de partição nulas. Em geral os casos não triviais devem satisfazer a seguinte regra: Seja  $\Phi = \sum_{m=1}^L \phi_m$  o número de vezes que fechamos com condições anti-periódicas de contorno na direção vertical e  $\Theta = \sum_{n=1}^N \theta_n$  o número de vezes que fechamos com condições anti-periódicas de contorno na direção horizontal, então  $\text{mod} [\Phi - \Theta, 2] = 0$ . Nestas circunstâncias é possível mostrar que existe, na soma sobre flechas que define as condições de contorno, um conjunto de flechas externas que satisfazem a conservação global e, por conseguinte, ao menos uma configuração acessível.

Além disso, as funções de partição  $Z_{j,k}$  estão relacionadas a  $Z_{k,j}$  por uma rotação de  $\pi/2$ :

$$Z_{j,k} := Z_{j,k}^{N \times L} = Z_{k,j}^{L \times N}. \quad (4.2.11)$$

Todas as propriedades listadas acima podem ser vistas, em particular, no ponto de temperatura infinita, que por sua vez pode ser obtido escolhendo os pesos de Boltzmann tais que  $a = b = c = 1$  ( $\Delta = 1/2$ ). Portanto, a função de partição se torna apenas a contagem do número de configurações com  $Z = \Omega$ , o que também nos remete ao cálculo da entropia residual no ensemble micro-canônico. Nós obtivemos o número de configurações ( $\Omega$ ) para tamanhos pequenos (até  $N = L = 5$ ). Os casos  $N = L = 2, 3$  são dados abaixo

$$M_{2,2} = \left( \begin{array}{cc|cc} 18 & 0 & 0 & 8 \\ 0 & 10 & 10 & 0 \\ \hline 0 & 10 & 10 & 0 \\ 8 & 0 & 0 & 8 \end{array} \right), M_{3,3} = \left( \begin{array}{cccc|cccc} 148 & 0 & 0 & 84 & 0 & 84 & 84 & 0 \\ 0 & 94 & 84 & 0 & 94 & 0 & 0 & 72 \\ 0 & 84 & 80 & 0 & 84 & 0 & 0 & 72 \\ \hline 84 & 0 & 0 & 74 & 0 & 72 & 74 & 0 \\ 0 & 94 & 84 & 0 & 94 & 0 & 0 & 72 \\ 84 & 0 & 0 & 72 & 0 & 76 & 72 & 0 \\ 84 & 0 & 0 & 74 & 0 & 72 & 74 & 0 \\ \hline 0 & 72 & 72 & 0 & 72 & 0 & 0 & 68 \end{array} \right). \quad (4.2.12)$$

Podemos ver que o caso de condições periódicas de contorno em ambas direções fornece o maior número de configurações. Com esta informação, podemos mostrar que a entropia do modelo de seis-vértices com condições de contorno livre é igual ao caso completamente periódico. Isto pode ser feito notando que o número de configurações das condições de contorno livre ( $\Omega_{free}$ ), que é igual a soma de todos elementos da matriz  $M_{N,L}$ , é maior

que o número de configurações do caso periódico  $\Omega_{PP} = Z_{1,1}$ . Além disso, nós temos um limite superior para  $\Omega_{free}$  que é obtido majorando cada um dos  $2^{L+N-1}$  elementos  $Z_{i,j}$  não triviais da soma por  $Z_{1,1}$ . Assim temos,

$$\Omega_{PP} \leq \Omega_{free} \leq 2^{L+N-1} \Omega_{PP}. \quad (4.2.13)$$

Para tomar o limite termodinâmico, nós elevamos (4.2.13) a  $1/(NL)$ , tomamos o logaritmo e finalmente o limite em que cada uma das dimensões vai a infinito. Isto mostra que a entropia residual, ou a entropia quando a temperatura é infinita, das condições de contorno livre é igual ao caso das condições de contorno “toroidais” de maior número de configurações. Assumindo, como verificado numericamente que estas sejam as condições periódicas de contorno, temos  $S_{PBC} = S_{free}$ .

Note que esta relação no modelo de seis-vértices com condições de contorno periódica e livre, a temperaturas arbitrária, já havia sido provada por meio da chamada weak-graph expansion [54] para o caso em que temos número de sítios pares. Aqui não existe restrição quanto à paridade do número de sítios, embora ainda estejamos restritos à temperatura infinita. Na próxima seção nós vamos estender este resultado a temperaturas finitas.

### 4.2.1 Condições toroidais homogêneas

As funções de partição  $Z_{PP}$ ,  $Z_{AP}$ ,  $Z_{PA}$  e  $Z_{AA}$  são formadas pelo produto de matrizes  $T^{(0)}(\lambda)$  ou  $T^{(1)}(\lambda)$ , sem que haja mistura entre estas. Isto implica que todos operadores envolvidos são matrizes de transferência integráveis que comutam entre si. Portanto, a análise destes casos é muito mais simples que a situação geral  $Z_{j,k}$ . Para analisar todos estes casos, nós vamos explorar algumas simetrias discretas das matrizes de transferência  $T^{(i)}(\lambda)$ .

Podemos definir o operador de reflexão como  $\Pi^x = \bigotimes_{m=1}^L \sigma_m^x$  e o operador de paridade como  $\Pi^z = \bigotimes_{m=1}^L \sigma_m^z$ , sendo que  $\sigma^{x,y,z}$  denotam as matrizes de Pauli. Estes operadores constituem casos especiais da simetria discreta (4.1.7) e resultam nas seguintes relações

de comutação

$$[T^{(0)}(\lambda), \Pi^x] = [T^{(0)}(\lambda), \Pi^z] = 0, \quad (4.2.14)$$

$$[T^{(1)}(\lambda), \Pi^x] = [T^{(1)}(\lambda), \Pi^z]_+ = 0, \quad (4.2.15)$$

$$\Pi^x \Pi^z = (-1)^L \Pi^z \Pi^x. \quad (4.2.16)$$

Enquanto as duas primeiras equações provém de (4.1.6), a última é consequência direta das propriedades algébricas das matrizes de Pauli.

### Condições de contorno (completamente) periódicas

A função de partição com condições de contorno completamente periódicas,  $Z_{PP}$ , foi resolvida por ansatz de Bethe[18].

$$Z_{PP} = \sum_{j=1}^{2L} (\Lambda_j^{(0)}(\lambda))^N, \quad (4.2.17)$$

sendo  $\Lambda_j^{(0)}(\lambda)$  os auto-valores da matriz de transferência. Portanto, segue imediatamente que apenas o maior auto-valor  $\Lambda_{max}^{(0)}(\lambda)$  contribui para a energia-livre no limite termodinâmico, tal que

$$F_{PP} = -\frac{1}{\beta} \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{LN} \ln (\Lambda_{max}^{(0)}(\lambda))^N, \quad (4.2.18)$$

sendo  $\beta$  o inverso da temperatura. Por sua vez, o maior auto-valor de  $T^{(0)}(\lambda)$ , e consequentemente a energia-livre no limite termodinâmico, é conhecido para todos valores de  $\Delta$  [18, 8]. A entropia à temperatura infinita é dada por

$$S_{PBC} = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{4}{3} \right)^3 \approx 0.431523. \quad (4.2.19)$$

### Anti-periodicidade na direção horizontal

Por outro lado, como no caso  $Z_{AP}$  não existe conservação de fluxo (de flechas) de uma linha para outra, a função de partição foi obtida muito tempo depois pelo método  $T - Q$  [55, 8]. Foi mostrado em [55], para  $\Delta < -1$ , que a função de partição  $Z_{AP}$  produz a mesma energia-livre das condições de contorno completamente periódicas.

Para melhor entender este resultado, é conveniente explorar a anti-comutação entre  $\Pi^z$  e  $T^{(1)}(\lambda)$ . Ao fazê-lo nós obtemos que, se  $|\Psi\rangle$  é auto-vetor de  $T^{(1)}(\lambda)$  com auto-valor

$\Lambda^{(1)}(\lambda)$ , também  $\Pi^z |\Psi\rangle$  o será com auto-valor  $-\Lambda^{(1)}(\lambda)$ . Em outras palavras, todos os auto-valores de  $T^{(1)}(\lambda)$  possuem, pelo menos, dupla degenerescência em módulo, de modo que podemos escrever

$$T^{(1)}(\lambda) = \sum_{j=1}^{2^{L-1}} \Lambda_j^{(1)}(\lambda) \left| \Psi_j^{(1)} \right\rangle \left\langle \Psi_j^{(1)} \right| - \Lambda_j^{(1)}(\lambda) \Pi^z \left| \Psi_j^{(1)} \right\rangle \left\langle \Psi_j^{(1)} \right| \Pi^z, \quad (4.2.20)$$

onde podemos fazer qualquer escolha dos primeiros  $2^{L-1}$  estados selecionado um estado de cada par  $\{\Lambda_j^{(1)}(\lambda), -\Lambda_j^{(1)}(\lambda)\}$ . Portanto a função de partição resulta em

$$Z_{AP} = \text{Tr}_V [(T^{(1)}(\lambda))^N] = \begin{cases} 0 & N \text{ ímpar,} \\ 2 \sum_{j=1}^{2^{L-1}} (\Lambda_j^{(1)}(\lambda))^N & N \text{ par,} \end{cases} \quad (4.2.21)$$

o que implica que, novamente, apenas o maior auto-valor  $\Lambda_{max}^{(1)}(\lambda)$  contribui para a energia-livre no limite termodinâmico,

$$F_{AP} = -\frac{1}{\beta} \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{LN} \ln (\Lambda_{max}^{(1)}(\lambda))^N. \quad (4.2.22)$$

A igualdade  $F_{AP} = F_{PP}$  estabelece a seguinte relação entre os autovalores máximos das matrizes de transferência

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \Lambda_{max}^{(1)}(\lambda) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \Lambda_{max}^{(0)}(\lambda), \quad (4.2.23)$$

pelo menos para  $\Delta < -1$ , devido ao resultado em [55].

### Condições de contorno (completamente) anti-periódicas

Neste caso, devido à relação (4.2.16), temos que discriminar entre os valores pares e ímpares de  $L$ .

Para  $L$  ímpar, a relação de anti-comutação entre  $\Pi^x$  e  $\Pi^z$  também implica que os auto-valores de  $\Pi^x$  para  $|\Psi\rangle$  e  $\Pi^z |\Psi\rangle$  são opostos. Neste caso, escolhemos os primeiros  $2^{L-1}$  estados de modo que tenham auto-valor de  $\Pi^x$  igual a  $+1$ , do que resulta

$$\Pi^x (T^{(1)}(\lambda))^N = \sum_{j=1}^{2^{L-1}} (\Lambda_j^{(1)}(\lambda))^N \left[ \left| \Psi_j^{(1)} \right\rangle \left\langle \Psi_j^{(1)} \right| - (-1)^N \Pi^z \left| \Psi_j^{(1)} \right\rangle \left\langle \Psi_j^{(1)} \right| \Pi^z \right]. \quad (4.2.24)$$

Tomando o traço na direção vertical obtemos

$$Z_{AA} = Z_{2^N, 2^L} = \text{Tr}_V [\Pi^x (T^{(1)}(\lambda))^N] = \begin{cases} 2 \sum_{j=1}^{2^{L-1}} (\Lambda_j^{(1)}(\lambda))^N, & N \text{ ímpar,} \\ 0, & N \text{ par,} \end{cases} \quad (4.2.25)$$

que é igual ao elemento de matriz  $Z_{2^N, 2^L}$  de (4.2.9).

Por outro lado, os operadores  $\Pi^x$  e  $\Pi^z$  comutam para  $L$  par, de modo que os auto-vetores  $|\Psi\rangle$  e  $\Pi^z |\Psi\rangle$  possuem o mesmo auto-valor de  $\Pi^x$ . Por isto, escolhemos um ordenamento tal que os primeiros  $2^{L-1}$  auto-vetores alternem entre os auto-valores  $+1$  e  $-1$  de  $\Pi^x$ . Portanto,

$$\Pi^x (T^{(1)}(\lambda))^N = \sum_{j=1}^{2^{L-1}} (-1)^{j-1} (\Lambda_j^{(1)}(\lambda))^N \left[ |\Psi_j^{(1)}\rangle \langle \Psi_j^{(1)}| + (-1)^N \Pi^z |\Psi_j^{(1)}\rangle \langle \Psi_j^{(1)}| \Pi^z \right], \quad (4.2.26)$$

o que implica que

$$Z_{AA} = \text{Tr}_V [\Pi^x (T^{(1)}(\lambda))^N] = \begin{cases} 0, & N \text{ ímpar,} \\ 2 \sum_{j=1}^{2^{L-1}} (-1)^{j-1} (\Lambda_j^{(1)}(\lambda))^N, & N \text{ par.} \end{cases} \quad (4.2.27)$$

Novamente isto fornece os elemento de matriz  $Z_{2^N, 2^L}$  de (4.2.9). Observemos que a regra de seleção  $\text{Mod} [\Phi - \Theta, 2] = 0$  é naturalmente satisfeita pelas relações (4.2.25) e (4.2.27).

Estes resultados afirmam, novamente, que apenas o maior auto-valor  $\Lambda_{\max}^{(1)}(\lambda)$  contribuem para a energia-livre no limite termodinâmico

$$F_{AA} = -\frac{1}{\beta} \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{LN} \ln (\Lambda_{\max}^{(1)}(\lambda))^N, \quad (4.2.28)$$

que, devido a (4.2.23), é igual ao caso periódico, pelo menos para  $\Delta < -1$ .

### Anti-periodicidade na direção vertical

Podemos relacionar a função de partição  $Z_{PA}$  a  $Z_{AP}$  devido à simetria de rotação (4.2.11) e, portanto, podemos relacioná-la ao caso periódico. Nas próximas seções nós comentaremos mais sobre este caso.

## Maior função de partição

Pelo cálculo direto da maior função de partição, e devido aos resultados anteriores, nós podemos estender o argumento sobre a concordância entre a energia-livre para as condições de contorno livre e condições periódicas de contorno, saindo da restrição de temperatura infinita.

De fato, a energia-livre destas condições de contorno também concordam para cada conjunto de pesos de Boltzmann positivos  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ; em outras palavras, qualquer valor de temperatura e qualquer paridade do número de sítios. Isto pode ser entendido notando que  $Z_{PP}$ ,  $Z_{AP}$ ,  $Z_{PA}$  e  $Z_{AA}$  são os únicos elementos de matriz de (4.2.9) que podem vir a se tornar o termo dominante, na medida que modificamos  $a$ ,  $b$ ,  $c$ .

Mais especificamente, a função de partição  $Z_{PP}$  é a maior desde que  $\Delta \geq -1$ . Todavia, a situação se modifica quando  $\Delta < -1$ . Neste regime, o elemento de matriz dominante varia de acordo com a paridade dos comprimentos lineares  $L$  e  $N$  da rede. Como  $c > a+b$ , a configuração dominante, dentro de cada função de partição, será aquela que possibilita o maior número de vértices  $\omega_5$  e  $\omega_6$ . As paridades de  $L$  e  $N$  definem se a função de partição com maior número de vértices  $\omega_5$  e  $\omega_6$  é periódica ou anti-periódica ao longo da direção vertical e/ou horizontal. Este cenário é mostrado na Tabela 4.1, que fora embasada no cálculo das funções de partição (4.2.9) para diferentes valores de  $a$ ,  $b$ ,  $c$ .

	Maior contribuição para $\Delta < -1$
$L$ par, $N$ par	$Z_{PP}$
$L$ par, $N$ ímpar	$Z_{PA}$
$L$ ímpar, $N$ par	$Z_{AP}$
$L$ ímpar, $N$ ímpar	$Z_{AA}$

Tabela 4.1: Maior elemento de  $M_{N,L}$  para  $\Delta < -1$ .

Isto implica que o termo dominante  $Z_{\max} = \max [Z_{PP}, Z_{PA}, Z_{AP}, Z_{AA}]$  deve satisfazer

$$Z_{\max} \leq Z_{free} \leq 2^{L+N-1} Z_{\max}, \quad (4.2.29)$$

é aquele que possui energia-livre  $F_{\max}$  igual ao caso de condições de contorno livre. Portanto, quando  $Z_{AP}$ ,  $Z_{PA}$  ou  $Z_{AA}$  é dominante, nós temos que  $F_{AP} = F_{free}$ ,  $F_{PA} = F_{free}$



ou  $F_{AA} = F_{free}$ . Além disso, a igualdade (4.2.23) implica que todas estas energias-livres devem ser iguais, isto é  $F_{AP} = F_{PA} = F_{AA} = F_{PP} = F_{free}$ , para  $\Delta < -1$  e dados valores de  $N$  e  $L$  que não os anule via regra de seleção. Portanto, mesmo quando  $Z_{PP}$  não é o maior elemento da matriz, nós ainda temos  $F_{PP} = F_{free}$ .

## 4.2.2 Condições de contorno toroidais não homogêneas

Voltemo-nos ao caso de condições mistas de contorno  $Z_{j,k}$ . Estas funções de partição são formadas por produtos que envolvem as matrizes  $T^{(0)}(\lambda)$  e  $T^{(1)}(\lambda)$ . Como estas matrizes de transferência não comutam, nós perdemos a integrabilidade do modelo estatístico. Embora nós ainda possamos diagonalizar cada matriz de transferência exatamente, agora temos que lidar com a projeção de um conjunto de auto-vetores sobre o outro. Nosso objetivo é avaliar se estas funções de partição resultam ou não na mesma energia-livre do caso periódico. Mostraremos que, mesmo nesta situação não integrável, ainda podemos extrair alguma informação no limite termodinâmico.

### Primeira linha

Embora a primeira e a última linha de (4.2.9) pareçam ser mistas, elas são formadas, na realidade, pelo produto de uma única matriz de transferência, o que preserva a integrabilidade. Todavia, o contorno na direção vertical parece ser incoerente com esta estrutura de integrabilidade. Veremos que, apesar disso, é possível extrair informações importantes.

Nós vamos olhar apenas para a primeira linha para melhor compreender a estrutura dos demais termos mistos. O problema é, então, calcular a função de partição com condições periódicas de contorno na horizontal ( $\Theta = 0$ ), mas com uma combinação arbitrária de periodicidade a anti-periodicidade na direção vertical ( $\Phi \neq 0$ ). A equação (4.2.10) simplifica para

$$Z_{1,j} = \text{Tr}_V \left[ \bigotimes_{m=1}^L \mathcal{G}_{V_m}^{(\phi_m)} (T^{(0)}(\lambda))^N \right] = \sum_{g=1}^{2^L} (\Lambda_g^{(0)}(\lambda))^N f_{L,g}^{\{\phi_m\}}, \quad (4.2.30)$$

sendo que  $g^{(0)}$  denota o  $g$ -ésimo auto-vetor de  $T^{(0)}(\lambda)$  e a função  $f_{L,g}^{\{\phi_m\}} = \langle g^{(0)} | \prod_{m=1}^L \mathcal{G}_{V_m}^{(\phi_m)} | g^{(0)} \rangle$  o valor esperado do fechamento vertical no estado  $|g^{(0)}\rangle$ .

Nós podemos ordenar estes auto-vetores  $|g^{(0)}\rangle$  e, conseqüentemente, os auto-valores  $\Lambda_g^{(0)}(\lambda)$  pelos auto-valores da componente  $z$  do spin total, uma vez que  $T^{(0)}(\lambda)$  comuta

com o operador de spin total  $S^z$ . Os auto-valores de  $T^{(0)}(\lambda)$  são dados por meio do ansatz de Bethe[8],

$$\Lambda_n^{(0)}(\lambda) = a^L(\lambda) \prod_{i=1}^n \frac{a(\lambda_i - \lambda)}{b(\lambda_i - \lambda)} + b^L(\lambda) \prod_{i=1}^n \frac{a(\lambda - \lambda_i)}{b(\lambda - \lambda_i)}, \quad n = 0, \dots, L \quad (4.2.31)$$

em termos da solução das equações de Bethe

$$\left[ \frac{a(\lambda_i)}{b(\lambda_i)} \right]^L = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{a(\lambda_i - \lambda_j) b(\lambda_j - \lambda_i)}{b(\lambda_i - \lambda_j) a(\lambda_j - \lambda_i)}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4.2.32)$$

onde os setores  $n = 0$  e  $n = L$  correspondem ao estado ferromagnético para cima e para baixo, enquanto o valor  $n = L/2$  ( $L$  par) corresponde ao setor com spin  $z$  total zero. Algumas vezes nós nos referimos ao auto-valor de  $T^{(0)}$  por  $\Lambda_n^{(0)}(\lambda)$  ao invés da forma geral  $\Lambda_g^{(0)}(\lambda)$ . Isto significa que os auto-valores estão sendo indexados pelo operador de spin total  $S^z$ , como é corrente no ansatz de Bethe.

Para o caso em que  $\Delta < 1$  e  $L$  par, o maior auto-valor  $\Lambda_{\max}^{(0)}(\lambda)$  é não degenerado e pode ser encontrado no setor  $n = \frac{L}{2}$ . Por outro lado, para  $L$  ímpar, o maior auto-valor é duplamente degenerado. Neste caso, temos um auto-valor no setor  $n = \frac{L-1}{2}$  e outro no setor  $n = \frac{L+1}{2}$ .

Entretanto, em ambos os casos, os auto-vetores associados aos maiores auto-valores são uma combinação linear complicada dos vetores da base canônica pertencendo àquele setor. Os coeficientes desta combinação linear são todos positivos em virtude do teorema de Perron-Frobenius. Portanto, o valor esperado em (4.2.30) também é positivo. Disto resulta que a ação  $\prod_{m=1}^L \mathcal{G}_{V_m}^{(\phi_m)}$  sobre o maior auto-vetor sempre gera um vetor com pelo menos uma componente positiva quando decomposto na base canônica, sempre que  $\text{Mod}[\Phi, 2] = 0$ . O coeficiente  $f_{L,g}^{\{\phi_m\}}$  é uma função de  $L$  que não conhecemos a princípio. Entretanto, mais importante que isto, é que esta função não depende de  $N$ . Isto implica que este coeficiente simplesmente não contribui para a energia-livre no limite termodinâmico.

$$F_{1,j} = -\frac{1}{\beta} \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{NL} \ln \left[ (\Lambda_{\max}^{(0)}(\lambda))^N f_{L,g_{\max}}^{\{\phi_m\}} \right] = -\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \Lambda_{\max}^{(0)}(\lambda). \quad (4.2.33)$$

Aqui nós assumimos que  $f_{L,g_{\max}}^{\{\phi_m\}} > \exp(-\delta L)$  para  $L$  grande e qualquer  $\delta > 0$ , o que verificamos para redes finitas.

O caso  $\Delta > 1$  é mais intrincado. Neste caso, o maior termo da expressão (4.2.30) varia de acordo com o número de inversões  $\Phi$ , embora o maior auto-valor da matriz de transferência permaneça sempre nos setores  $n = 0$  e  $n = L$ . Isto se deve ao fato de que o coeficiente  $f_{L,g}^{\{\phi_m\}}$  é não nulo nos setores  $n = 0$  e  $n = L$  apenas quando  $\Phi = 0$ , que corresponde às condições periódicas de contorno. Para ver isto, nós escrevemos  $\mathcal{G}^{(0)}$  e  $\mathcal{G}^{(1)}$  em termos dos auto-estados de  $\mathcal{G}^{(1)}$ , tal que

$$\mathcal{G}^{(\phi)} = \sum_{s=0,1} (-1)^{s\phi} |s\rangle \langle s|, \quad |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + (-1)^s |\downarrow\rangle). \quad (4.2.34)$$

Isto implica que

$$\prod_{m=1}^L \mathcal{G}_{V_m}^{(\phi_m)} = \sum_{\langle s \rangle} \exp\left(\pi i \sum_{j=1}^L s_j \phi_j\right) |s_1, \dots, s_L\rangle \langle s_1, \dots, s_L|, \quad (4.2.35)$$

e como nós conhecemos os auto-vetores nos setores  $n = 0, L$ , nós podemos representá-los facilmente na base gerada por  $|s_1, \dots, s_L\rangle$ ,

$$|\uparrow, \dots, \uparrow\rangle = \frac{1}{2^{\frac{L}{2}}} \sum_{\langle s \rangle} |s_1, \dots, s_L\rangle, \quad (4.2.36)$$

$$|\downarrow, \dots, \downarrow\rangle = \frac{1}{2^{\frac{L}{2}}} \sum_{\langle s \rangle} \exp\left(\pi i \sum_{m=1}^L s_m\right) |s_1, \dots, s_L\rangle, \quad (4.2.37)$$

e portanto encontramos

$$Z_{1,j} = \left(\Lambda_{\max, n=0}^{(0)}(\lambda)\right)^N \frac{1}{2^{L-1}} \prod_{k=1}^L \left(1 + (-1)^{\phi_k}\right) + \text{termos de outros setores}. \quad (4.2.38)$$

Podemos ver que esta expressão se reduz ao caso periódico quando  $j = 1$  ( $\phi_k = 0$ ).

Os outros termos em (4.2.38) ocorrem para  $j > 1$  ( $\Phi > 0$ ). De acordo com a regra de seleção  $\text{Mod}[\Phi, 2] = 0$ , o coeficiente  $f_{L,g}^{\{\phi_m\}}$  se anula para  $\Phi = 1$ . Portanto, o caso mais simples não trivial é  $\Phi = 2$ . Neste caso, como  $f_{L,g}^{\{\phi_m\}}$  ainda se anula para os maiores auto-estados nos setores  $n = 0, L$ , nós precisamos proceder aos setores  $n = 1, L-1$ , que contém o segundo maior auto-valor. Mais uma vez, nós conhecemos os auto-vetores exatamente porque  $T^{(0)}(\lambda)$  comuta com o operador de translação cíclica. Os auto-vetores dos setores  $n = 1, L-1$  podem ser escritos como

$$\left| \Psi_{m,n=1}^{(0)} \right\rangle = \sum_{k=1}^L \frac{e^{-\frac{2\pi i}{L}(k-1)(m-1)}}{\sqrt{L}} |\downarrow_k\rangle, \quad (4.2.39)$$

$$\left| \Psi_{m,n=L-1}^{(0)} \right\rangle = \sum_{k=1}^L \frac{e^{-\frac{2\pi i}{L}(k-1)(m-1)}}{\sqrt{L}} |\uparrow_k\rangle, \quad m = 1, \dots, L, \quad (4.2.40)$$

cujo o maior auto-vetor ocorre para  $m = 1$ . Portanto, nós temos

$$Z_{1,j} = \frac{4}{L} \left( \Lambda_{\max, n=1}^{(0)}(\lambda) \right)^N + \text{termos desprezíveis no limite termodinâmico}, \quad (4.2.41)$$

ainda

$$F_{1,j} = -\frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \left( \Lambda_{\max, n=1}^{(0)}(\lambda) \right) = -\frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \left( \Lambda_{\max, n=0}^{(0)}(\lambda) \right) = F_{PP}, \quad (4.2.42)$$

sempre que  $j$  tiver exatamente duas inversões. A igualdade dos limites acima vem do fato de que a razão entre os dois auto-valores tende a uma constante não nula quando  $L$  vai para infinito, e isto é suficiente para fornecer o mesmo limite. De maneira geral, nós temos os seguintes resultados para  $\Delta > 1$ . A função de partição  $Z_{1,j}$  é zero para  $\Phi = 2k - 1$ . Para  $\Phi = 2k$ , a função de partição por sítio no limite termodinâmico pode ser calculada a partir do maior auto-valor no setor  $k$ , tal que

$$F_{1,j} = -\frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \left( \Lambda_{\max, n=k}^{(0)}(\lambda) \right). \quad (4.2.43)$$

Isto é uma consequência do valor esperado de  $\prod_{m=1}^L \mathcal{G}_{V_m}^{(\phi_m)}$  se anular para auto-vetores nos setores  $n$  tais que  $n < k$  ou  $n > L - k$ . Especificamente, quando  $\Phi = L$ , para  $L$  par, nós temos

$$F_{PA} = -\frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \left( \Lambda_{\max, n=\frac{L}{2}}^{(0)}(\lambda) \right). \quad (4.2.44)$$

Este resultado parece contrastar com das condições periódicas de contorno (4.2.18), uma vez que para  $\Delta > 1$  o maior auto-valor é dado por  $\Lambda_{\max}^{(0)}(\lambda) = \Lambda_{n=0}^{(0)}(\lambda)$  e aqui a contribuição dominante provém do maior auto-valor no setor  $n = L/2$ :  $\Lambda_{\max, n=\frac{L}{2}}^{(0)}(\lambda)$ . Entretanto, como observado anteriormente, a razão destes auto-valores resultam em uma constante não nula para  $L$  grande, o que confirma que  $F_{PA} = F_{PP}$ . Isto também pode ser provado por meio da solução do ansatz de Bethe para o auto-valor  $\Lambda_{\max, n=\frac{L}{2}}^{(0)}(\lambda)$ , com descrito no Apêndice D.

## Primeira Coluna

Devido à simetria (4.2.11), a primeira coluna e a primeira linha devem produzir os mesmos resultados, embora suas expressões explícitas sejam bem diferentes em vista da representação (4.2.10). Todavia, ainda é interessante olhar para  $Z_{j,1}$  de modo a melhor entender a estrutura geral dos termos  $Z_{j,k}$ .

A função de partição com condições periódicas de contorno na direção vertical e condições mistas na horizontal pode ser escrita como

$$Z_{j,1} = \text{Tr} \left[ \prod_{m=1}^N T^{(\theta_m)}(\lambda) \right], \quad (4.2.45)$$

sendo que o primeiro e o último termo  $Z_{PP}$  e  $Z_{AP}$  já foram discutidos nas seções anteriores.

Devido à simetria (4.2.11), o resultado (4.2.33) para  $\Delta < 1$ , o resultado (4.2.44) para  $\Delta > 1$ , nós podemos estender (4.2.23) como

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \Lambda_{\max, n=\frac{L}{2}}^{(0)}(\lambda) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \Lambda_{\max}^{(1)}(\lambda), \quad (4.2.46)$$

para todos os valores de  $\Delta$ . Note que o limite aqui não é tomado sobre o maior auto-valor de  $T^{(0)}(\lambda)$  porque, para  $\Delta > 1$ , o maior auto-valor de  $T^{(0)}(\lambda)$  não está no setor  $n = \frac{L}{2}$ . Neste ponto, nós nos restringimos ao caso de redes quadradas  $L = N$  com número de sítios pares.

É interessante entender o mecanismo que dá origem à regra de seleção no caso (4.2.45). O produto das matrizes de transferência em (4.2.45) pode ser escrito como

$$\prod_{m=1}^N T^{(\theta_m)} = (T^{(0)})^{k_1} (T^{(1)})^{k_2} \dots (T^{(0)})^{k_{N-1}} (T^{(1)})^{k_N} (T^{(0)})^{k_{N+1}}, \quad (4.2.47)$$

sendo  $j$  dado, ou equivalentemente  $\{\theta_1, \dots, \theta_N\}$ , existe um conjunto de inteiros não negativos com  $\sum_{j=1}^{N+1} k_j = N$  tal que (4.2.47) é satisfeita. Ainda

$$\prod_{m=1}^N T^{(\theta_m)} = \sum_{\langle g_j \rangle} (\Lambda_{g_1}^{(0)})^{k_1} (\Lambda_{g_2}^{(1)})^{k_2} \dots (\Lambda_{g_{N-1}}^{(0)})^{k_{N-1}} (\Lambda_{g_N}^{(1)})^{k_N} (\Lambda_{g_{N+1}}^{(0)})^{k_{N+1}} \times \\ \left| g_1^{(0)} \right\rangle \left\langle g_1^{(0)} | g_2^{(1)} \right\rangle \left\langle g_2^{(1)} \right| \dots \left| g_{N-1}^{(0)} \right\rangle \left\langle g_{N-1}^{(0)} | g_N^{(1)} \right\rangle \left\langle g_N^{(1)} | g_{N+1}^{(0)} \right\rangle \left\langle g_{N+1}^{(0)} \right|, \quad (4.2.48)$$

e portanto

$$Z_{j,1} = \sum_{\langle g_j \rangle} (\Lambda_{g_1}^{(0)})^{k_1} (\Lambda_{g_2}^{(1)})^{k_2} \dots (\Lambda_{g_{N-1}}^{(0)})^{k_{N-1}} (\Lambda_{g_N}^{(1)})^{k_N} (\Lambda_{g_{N+1}}^{(0)})^{k_{N+1}} \\ \times \left\langle g_1^{(0)} | g_2^{(1)} \right\rangle \left\langle g_2^{(1)} \right| \dots \left| g_{N-1}^{(0)} \right\rangle \left\langle g_{N-1}^{(0)} | g_N^{(1)} \right\rangle \left\langle g_N^{(1)} | g_{N+1}^{(0)} \right\rangle \left\langle g_{N+1}^{(0)} | g_1^{(0)} \right\rangle. \quad (4.2.49)$$

Para  $\Theta = 1$ , que não satisfaz a regra de seleção, nós podemos escolher  $k_1 = k - 1$ ,  $k_2 = 1$  e  $k_3 = N - k$ . A soma sobre todos os auto-vetores de  $T^{(1)}(\lambda)$  pode ser escrita agrupando a contribuição dos pares  $\Lambda_{g_2}^{(1)}(\lambda)$  e  $-\Lambda_{g_2}^{(1)}(\lambda)$ . Isto fornece

$$Z_{j,1} = \sum_{\langle g_1, g_2' \rangle} [\Lambda_{g_1}^{(0)}]^{N-1} \Lambda_{g_2}^{(1)} \left\langle g_1^{(0)} \right| \left[ \left| g_2^{(1)} \right\rangle \left\langle g_2^{(1)} \right| - \Pi^z \left| g_2^{(1)} \right\rangle \left\langle g_2^{(1)} \right| \Pi^z \right] \left| g_1^{(0)} \right\rangle, \quad (4.2.50)$$

escolhendo os auto-vetores de  $T^{(0)}(\lambda)$  de modo a possuírem número quântico de paridade definido, vemos que  $Z_{j,1}$  se anula

Para estudar a energia-livre no limite termodinâmico, escolhemos estados  $|g_j^{(0)}\rangle$  com valor definido de spin- $z$  total e  $|g_j^{(1)}\rangle$  com número quântico definido do operador de inversão. Nós também nos restringimos ao caso em que  $N$  é par e  $L$  é ímpar por simplicidade, embora os resultados finais para paridades de  $N$  e  $L$  sejam semelhantes aos discutidos abaixo.

Geralmente, a função de partição (4.2.49) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} Z_{j,1} &= \sum_{\langle g_{\text{odd}}, g'_{\text{even}} \rangle} (\Lambda_{g_1}^{(0)})^{k_1} (\Lambda_{g_2}^{(1)})^{k_2} \dots (\Lambda_{g_{N-1}}^{(0)})^{k_{N-1}} (\Lambda_{g_N}^{(1)})^{k_N} (\Lambda_{g_{N+1}}^{(0)})^{k_{N+1}} \\ &\times \langle g_1^{(0)} | g_2^{(1)} \rangle \langle g_2^{(1)} | \dots | g_{N-1}^{(0)} \rangle \langle g_{N-1}^{(0)} | g_N^{(1)} \rangle \langle g_N^{(1)} | g_{N+1}^{(0)} \rangle \langle g_{N+1}^{(0)} | g_1^{(0)} \rangle \\ &\times \left[ 1 + (-1)^{k_2 + \alpha_{g_1} + \alpha_{g_3}} \right] \left[ 1 + (-1)^{k_4 + \alpha_{g_3} + \alpha_{g_5}} \right] \dots \left[ 1 + (-1)^{k_N + \alpha_{g_{N-1}} + \alpha_{g_{N+1}}} \right], \end{aligned} \quad (4.2.51)$$

sendo os números  $\alpha_j = 0, 1$  dependendo da paridade do auto-estado  $|g_j^{(0)}\rangle$ .

Para o caso  $\Theta = 2$ , nós temos dois casos distintos. Chamamos de inversões consecutivas àquele onde existe um produto consecutivo de duas matrizes  $T^{(1)}(\lambda)$  entre um produto de matrizes  $T^{(0)}(\lambda)$ , o que implica em  $k_1 = m - 2$ ,  $k_2 = 2$ ,  $k_3 = N - m$ . O outro caso denominamos inversões separadas em que existe duas matrizes  $T^{(1)}(\lambda)$  separadas por um produto de  $T^{(0)}(\lambda)$ . Isto significa que  $k_1 = m_1 - 1$ ,  $k_2 = 1$ ,  $k_3 = m_2 - m_1 - 1$ ,  $k_4 = 1$ ,  $k_5 = N - m_2$ ,  $m_2 - m_1 \geq 2$ , e os demais  $k_j$  são todos zero.

Com objetivo ilustrativo, nós discutimos o caso de inversões consecutivas e deixamos o caso de inversões separadas para o Apêndice E.

As inversões consecutivas em (4.2.51) podem ser escritas compactamente como

$$Z_{j,1} = \sum_{g_1, g'_2} 2(\Lambda_{g_1}^{(0)})^{N-2} (\Lambda_{g_2}^{(1)})^2 \left| \langle g_1^{(0)} | g_2^{(1)} \rangle \right|^2, \quad (4.2.52)$$

onde o linha significa soma sobre metade dos estados escolhidos entre cada par  $|g^{(1)}\rangle$ ,  $\Pi^z |g^{(1)}\rangle$ . Este caso é semelhante a  $\Theta = 1$ , exceto por uma troca de sinal devido a  $k_2 = 2$  ao invés de  $k_2 = 1$ .

Dado que para  $L$  grande nós temos

$$\begin{aligned} \left| \langle g_{\text{max}, n=L/2}^{(0)} | g_{\text{max}}^{(1)} \rangle \right| &> \exp(-\delta L), \quad \forall \delta > 0 \quad \Delta \leq 1, \\ \sum_{n=0}^L \left| \langle g_{\text{max}, n}^{(0)} | g_{\text{max}}^{(1)} \rangle \right| &> \exp(-\delta L), \quad \forall \delta > 0 \quad \Delta > 1, \end{aligned} \quad (4.2.53)$$

como verificado para redes finitas, isto implica que

$$F_{j,1} = \lim_{L,N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta LN} \ln \left( 2 \sum_{n=0}^L (\Lambda_{\max,n}^{(0)})^{N-2} (\Lambda_{\max}^{(1)})^2 |\langle g_{\max,n}^{(0)} | g_{\max}^{(1)} \rangle|^2 \right) = F_{PP}, \quad (4.2.54)$$

uma vez que a condição (4.2.53) assegura que o fator de projeção  $\langle g_{\max,n}^{(0)} | g_{\max}^{(1)} \rangle$  não afeta a energia-livre no limite termodinâmico.

Como um último exemplo da primeira coluna  $Z_{j,1}$ , nós gostaríamos de entender o caso onde temos o máximo de alternância entre  $T^{(0)}(\lambda)$  e  $T^{(1)}(\lambda)$ . Neste caso nós temos  $k_1 = k_2 = \dots k_n = 1$  e  $k_{N+1} = 0$ . Isto é equivalente a  $j = j_0 = \frac{2}{3}(2^N - 1)$  para  $N$  par. Portanto, nós temos

$$Z_{j_0,1} = \sum_{g_1, g'_2, \dots, g_{N-1}, g'_N} \prod_{m=1}^{\frac{N}{2}} \Lambda_{g_{2m-1}}^{(0)} \Lambda_{g_{2m}}^{(1)} \langle g_{2m-1}^{(0)} | g_{2m}^{(1)} \rangle \langle g_{2m}^{(1)} | g_{2m+1}^{(0)} \rangle (1 + (-1)^{1+\alpha_{g_{2m-1}}+\alpha_{g_{2m+1}}}), \quad (4.2.55)$$

sendo  $\alpha_{g_{N+1}} = \alpha_{g_1}$ . As contribuições não nulas são aquelas em que  $\alpha_{g_1} = 1 - \alpha_{g_3} = \alpha_{g_5} = \dots = 1 - \alpha_{g_{N-1}}$ . Isto é possível apenas quando  $\Theta = \frac{N}{2}$  é par, de outra forma todos os termos em  $Z_{j_0,1}$  se anulariam. Desta forma, nós temos que

$$F_{j_0,1} = \lim_{L,N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta NL} \ln \sum_{n=0}^L \left( 2 (\Lambda_{\max,n}^{(0)} \Lambda_{\max}^{(1)}) |\langle g_{\max,n}^{(0)} | g_{\max}^{(1)} \rangle|^2 \right)^{\frac{N}{2}}. \quad (4.2.56)$$

Agora o número de vezes que a projeção  $\langle g_{\max,n}^{(0)} | g_{\max}^{(1)} \rangle$  aparece é comparável a  $N$ . Todavia, a hipótese (4.2.53) nos diz que as correções são desprezíveis e que a energia-livre acima equivale ao caso periódico,  $F_{j_0,1} = F_{PP}$ .

## Termo geral

Coletando todos os resultados acima, nós vemos que a função de partição é um produto dos auto-valores  $\Lambda^{(0)}(\lambda)$  e  $\Lambda^{(1)}(\lambda)$  e da projeção dos respectivos auto-estados  $\langle g_j^{(0)} | g_k^{(1)} \rangle$  elevado a determinadas potências. Como para a finalidade de calcular a energia-livre os auto-valores concordam no limite termodinâmico, e a projeção de auto-estados não contribui no mesmo limite, nós conjecturamos que  $F_{j,k}$  para todos valores  $\Delta$  é dado, no limite termodinâmico, por

$$F_{j,k} = -\frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln \left( \Lambda_{\max, n=\frac{L}{2}}^{(0)}(\lambda) \right)}{L} = F_{PP}, \quad (4.2.57)$$

sempre que  $j, k$  satisfizerem a regra de seleção.

Isto implica que a energia-livre de todas combinações de periodicidade e anti-periodicidade são iguais. Sendo assim, a possibilidade de uma dependência efetiva para a entropia do modelo de seis-vértices em relação às condições de contorno deve residir nas condições fixas de contorno, o que será discutido na próxima seção.

### 4.3 Condições fixas de contorno

A situação muda de figura dramaticamente quando consideramos condições fixas de contorno. Neste caso, podemos mostrar que as escolhas do contorno fornecem resultados diferentes para a energia-livre e para entropia no limite termodinâmico. Por conveniência, nós consideraremos redes quadradas  $L = N$  em toda a seção.

#### 4.3.1 Condições de contorno ferroelétrico

O caso mais simples é o que chamamos de condições de contorno ferroelétrico (FE), veja a Figura 4.2. Este tipo de contorno resulta em apenas uma configuração acessível, independentemente do tamanho do sistema

$$\Omega_{FE} = 1, \tag{4.3.1}$$

Isto é uma consequência direta da regra do gelo e já havia sido notado em [54].

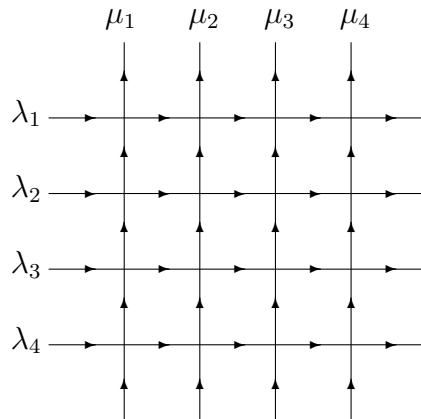


Figura 4.2: Função de partição  $Z_N^{FE}$  para  $N = 4$  do modelo de seis-vértices com condições de contorno ferroelétrico. Completo congelamento dos graus de liberdade internos.



Existem quatro possíveis contornos deste tipo associados a cada um dos quatro vértices  $\omega_i$  for  $i = 1, \dots, 4$  cuja direção das flechas em arestas opostas no contorno são iguais. Nós podemos obter uma condição de contorno a partir da outra aplicando rotações na rede. Para todas as quatro condições temos entropia zero ( $S_{FE} = 0$ ).

### 4.3.2 Condições de contorno Domain-Wall

A primeira situação não trivial apareceu no contexto do cálculo de produtos escalares entre estados de Bethe. Este é caso da função de partição com condições de contorno tipo Domain-Wall (parede de domínio)[85]

$$Z_N^{DWBC}(\{\lambda\}, \{\mu\}) = \langle \Downarrow | B(\lambda_N) \cdots B(\lambda_2) B(\lambda_1) | \Uparrow \rangle. \quad (4.3.2)$$

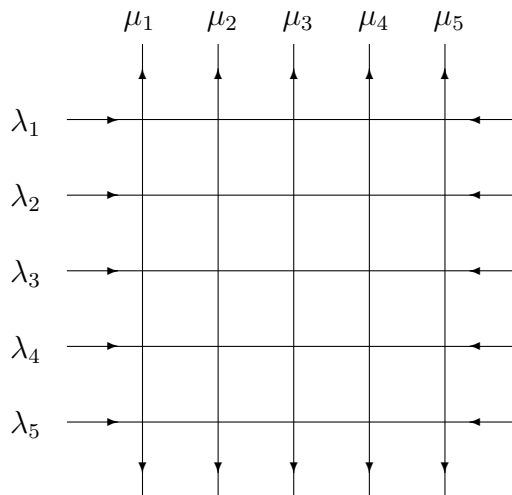


Figura 4.3: Função de partição  $Z_N^{DWBC}$  para  $N = 5$  do modelo de seis-vértices com condições de contorno domain-wall.

A função de partição acima pode ser escrita na forma de determinante [86, 87], que por sua vez foi bastante útil no entendimento do limite termodinâmico. Os resultados para energia-livre e para entropia foram surpreendentemente diferentes em comparação com as condições periódicas de contorno[52, 53]. Estes resultados e sua correção de tamanho finito foram rigorosamente provados[88].

A função de partição  $Z_N^{DWBC}$  é uma das condições fixas de contorno que pode ser encontrada dentro da soma que compõe  $Z_{AA}$ . Na realidade, existem duas funções de

partição equivalentes dentro do caso completamente anti-periódico, que são trivialmente relacionadas por rotação da rede.

A entropia a temperatura infinita  $S_{DWBC} = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{3^3}{2^4} \right) \approx 0.261624$  é menor que o caso periódico. Desta forma, é natural indagar se existem outras condições de contorno que resultam em uma entropia diferente do caso periódico.

### 4.3.3 Descendentes das condições de contorno domain wall

Para abordar a questão sobre existência de outras condições fixas de contorno, nós investigamos exaustivamente o número de configurações de várias condições de contorno. Embora uma classificação completa das condições de contorno em conjuntos de padrão semelhante esteja fora de cogitação, até o presente momento, nós encontramos alguns casos interessantes. Surpreendentemente existe uma família de condições de contorno que possuem exatamente o mesmo número de configurações do caso domain-wall. Nós chamaremos estas de condições de contorno descendentes do domain wall (dDWBC). Na figura 4.4, nós damos um exemplo para  $N = 5$ .

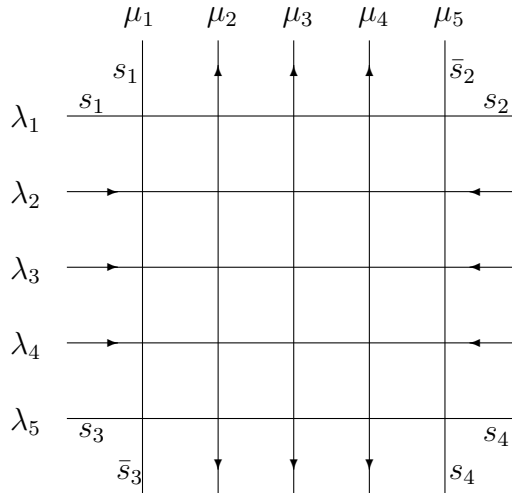


Figura 4.4: Função de partição  $Z_N^{dDWBC}$  do modelo de seis-vértices com condições de contorno descendente do domain wall. As variáveis  $s_i = \uparrow, \downarrow$  ou  $\rightarrow, \leftarrow$  carregam uma orientação de flecha e, atrelado a estas,  $\bar{s}_i$  carrega a flecha oposta.

Os dDWBC que nós conseguimos classificar e que persistem para valores arbitrários de  $N$  podem ser tratados com as ferramentas da integrabilidade. Nós utilizamos o ansatz de

Bethe algébrico para derivar uma relação de recorrência para  $Z_N^{dDWBC}$ , estabelecendo uma relação desta com a função de partição domain-wall usual  $Z_{N-1}^{DWBC}$ , numa rede menor. Isto pode ser feito através do mesmo procedimento de [89], embora aqui obtenhamos diferentes tipos de função de partição  $Z_N^{dDWBC}$  e  $Z_{N-1}^{DWBC}$ . A função de partição  $Z_N^{dDWBC}$  (veja Figura 4.4) pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} Z_N^{dDWBC}(\{\lambda\}, \{\mu\}) &= \\ &= \langle s_4 \downarrow_{N-2} \bar{s}_3 | (\mathcal{T}_A(\lambda_N))_{s_3, s_4} B(\lambda_{N-1}) \cdots B(\lambda_2) (\mathcal{T}_A(\lambda_1))_{s_1, s_2} | \bar{s}_2 \uparrow_{N-2} s_1 \rangle, \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

sendo  $s_i = \uparrow, \downarrow$  or  $\rightarrow, \leftarrow$  e  $\bar{s}_i$  o seu oposto.

Para ilustrar isso, tomemos  $s_1 = s_2 = s_4 = \downarrow$ , e  $s_3 = \uparrow$ ,

$$Z_N(\{\lambda\}, \{\mu\}) = \langle \downarrow_N | B(\lambda_N) \cdots B(\lambda_2) D(\lambda_1) | \uparrow_{N-1} \downarrow \rangle. \quad (4.3.4)$$

Usando o chamado two-site model decomposition, a matriz de monodromia é decomposta em duas partes

$$\mathcal{T}_A(\lambda) = \begin{pmatrix} A_1(\lambda) & B_1(\lambda) \\ C_1(\lambda) & D_1(\lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{N-1}(\lambda) & B_{N-1}(\lambda) \\ C_{N-1}(\lambda) & D_{N-1}(\lambda) \end{pmatrix}, \quad (4.3.5)$$

e podemos mostrar a seguinte relação

$$Z_N(\{\lambda\}, \{\mu\}) = \sum_{j=1}^N r_j \langle \downarrow_{N-1} | \prod_{k=j+1}^{\widehat{N}} B_{N-1}(\lambda_k) D_{N-1}(\lambda_j) \prod_{k=1}^{\widehat{j-1}} B_{N-1}(\lambda_k) | \uparrow_{N-1} \rangle, \quad (4.3.6)$$

sendo

$$\begin{aligned} r_1 &= a(\lambda_1 - \mu_1) \prod_{m=2}^N b(\lambda_m - \mu_1), & r_2 &= \frac{c(\lambda_1 - \mu_1)c(\lambda_2 - \mu_1)}{a(\lambda_1 - \mu_1)b(\lambda_2 - \mu_1)} r_1, \\ r_j &= \frac{a(\lambda_{j-1} - \mu_1)c(\lambda_j - \mu_1)}{c(\lambda_{j-1} - \mu_1)b(\lambda_j - \mu_1)} r_{j-1} & j &= 3, \dots, N. \end{aligned} \quad (4.3.7)$$

De agora em diante, nesta seção, nós vamos omitir por conveniência os índices  $N-1$  dos operadores  $B(\lambda)$  e  $D(\lambda)$ , que atuam no espaço  $\prod_{m=2}^N V_m$ . Nós utilizamos a álgebra de Yang-Baxter (4.1.5) com o propósito de mover os operadores  $D(\lambda)$  para a direita. Para tanto, utilizamos as propriedades de comutatividade dos operadores  $B(\lambda)$  e a relação

$$D(\lambda_j) \prod_{m=1}^{\widehat{j-1}} B(\lambda_m) = \sum_{k=1}^j \beta_{jk} \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq k}}^{\widehat{j}} B(\lambda_m) D(\lambda_k), \quad (4.3.8)$$

sendo

$$\beta_{jk} = \begin{cases} -\frac{c(\lambda_j - \lambda_k)}{b(\lambda_j - \lambda_k)} \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^j \frac{a(\lambda_k - \lambda_i)}{b(\lambda_k - \lambda_i)}, & k \neq j, \\ \prod_{i=1}^{j-1} \frac{a(\lambda_j - \lambda_i)}{b(\lambda_j - \lambda_i)}, & k = j. \end{cases} \quad (4.3.9)$$

Como o estado  $|\uparrow\rangle$  é um auto-estado do operador  $D(\lambda)$ , resulta a seguinte relação de recorrência

$$Z_N(\{\lambda\}, \{\mu\}) = \sum_{k=1}^N Z_{N-1}^{DWBC}(\{\lambda\} \setminus \lambda_k, \{\mu\} \setminus \mu_1) \left[ (b(\lambda_k))^{N-1} \sum_{j=k}^N r_j \beta_{jk} \right]. \quad (4.3.10)$$

É possível obter uma expressão concisa para a função de partição em termos de uma fórmula de determinante. Neste processo, nós substituímos a fórmula de determinante para a função de partição domain wall [86, 87], que escrevemos na forma

$$Z_N^{DWBC}(\{\lambda\}, \{\mu\}) = f_N(\{\lambda\}, \{\mu\}) \det [\rho(\lambda_i, \mu_j)]_{i=1, \dots, N}^{j=1, \dots, N}, \quad (4.3.11)$$

na relação (4.3.10). Nós finalmente obtemos

$$Z_N(\{\lambda\}, \{\mu\}) = \begin{vmatrix} \delta_1 & \rho(\lambda_1, \mu_2) & \rho(\lambda_1, \mu_3) & \dots & \rho(\lambda_1, \mu_N) \\ \delta_2 & \rho(\lambda_2, \mu_2) & \rho(\lambda_2, \mu_3) & \dots & \rho(\lambda_2, \mu_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_N & \rho(\lambda_N, \mu_2) & \rho(\lambda_N, \mu_3) & \dots & \rho(\lambda_N, \mu_N) \end{vmatrix}, \quad (4.3.12)$$

sendo  $\delta_k$ ,  $\rho(\lambda, \mu)$  e  $f_N(\{\lambda\}, \{\mu\})$  dados por

$$\delta_k = (-1)^{1+k} f_{N-1}(\{\lambda\} \setminus \lambda_k, \{\mu\} \setminus \mu_1) b^{N-1}(\lambda_k) \sum_{j=k}^N r_j \beta_{jk}, \quad (4.3.13)$$

$$\rho(\lambda, \mu) = \frac{c(\lambda - \mu)}{a(\lambda - \mu)b(\lambda - \mu)}, \quad (4.3.14)$$

$$\begin{aligned} f_N(\{\lambda\}, \{\mu\}) &= \\ &= \frac{\prod_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{(c_{ij}c_{ji}b_{ii}b_{jj} + c_{ii}c_{jj}a_{ij}a_{ji})(c_{ii}c_{jj}b_{ij}b_{ji} + c_{ij}c_{ji}a_{ii}a_{jj})}{\rho_{ii}\rho_{jj}(c_{ij}c_{ji}b_{ii}b_{jj} + c_{ii}c_{jj}a_{ij}a_{ji}) - \rho_{ij}\rho_{ji}(c_{ij}c_{ji}a_{ii}a_{jj} + c_{ii}c_{jj}b_{ij}b_{ji})}}{\prod_{i=1}^N (a_{ii}b_{ii})^{N-2}}, \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

e denotamos  $a_{ij} = a(\lambda_i - \mu_j)$ , e assim por diante. Note que a nossa forma de representar a função de partição domain wall, dada pelas expressões (4.3.11), (4.3.14-4.3.15) é válida para todos os regimes físicos, isto é, para todos valores de  $\Delta$  [49].

Tomando o limite homogêneo e fazendo todos os pesos de Boltzmann iguais a um, nós obtemos como esperado o número de matrizes de sinal alternado [57]. Portanto, este contorno produz a mesma entropia do domain wall quando a temperatura vai a infinito ou, equivalentemente, a entropia residual quando as energias de todos os seis vértices são iguais.

A inversão de flechas nas arestas dos cantos que define a função de partição (4.3.3) corresponde fazer as seguintes trocas entre pares de pesos de Boltzmann  $\{\omega_1, \omega_5\}$  ou  $\{\omega_2, \omega_6\}$  para o canto superior esquerdo,  $\{\omega_1, \omega_6\}$  ou  $\{\omega_2, \omega_5\}$  para o canto inferior direito,  $\{\omega_3, \omega_6\}$  ou  $\{\omega_4, \omega_5\}$  para o canto superior direito e  $\{\omega_3, \omega_5\}$  ou  $\{\omega_4, \omega_6\}$  para o canto inferior esquerdo. Isto significa que, desde que exista uma flecha do contorno entrando e outra saindo no vértice do canto, podemos inverter a orientação destas flechas sem que isto prejudique a soma sobre as configurações internas admissíveis. Daí resulta uma nova função de partição com o mesmo número de configurações da primeira.

Devemos notar que esta invariância no número de configurações pela inversão nas flechas do canto não está restrita aos contornos do tipo domain wall. Podemos encontrar esta invariância em qualquer outro contorno que possua flechas no canto contribuindo com fluxo “isolado” nulo para este vértice.

#### 4.3.4 Fusão das condições de contorno domain wall e ferroelétrico

Uma outra condição de contorno cuja entropia difere do caso periódico pode ser obtida a partir de uma fusão entre as condições do tipo domain wall e ferroelétrico.

Esta nova condição de contorno é obtida da seguinte forma: Escolha um número  $n$  entre 0 e  $N$ . Preenchemos as arestas do canto superior esquerdo como se fosse um domain wall. As arestas opostas a estas também são preenchidas de acordo com o contorno do domain wall. As demais setas são preenchidas como um contorno tipo ferroelétrico, veja a Figura (4.5). Por conta do congelamento parcial da rede, este contorno remete ao cálculo

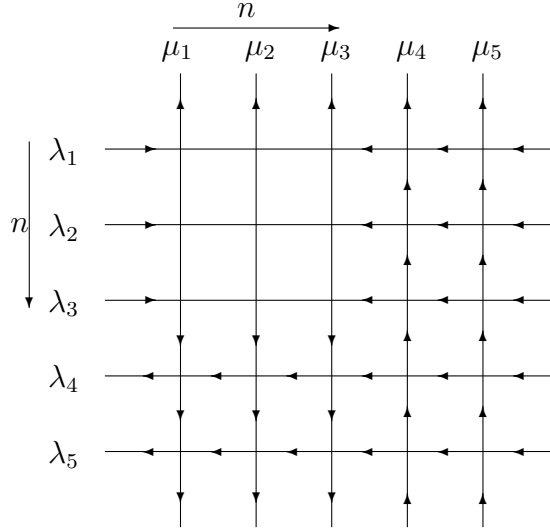


Figura 4.5: Fusão dos contornos domain wall e ferroelétrico.

da função de partição de um domain wall de  $n \times n$  sítios. Portanto a entropia fica

$$S_{rDWBC} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{n}{N} \right)^2 S_{DWBC}. \quad (4.3.16)$$

Escolhendo uma sequência adequada  $n(N)$ , podemos obter qualquer valor de entropia tal que  $0 = S_{FE} \leq S \leq S_{DWBC} = \frac{1}{2} \ln\left(\frac{3^3}{2^4}\right)$ .

### 4.3.5 Condições de contorno Néel

Para além das condições fixas de contorno já apresentadas, nós procuramos também pelo contorno que possui o maior número de configurações. Olhando para tamanhos finitos  $N \leq 6$ , nós verificamos computacionalmente que as condições de contorno do tipo Néel, Figura 4.6, é aquela que fornece o maior número de configurações, em contraste com as condições de contorno ferroelétrico, que permite apenas uma configuração. Devido à alternância das flechas no contorno, temos maiores oportunidades de inverter as flechas quando do preenchimento das configurações internas. Isto justificaria o elevado número de configurações comparado a outras condições fixas de contorno[49]. Para  $N$  par, este contorno está contido na soma do caso periódico  $\Omega_{PP}$ . Para  $N$  ímpar, existe um análogo que também chamamos de Néel e está contido na soma do contorno antiperiódico  $\Omega_{AA}$ .

Assumindo a veracidade da informação acima, podemos utilizar um argumento semelhante ao apresentado na seção 4.2, a fim de mostrar que a entropia Néel deve ser a mesma

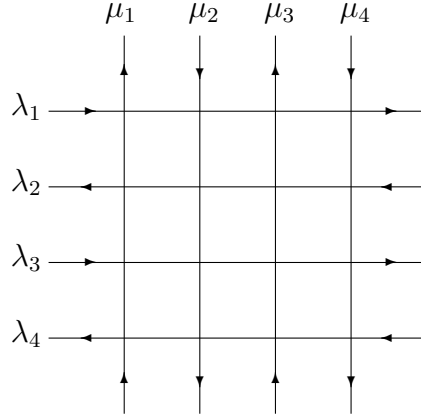


Figura 4.6: Condições de contorno Néel para  $N = 4$ .

do caso periódico, pois

$$\Omega_{NE} \leq \Omega_{free} \leq 2^{2N} \Omega_{PP} \leq 2^{4N} \Omega_{NE}, \quad (4.3.17)$$

de onde segue  $S_{free} = S_{PP} = S_{NE}$  no limite termodinâmico.

Entretanto, ainda não conseguimos obter o número de configurações  $\Omega_{NE}$  exatamente como foi possível de ser feito para o domain wall. A integrabilidade do modelo de seis-vértices, neste caso, não parece fornecer nenhuma pista para o cálculo da entropia ou da função de partição. Para ilustrar esta afirmação, consideremos que a função de partição pode ser escrita no formalismo do método do espalhamento inverso como

$$Z_N^{NE}(\{\lambda\}, \{\mu\}) = \langle \uparrow \downarrow \dots \uparrow \downarrow | D(\lambda_N) A(\lambda_{N-1}) \dots D(\lambda_2) A(\lambda_1) | \uparrow \downarrow \dots \uparrow \downarrow \rangle, \quad (4.3.18)$$

Acontece que os operadores  $A(\lambda)$ ,  $D(\lambda)$  e  $A(\lambda)D(\lambda)$  não comutam para os diferentes parâmetros espectrais. Desta forma, não conseguimos achar uma fórmula simples em forma de determinante.

Na ausência de resultados analíticos, nós calculamos numericamente o número de configurações para valores de  $N$  até 20. Isto nos revela a Figura 4.7 para a entropia “finita”. A entropia aparenta se comportar como  $S_{NE} = S_{PP}(1 - \frac{\gamma}{N})$ , com  $\gamma \sim 2$ .

O número exato de configurações para uma rede quadrada e sob condições de contorno do tipo Néel pode ser encontrado no Apêndice F. Todavia, para o cálculo da entropia residual importa apenas a forma exponencial com que o número de configurações cresce. Na Tabela 4.2 nós fornecemos o número de dígitos do número de configurações. É fácil reconhecer nestes números que as diferenças consecutivas, agrupadas de quatro em quatro,

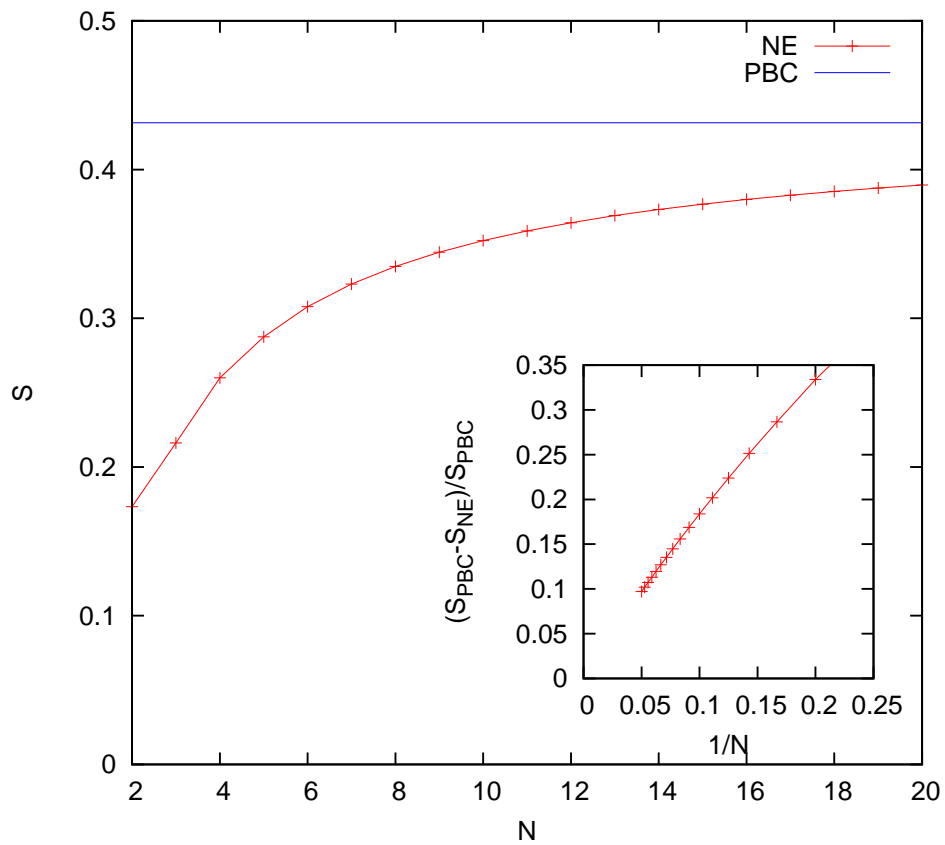


Figura 4.7: Comparação entre entropias do caso periódico  $S_{PBC} = \frac{3}{2} \ln(\frac{4}{3})$  com aproximação de tamanho finito do caso Néel.



$N$	número de dígitos	diferença
3	1	
4	2	1
5	4	2
6	5	1
7	7	2
8	10	3
9	13	3
10	16	3
11	19	3
12	23	4
13	28	5
14	32	4
15	37	5
16	43	6
17	49	6
18	55	6
19	61	6
20	68	7

Tabela 4.2: Número de dígitos do número de configurações para uma rede quadrada de tamanho  $N$  e sob condições de contorno tipo Néel.

formam uma progressão aritmética. Com isto, obtemos a aproximação

$$S_{4k+3} \approx \frac{1 + \left(\sum_{j=1}^k 6j\right)}{(4k+3)^2} \log(10) = \frac{2 + (1+6k)k}{2(4k+3)^2} \log(10),$$

e tomando o limite termodinâmico encontramos

$$S_{NE} \approx \frac{3}{16} \log(10) = 0.431735\dots \approx 0.431523\dots = \frac{3}{2} \log\left(\frac{4}{3}\right) = S_{PBC}. \quad (4.3.19)$$

A aproximação obviamente não resulta no valor exato da entropia, pois que a entropia Néel não pode exceder a periódica. No entanto, adquirimos grande confiança de que as condições de contorno Néel sejam, de fato, maximal.

Assim como o modelo de seis-vértices com condições de contorno domain wall está associado ao problema de contagem de matrizes de sinais alternados, todas as condições fixas de contorno correspondem a um problema semelhante no contexto das matrizes de sinais alternados generalizadas[49, 90]. Em particular, as condições do tipo Néel ( $N$  par) nos remetem à contagem do seguinte tipo de matrizes: cada entrada não nula da matriz pode ser  $+1$  ou  $-1$ ; as linhas ou colunas ímpares, se possuírem qualquer entrada não nula, então as entradas não nulas devem começar com  $+1$  e terminar com  $-1$  na medida que preenchemos a linha ou coluna na direção crescente dos índices da matriz; as linhas ou colunas pares, se elas possuem qualquer entrada não nula, então as entradas não nulas devem começar com  $-1$  e terminar com  $+1$ . Isto deve ser contrastado com o caso das matrizes de sinais alternadas usual, em que as entradas não nulas devem sempre começar com  $+1$  e também terminar com  $+1$ [91].

### 4.3.6 Fusão das condições de contorno ferroelétrico e Néel

Uma vez estabelecido que as condições de contorno Néel é maximal, podemos tentar utilizar a estratégia de fusão de condições de contorno para mostrar que a entropia do modelo de seis-vértices pode variar ao longo de todo intervalo  $S_{FE} \leq S \leq S_{PBC}$ . Para isto, nós escolhemos o canto superior esquerdo com as condições de contorno do tipo Néel, enquanto o canto inferior direito é do tipo ferroelétrico, Figura 4.8.

Levando em conta os graus de liberdade internos congelados, observa-se que a função de partição da rede toma a forma de um “L” ao invés da rede retangular. Este tipo de função de partição já foi investigada na literatura[92], mas com configurações diferentes no contorno.

Por construção, nós temos  $S^{NE-FE} = S^{FE} = 0$  para  $n = 0$ , e  $S^{NE-FE} = S^{NE} = S^{PBC}$  para  $n = N$ , o que permanece verdadeiro no limite termodinâmico. Argumentamos, agora, que se incrementarmos  $n$  de  $n_0$  para  $n_0 + 1$ , existe apenas uma pequena variação na entropia, tanto menor quanto maior o tamanho da rede. Para isto, nós apresentamos a entropia com  $N = 20$  fixo e  $n$  variando de 0 a  $N$ , Figura 4.9.

Com  $N$  da ordem de dezenas, já podemos ver a continuidade aparecendo. A maior diferença de valores consecutivos de entropia é menor que 0.03 para  $N = 20$ . É razoável admitir que  $S_{n+1}^{NE-FE} - S_n^{NE-FE} = O(\frac{1}{N})$ . Para dar suporte a esta afirmação, nós também

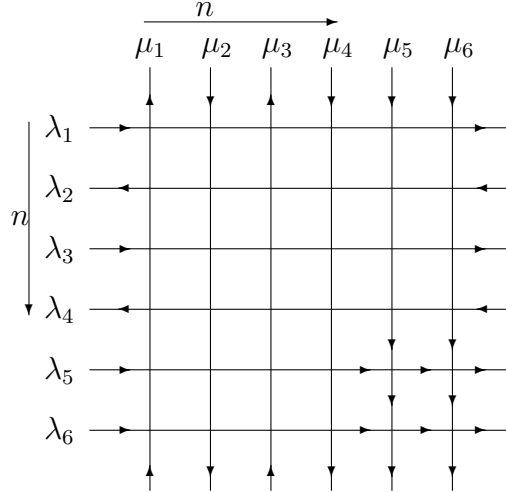


Figura 4.8: Função de partição  $Z_N^{NE-FE}$  para  $N = 6$  e  $n = 4$  na qual as condições de contorno é dada por uma fusão das condições do tipo Néel e ferroelétrico. O número  $n$  define a tamanho linear ocupado pela parte Néel.

mostramos a diferença de entropia  $S_{n+1}^{NE-FE} - S_n^{NE-FE}$  com  $n = \lfloor \frac{N}{2} \rfloor$  e  $N$  variando de 2 a 20, Figura 4.10. Em outras palavras, nós fixamos a proporção e variamos o tamanho linear da rede. Como podemos ver, esta diferença decai suficientemente rápido à medida que aumentamos o tamanho linear  $N$ .

Esperamos que estas conjecturas fortemente evidenciadas possam encontrar provas rigorosas em um futuro próximo.

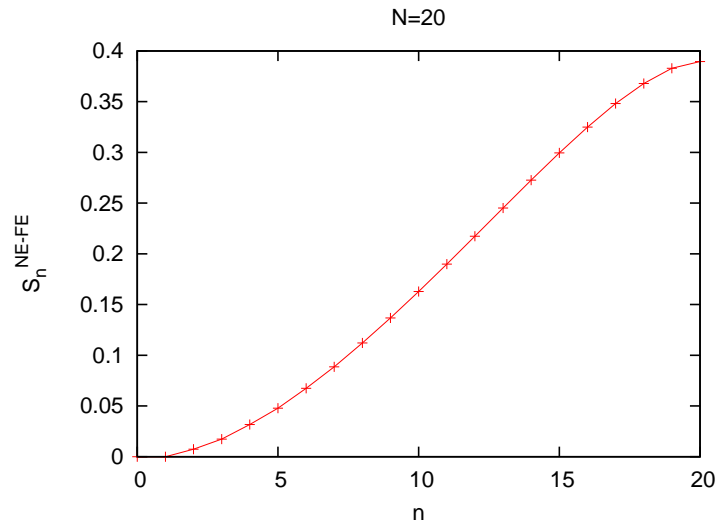


Figura 4.9: Entropia “finita” da fusão Néel-Ferroelétrica vs. o número  $n$  que define a proporção das duas condições de contorno. O tamanho linear é fixo em  $N = 20$ . Note a variação gradual dos valores de entropia.

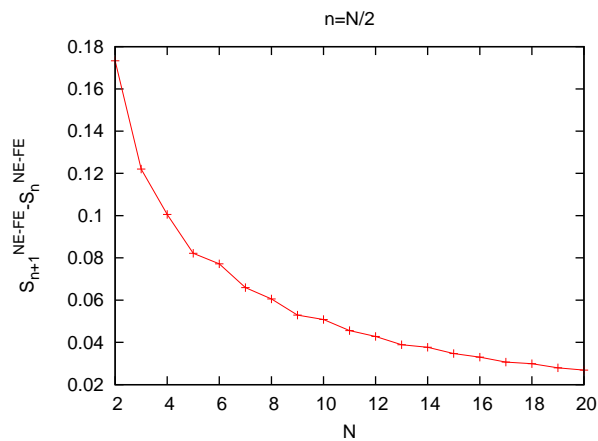


Figura 4.10: Diferença de entropias “finitas” da fusão Néel-ferroelétrica vs. comprimento linear  $N$ . Os números de proporção são  $n_{<} = \lfloor \frac{N}{2} \rfloor$  e  $n_{>} = n_{<} + 1$ .

# Capítulo 5

## Conclusão

Nesta tese nós conseguimos estender a formulação de um número finito de equações integrais não-lineares para uma generalização de multi-cadeias do modelo t-J super-simétrico e para um modelo de férmions itinerantes invariante pela super-álgebra  $osp(1|2)$ . Além disso, conseguimos estudar o modelo de seis-vértices simétrico sob uma gama de condições de contorno, concluindo pela existência de uma variedade destas que fornecem propriedades intensivas diferentes do caso periódico.

No que toca a parte das equações integrais, pudemos acessar pelo método da matriz de transferência quântica um diagrama de fases bastante rico relativo à generalização de multi-cadeias do modelo t-J[47]. Mostramos que as combinações isolante, metal/ferromagnético, antiferromagnético/comensurável, incomensurável, segundo a nossa classificação na tabela 2.1 podem ser corroboradas via análise das funções auxiliares.

O que marca uma transição são as singularidades de van-Hove quando da passagem de nenhum poço (densidade nula/isolante/ferromagnético) a um poço (metal comensurável/antiferromagnético comensurável) a dois poços (metal incomensurável/antiferromagnético incomensurável). Em particular, nós determinamos exatamente as linhas de transição envolvendo fases ferromagneticamente ordenadas, pois que do próprio ansatz de Bethe não existe interação das ondas de carga/buraco (onda de densidade) neste caso. Para este conjunto de setores, o modelo é solúvel em termos de férmions livres, o que possibilita o cálculo das funções de correlação, verificando toda a influência da quebra espontânea de paridade ao gerar dois períodos de oscilação e, por consequência, a incomensurabilidade.

Um dos principais interesses neste tipo de modelo se deve à conjectura de Anderson[93,

94] na descrição da supercondutividade de altas-temperaturas. Todavia, faz-se necessário uma rede bidimensional para esta finalidade, o que hoje ainda é incipiente no contexto de modelos exatamente solúveis e/ou integráveis[95]. A cadeia (2.1.6) pode ser vista como bicadeia e por conseguinte um início de interpolação entre uma e duas dimensões. Contudo, é bem óbvio que nos nossos modelos (2.1.4), a fim de que as interações permaneçam locais, devemos ter  $\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{M}{L} = 0$ , pelo que continuam sendo unidimensionais. Por consequência, todas as transições de fase são essencialmente quânticas, isto é, ocorrem a  $T = 0$ , deixando as possíveis aplicações por conta dos recentes avanços em sistemas de baixa dimensionalidade[96]. Esperamos que nossos resultados possam encontrar alguma serventia na explicação de experimentos como estes.

O segundo progresso que fizemos no contexto das equações integrais não-lineares foi o de prover as funções auxiliares para uma cadeia integrável invariante pela representação fundamental da super-álgebra  $osp(1|2)$ [48]. Fizemos isto tanto com o propósito de calcular correções de tamanho finito, como de obter as propriedades termodinâmicas.

A partir da solução numérica das equações integrais, pudemos evidenciar o comportamento conforme frente ambas as correções, temperatura e tamanho finitos, e a existência de correções logarítmicas. A correção mais relevante, aquela associada à carga central, foi obtida analiticamente via truque do di-log, corroborando nossos resultados numéricos e também aqueles encontrados na literatura[82]. Diferentemente do caso  $su(2)$ , as cargas centrais obtidas por correção de tamanho finito,  $c$ , e correção de temperatura finita,  $c_{eff}$ , possuem valores distintos embora relacionados pela equação (3.2.31).

Uma particularidade do modelo em questão é possuir auto-valores reais, embora o Hamiltoniano não seja hermitiano. Em outras palavras, a teoria de campos subjacente é não unitária. Tem sido justificadas possíveis aplicações deste tipo de teoria no contexto de polímeros e efeito Hall quântico[97, 98, 99, 100, 82].

O nosso progresso no caso particular do  $osp(1|2)$  poderá abrir espaço para uma investigação mais consistente de outras cadeias invariantes pelas super-álgebras  $osp(n|2m)$ . Devemos dizer que na busca das funções auxiliares nós definimos uma matriz de transferência que não aparece na hierarquia de fusão do modelo[76]. Este ponto merece maior investigação, pois que pode significar a existência de outra representação até então ignorada.

Para além destes resultados concretos, nós também trabalhamos na formulação de equações integrais não-lineares para os modelos  $su(l)$  invariantes com o objetivo de obter a sistematização do método. Identificamos no fluxo de Bäcklund um conjunto de relações funcionais adequados para a obtenção das funções auxiliares.

Vimos que, enquanto existe concordância de funções auxiliares da derivação original e daquelas advindas do fluxo de Bäcklund para o  $su(2)$ , no caso  $su(3)$  o mesmo não ocorre. Além de demonstrarmos serem distintos os conjuntos do  $su(3)$ , obtivemos dois sistemas de equações integrais não-lineares.

Dos dois conjuntos de equações integrais que formulamos, o primeiro embora correto e generalizável para o caso  $su(l)$ , não é estável, pois que necessita um chute inicial extremamente acurado para obter a solução correta. Como discorremos no corpo principal do texto, isto se deve ao fato de que apenas um conjunto de equações de Bethe estar contemplado no uso das hipóteses de analiticidade.

O segundo conjunto, embora correto e estável, não é generalizável para o caso  $su(l)$ . Todavia, constitui interessante observação podermos formular equações integrais não-lineares em número menor do que havia sido previamente obtido, passando de seis equações integrais para quatro.

Em suma, a formulação sistemática das equações integrais está em aberto e permanece como proposta de trabalho futuro.

Na outra frente de nossas pesquisas, nós conjecturamos a “invariância” das propriedades intensivas do modelo de seis-vértices simétrico quando da combinação mista de condições periódicas e anti-periódicas de contorno. Mostramos que, forçosamente, as condições periódicas de contorno fornecem as mesmas propriedades intensivas das condições livres de contorno.

Olhamos também para as condições fixas de contorno, demonstrando existir uma infinidade destas que resultam em entropia residual distinta do caso periódico. Temos além dos descendentes do domain-wall e das condições de contorno tipo ferroelétrico, a fusão entre domain-wall e ferroelétrico, permitindo a obtenção de qualquer valor de entropia no intervalo  $[0, S_{DW}]$ .

Com argumentos advindos do teorema do confronto, mostramos existir um contorno fixo maximal cuja entropia deveria equivaler ao caso periódico. Nossas investigações

numéricas mostraram serem estas as condições de contorno do tipo Néel, cuja extrapolação numérica do número de configurações parece corroborar a proposta.

Neste tipo de condições de contorno a integrabilidade parece não ajudar no cálculo do número de configurações, motivo pelo qual não conseguimos estabelecer uma fórmula fechada. Todavia, assumindo que este seja, de fato, o contorno maximal, conjecturamos que a partir da fusão ferroelétrico-Néel podemos obter todos os valores de entropia no intervalo  $[0, S_{PBC}]$ . Basicamente, o argumento utilizado para isso foi uma espécie de continuidade do valor da entropia sobre a proporção  $0 \leq \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n(N)}{N} \leq 1$ .

Das nossas investigações numéricas, está mais que evidente que o contorno domain-wall, o ferroelétrico e outras condições fixas de contorno não constituem exceção, e atenção deve ser destinada às condições de contorno de certos modelos estatísticos[49, 50]. Além disso, todas as condições fixas de contorno no modelo de seis-vértices simétrico correspondem à enumeração de algum tipo de matriz de sinais alternados generalizada[90, 49, 50], de onde ambas as áreas de pesquisa podem tirar proveito.

Em todos os problemas tratados neste trabalho, mesmo no mais simples e mais bem conhecido como o modelo de seis-vértices, estamos longe de exaurir todo conhecimento que as técnicas da integrabilidade permitem. Muitas são as questões ainda remanescentes, como a dependência do diagrama de fases com as condições de contorno, o cálculo das correlações interpolando curtos e longos comprimentos de onda, a sistematização do conjunto finito de equações integrais que permitam obter propriedades físicas de modo eficiente, propriedades de transporte fora do equilíbrio. E para além destas, teremos ainda a classificação das soluções da equação de Yang-Baxter, formulação sistemática do ansatz de Bethe, as possíveis generalizações da Yang-Baxter para sistemas de maior dimensionalidade, entre outras.

Sendo assim, são inúmeras as possibilidades de prosseguimento nesta área da Física-Matemática.



# Apêndice A

## Super-álgebra de Lie

Todos os modelos estudados neste trabalho possuem invariância por super-álgebra de Lie. Neste apêndice, faremos uma revisão breve e não rigorosa destas álgebras.

Uma super-álgebra é um espaço vetorial  $V$  com graduação  $Z_2$  em que definimos uma operação produto, digamos  $\cdot : V \times V \rightarrow V$ , tal que para todo  $a, b, c \in V$  e  $\lambda \in \mathbb{C}$ , temos

$$(a + \lambda b) \cdot c = a \cdot c + \lambda b \cdot c \quad (\text{A.1})$$

$$a \cdot b = c \Rightarrow p(c) = p(a) + p(b) \pmod{2}, \quad (\text{A.2})$$

na última equação se  $a$  e  $b$  são elementos homogêneos da álgebra, então  $c$  é um elemento homogêneo com a referida paridade. Além disso, se a super-álgebra for associativa, então

$$a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c. \quad (\text{A.3})$$

Uma super-álgebra de Lie é uma super-álgebra com produto  $[, ]$  não associativo, satisfazendo as seguintes propriedades:

$$[a, b] = -(-1)^{p(a)p(b)}[b, a], \quad (\text{A.4})$$

$$[a, [b, c]] = [[a, b], c] + (-1)^{p(a)p(b)}[b, [a, c]], \quad (\text{A.5})$$

sendo que em (A.4) e (A.5) consideramos  $a$ ,  $b$  e  $c$  elementos homogêneos do espaço vetorial  $V$ . Notemos que a partir de uma super-álgebra associativa podemos construir uma super-álgebra de Lie se definirmos o produto não associativo  $[, ]$  em termos do produto associativo  $\cdot$  da seguinte forma

$$[a, b] = a \cdot b - (-1)^{p(a)p(b)}b \cdot a. \quad (\text{A.6})$$

Agora consideremos a super-álgebra associativa das super-matrizes  $M(l/r; \mathbb{C})$ . Ou seja, estamos assumindo que estas matrizes representam operadores lineares atuando em um espaço vetorial de dimensão  $l + r$  no qual fixamos uma base homogênea em que os  $l$  primeiros elementos da base são pares e os  $r$  elementos posteriores são ímpares. O produto usual de matrizes é associativo. Para que este conjunto constitua uma super-álgebra associativa, devemos eleger uma base de elementos homogêneos. Escrevendo cada matriz na forma

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \quad (\text{A.7})$$

sendo  $A$  de dimensão  $l \times l$ ,  $B$  de dimensão  $l \times r$ ,  $C$  de dimensão  $r \times l$  e  $D$  de dimensão  $r \times r$ , definimos as matrizes pares na forma

$$\begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

e as matrizes ímpares como

$$\begin{bmatrix} 0 & B \\ C & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Com esta definição podemos verificar que a condição (A.2) é satisfeita, de modo que  $M(l/r; \mathbb{C})$  é uma super-álgebra associativa. A super-álgebra de Lie correspondente é o que denotamos por  $gl(l/r; \mathbb{C})$ . Note que a definição de super-matrizes fornecida neste apêndice concorda com (1.3.6), considerando que os elementos são números complexos e, portanto, de paridade nula.

Um homomorfismo  $\phi : L \rightarrow L'$  de super-álgebras de Lie é um mapeamento de  $L$  em  $L'$  que satisfaz as seguintes propriedades:

$$\phi(a + \lambda b) = \phi(a) + \lambda \phi(b), \quad (\text{A.10})$$

$$p(\phi(a)) = p(a) \quad a \text{ homogêneo}, \quad (\text{A.11})$$

$$\phi([a, b]_L) = [\phi(a), \phi(b)]_{L'}. \quad (\text{A.12})$$

Além disso, definimos um ideal de uma super-álgebra de Lie como sendo um subespaço  $v$  de  $V$  tal que

$$[v, V] \in v, \quad (\text{A.13})$$

em particular  $v$  é uma sub-álgebra. Com estas definições, podemos ver que o núcleo,  $\ker\phi$ , de um homomorfismo  $\phi : L \rightarrow L'$  é um ideal de  $L$ , pois seja  $a \in L$  tal que  $\phi(a) = 0$  e  $b$  um elemento qualquer de  $L$ , temos

$$\phi([a, b]) = [\phi(a), \phi(b)] = [0, \phi(b)] = 0, \quad (\text{A.14})$$

além disso, a imagem de  $\phi$ ,  $\text{im}\phi$ , é isomorfa a álgebra  $L/\ker\phi$ . Isto é, deletamos de  $L$  os elementos que formam  $\ker\phi$  e também desprezamos os termos de  $\ker\phi$  produzidos no cálculo dos colchetes dos elementos remanescentes.

Definimos o super-traço das matrizes da forma (A.8) por

$$\text{str}M = \text{tr}A - \text{tr}D. \quad (\text{A.15})$$

Com esta definição, o super-traço é um homomorfismo da super-álgebra  $gl(l/r; \mathbb{C})$  na super-álgebra abeliana  $gl(1/0; \mathbb{C})$ , do que resulta, em particular, que o conjunto de matrizes com super-traço nulo é também uma super-álgebra de Lie. Logo

$$sl(l/r; \mathbb{C}) = [M \in gl(l/r; \mathbb{C}) | \text{str}M = 0] \quad (\text{A.16})$$

também é uma super-álgebra de Lie com o mesmo produto de  $gl(l/r; \mathbb{C})$ . Seja  $L_0(L_1)$  o conjunto de todos os elementos pares(ímpares) de  $L$ , temos que  $L_0$  é gerado por matrizes da seguinte forma

$$M = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{com } \text{tr}A = 0, \quad (\text{A.17})$$

$$M = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}, \quad \text{com } \text{tr}D = 0, \quad (\text{A.18})$$

$$M = \begin{bmatrix} \frac{\text{Id}}{l} & 0 \\ 0 & \frac{\text{Id}}{r} \end{bmatrix}, \quad (\text{A.19})$$

de modo que temos  $l^2 + r^2 - 1$  geradores pares. Não existe restrição nenhuma para os geradores ímpares, de modo que as matrizes são da forma (A.9), o que fornece  $2lr$  geradores.

Exemplo  $sl(2/1; \mathbb{C})$

Temos 4 geradores pares:

$$B_1 = \left[ \begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad B_2 = \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad B_3 = \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad B_4 = \left[ \begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array} \right], \quad (\text{A.20})$$

e quatro geradores ímpares

$$F_1 = \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad F_2 = \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad F_3 = \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad F_4 = \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array} \right]. \quad (\text{A.21})$$

A partir da combinação linear destas matrizes, podemos escolher uma base Hermitiana:

$$\begin{aligned} & \left[ \begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad \left[ \begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array} \right], \\ & \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ \hline -i & 0 & 0 \end{array} \right] \quad \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 1 & 0 \end{array} \right] \quad \left[ \begin{array}{cc|c} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ \hline 0 & i & 0 \end{array} \right], \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

de modo que se considerarmos o espaço linear gerado por estes com coeficientes em  $\mathbb{R}$ , teremos a super-álgebra  $su(2|1)$ . Todavia, para os nossos propósitos, esta distinção é irrelevante e continuaremos a trabalhar com o  $sl(l/r; \mathbb{C})$ . De posse de uma representação da álgebra, podemos calcular as constantes de estrutura:

$$[a_i, a_j] = \sum_k C_{i,j}^k a_k. \quad (\text{A.23})$$

Os parênteses não nulos da álgebra  $sl(2/1; \mathbb{C})$  são dados por

$$\begin{aligned} [B_1, B_2] &= 2B_2, \quad [B_1, B_3] = -2B_3, \quad [B_2, B_3] = B_1, \quad [F_1, F_2] = \frac{1}{2}B_1 + B_4, \\ [F_1, F_4] &= B_2, \quad [F_2, F_3] = B_3, \quad [F_3, F_4] = -\frac{B_1}{2} + B_4, \quad [B_1, F_i] = -(-1)^i F_i, \\ [B_2, F_2] &= -F_4, \quad [B_2, F_3] = F_1, \quad [B_3, F_1] = F_3, \quad [B_3, F_4] = -F_2, \quad [B_4, F_i] = (-1)^i \frac{F_i}{2}, \end{aligned}$$

de onde se pode obter as constantes de estrutura.

Agora, consideremos a supertransposição de matrizes em  $M(l/r; \mathbb{C})$  da seguinte forma:

$$M^{st} = \begin{bmatrix} A^t & (-1)^{p(M)} C^t \\ -(-1)^{p(M)} B^t & D^t \end{bmatrix}, \quad (\text{A.24})$$

podemos mostrar que a super-transposição satisfaz as seguintes propriedades

$$\text{str}(M^{st}) = \text{str}M, \quad (\text{A.25})$$

$$(((M^{st})^{st})^{st})^{st} = M, \quad (\text{A.26})$$

$$(MN)^{st} = (-1)^{p(M)p(N)} N^{st} M^{st}. \quad (\text{A.27})$$

Com esta definição podemos caracterizar melhor outra sub-álgebra de  $gl(l/2r; \mathbb{C})$ .

Dado uma matriz  $K$  da forma

$$K = \begin{bmatrix} G & 0 \\ 0 & J \end{bmatrix}, \quad G = \text{Id}_l, \quad J = \begin{bmatrix} 0 & \text{Id}_r \\ \text{Id}_r & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.28})$$

o conjunto  $\left[ M \in gl(l, r; \mathbb{C}) \mid M^{st}K + (-1)^{p(M)} KM = 0 \right]$  constitui a super-álgebra  $osp(l, 2r; \mathbb{C})$ .

Para verificar, basta utilizar as propriedades da super-transposição para mostrar que se  $M$  e  $N$  pertencem a  $osp(l, 2r; \mathbb{C})$ , então  $[M, N]$  também pertence.

Os geradores pares desta álgebra são tais que  $A^t + A = 0$ , isto é  $\frac{l(l-1)}{2}$  geradores do tipo  $so(l)$ , e  $D^t J + J D = 0$ , ou seja  $r(2r + 1)$  geradores do tipo  $sp(2r)$ . Os geradores ímpares são tais que  $B^t = J C$ , o que fornece um total de  $2lr$  geradores.

Exemplo:  $osp(1, 2; \mathbb{C})$

Não temos geradores pares do tipo  $so(l)$ , mas temos três geradores pares do tipo  $sp(2)$ :

$$B_1 = \left[ \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{array} \right] \quad B_2 = \left[ \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad B_3 = \left[ \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{array} \right] \quad (\text{A.29})$$

Além disso temos dois geradores ímpar

$$F_1 = \left[ \begin{array}{c|cc} 0 & 0 & 1 \\ \hline -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad F_2 = \left[ \begin{array}{c|cc} 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{array} \right] \quad (\text{A.30})$$

De modo que os parênteses não nulos desta álgebra são

$$[B_1, B_2] = 2B_2, \quad [B_1, B_3] = -2B_3, \quad [B_2, B_3] = B_1,$$

$$[F_1, F_1] = -2B_2, \quad [F_1, F_2] = -B_1, \quad [F_2, F_2] = 2B_3,$$

$$[B_1, F_1] = F_1, \quad [B_1, F_2] = -F_2, \quad [B_2, F_2] = -F_1, \quad [B_3, F_1] = -F_2.$$

Chamamos a atenção do leitor para as diferenças em relação ao corpo central do texto devido à diferente escolha da graduação do espaço.

Finalmente, em correspondência com equação (1.2.29), se  $\mathcal{L}$  é uma solução invariante pela super-álgebra de Lie, então para cada gerador  $g$ , temos

$$\left[ R(\lambda), \Gamma(g) \overset{s}{\otimes} \text{Id} + \text{Id} \overset{s}{\otimes} \Gamma(g) \right], \quad (\text{A.31})$$

sendo  $\Gamma(g)$  uma representação da álgebra.

# Apêndice B

## Diferença qualitativa das funções auxiliares para as diferentes fases

Neste apêndice nós gostaríamos de apresentar o aspecto qualitativo das funções auxiliares  $\frac{\ln b(x)}{\beta}$  e  $\frac{\ln c(x)}{\beta}$  para cada fase.

Resolvendo a equação (2.1.20) para dados  $T$ ,  $H$  e  $n(\mu, T, H)$  fornece as funções auxiliares  $\frac{\ln \mathfrak{b}(x)}{\beta}$ ,  $\frac{\ln \bar{\mathfrak{b}}(x)}{\beta}$  e  $\frac{\ln \mathfrak{c}(x)}{\beta}$ . No limite  $\beta \rightarrow \infty$ , onde ocorrem as transições de fase quântica, estas funções devem mostrar comportamentos qualitativamente diferentes para fases diferentes, refletindo a falha de analiticidade das propriedades termodinâmicas sob as linhas críticas. Portanto, as funções auxiliares podem ser usadas para corroborar nossa classificação das fases, como na tabela 2.1.

A apresentação das funções auxiliares pode ser simplificada notando que, para  $H \geq 0$ , podemos omitir  $\bar{\mathfrak{b}}(x)$ . Isto porque as funções  $\mathfrak{b}(x)$  e  $\bar{\mathfrak{b}}(x)$  são complexo conjugada uma da outra, enquanto para  $H > 0$ ,  $\bar{\mathfrak{b}}(x)$  se anula no limite  $\beta \rightarrow \infty$ . Além disso, as partes imaginárias de  $\frac{\ln \mathfrak{b}(x)}{\beta}$  e  $\frac{\ln \mathfrak{c}(x)}{\beta}$  se revelaram bem pequenas. Portanto, nós vamos nos restringir a estudar a parte real das funções  $\frac{\ln \mathfrak{b}(x)}{\beta}$  e  $\frac{\ln \mathfrak{c}(x)}{\beta}$ .

Nas Figuras de B.1 a B.8 nós apresentamos as funções auxiliares para pontos típicos de cada fase nas Figuras 2.4 e 2.5. Para melhor observar as mudanças qualitativas, nós realçamos o eixo  $y = 0$  (o eixo vertical  $y$  representa as funções auxiliares  $\frac{\ln b}{\beta}$  e  $\frac{\ln c}{\beta}$ ). Esta linha separa os “níveis ocupados” daqueles não ocupados. Aqui devemos olhar para  $\frac{\ln \mathfrak{b}(x)}{\beta}$  ( $\frac{\ln \mathfrak{c}(x)}{\beta}$ ) como representando os possíveis cenários para os mares de Dirac (invertidos). Por exemplo, a transição da fase I para a fase II no diagrama 2.4 a) é assinalado por uma

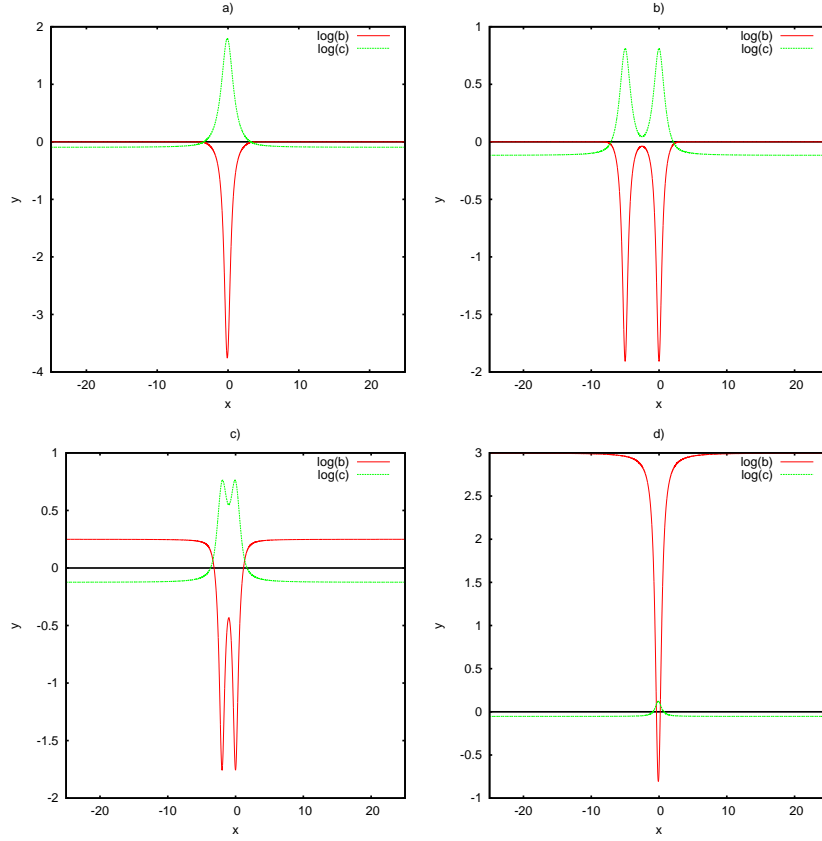


Figura B.1: Fase I: Fase metálica comensurável antiferromagnética comensurável:  $\frac{\ln b}{\beta}$  possui um mar de Dirac e  $\frac{\ln c}{\beta}$  possui um mar de Dirac invertido. a)  $H = 0$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n = 0.2$ , b)  $H = 0$ ,  $\theta = 5$ ,  $n = 0.2$ , c)  $H = 0.25$ ,  $\theta = 2$ ,  $n = 0.3$  d)  $H = 3$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n = 0.8$ .

mudança de um mar de Dirac invertido (Figura B.1) para dois mares de Dirac invertidos (Figura B.2) na função  $\frac{\ln c(x)}{\beta}$  e, por conseguinte, aumentando o número de excitações sem gap. Este tipo de discussão já apareceu anteriormente em termos das chamadas “dressed energy functions” em uma outra generalização do modelo t-J[75]. Portanto, nós podemos identificar a transição de um ordenamento metálico comensurável para um ordenamento metálico incomensurável. Do mesmo modo, uma análise semelhante pode ser executada para cada linha de transição comparando o comportamento das funções auxiliares exibidas nas Figuras de B.1 a B.8, na medida que nos movemos de uma fase para outra.



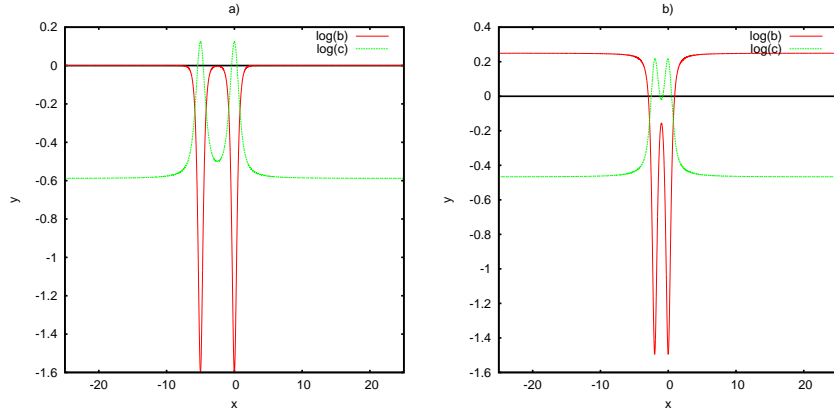


Figura B.2: Fase II: Fase metálica incomensurável antiferromagnética comensurável;  $\frac{\ln b}{\beta}$  possui um mar de Dirac e  $\frac{\ln c}{\beta}$  possui dois mares de Dirac invertidos. a)  $H = 0$ ,  $\theta = 5$ ,  $n = 0.8$ , b)  $H = 0.25$ ,  $\theta = 2$ ,  $n = 0.6$ .

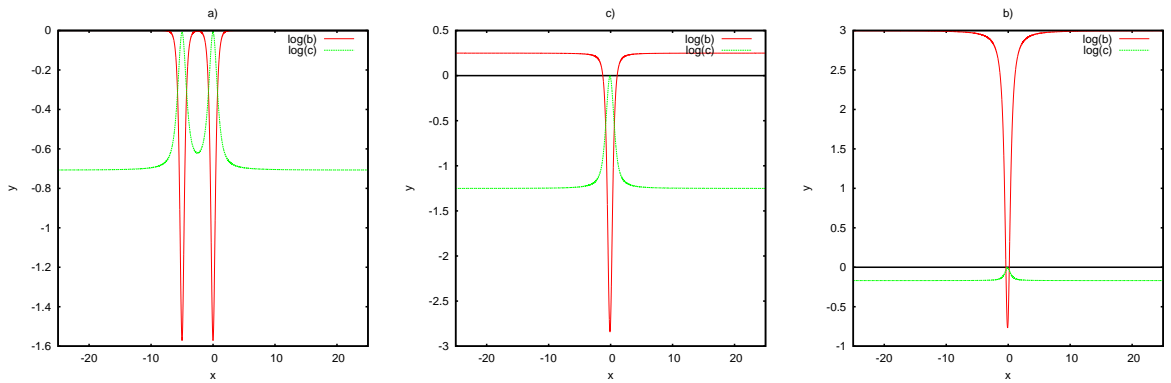


Figura B.3: Fase III: Fase isolante antiferromagnética comensurável;  $\frac{\ln b}{\beta}$  possui um mar de Dirac e  $\frac{\ln c}{\beta}$  apenas toca a linha  $y = 0$  por baixo. a)  $H = 0$ ,  $\theta = 5$ ,  $n \rightarrow 1$ , b)  $H = 3$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n \rightarrow 1$  c)  $H = 0.25$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n \rightarrow 1$ .

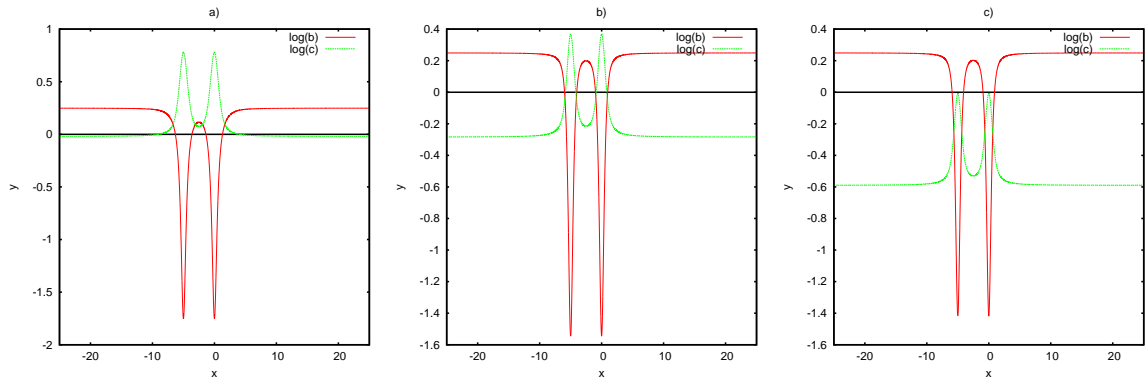


Figura B.4: a) Fase IV: Fase metálica comensurável antiferromagnética incomensurável;  $\frac{\ln b}{\beta}$  possui dois mares de Dirac e  $\frac{\ln c}{\beta}$  possui um mar de Dirac invertido;  $H = 0.25$ ,  $\theta = 5$ ,  $n = 0.25$ . b) Fase V: Fase metálica incomensurável antiferromagnética incomensurável;  $\frac{\ln b}{\beta}$  possui dois mares de Dirac e  $\frac{\ln c}{\beta}$  possui dois mares de Dirac invertidos;  $H = 0.25$ ,  $\theta = 5$ ,  $n = 0.6$ . c) Fase VI: Fase isolante antiferromagnética incomensurável:  $\frac{\ln b}{\beta}$  possui dois mares de Dirac invertidos e  $\frac{\ln c}{\beta}$  apenas toca a linha  $y = 0$  por baixo;  $H = 0.25$ ,  $\theta = 5$ ,  $n \rightarrow 1$ .

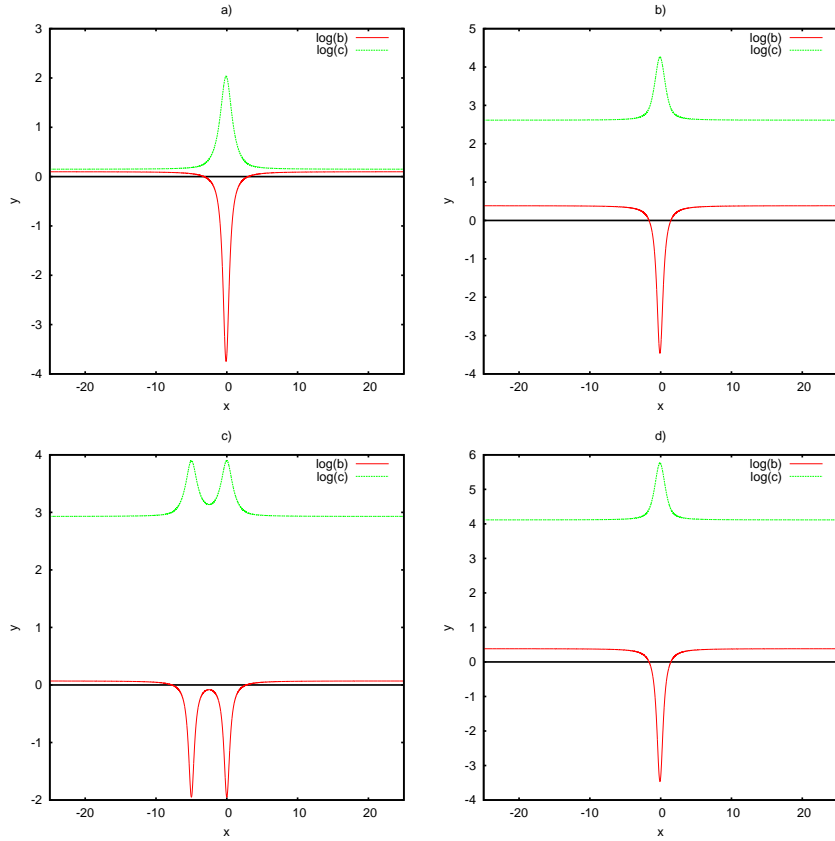


Figura B.5: Fase VII: Fase metálica comensurável ferromagnética:  $\frac{\ln b}{\beta}$  possui um mar de Dirac e  $\frac{\ln c}{\beta}$  está completamente acima da linha  $y = 0$ ; a)  $H = 0.25$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n = 0.1$ , b)  $H = 3$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n = 0.2$ , c)  $H = 3$ ,  $\theta = 5$ ,  $n = 0.075$  d)  $H = 4.5$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n = 0.2$ .

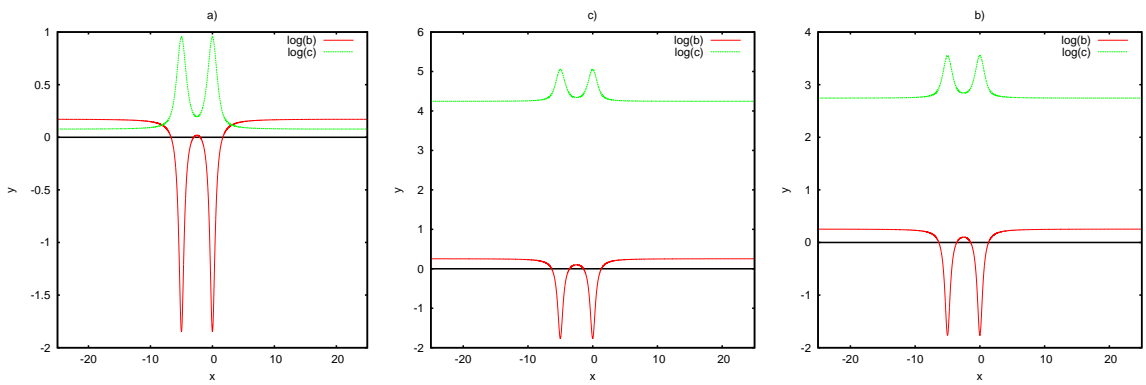


Figura B.6: Fase VIII: Fase metálica incomensurável ferromagnética:  $\frac{\ln b}{\beta}$  possui dois mares de Dirac e  $\frac{\ln c}{\beta}$  está completamente acima da linha  $y = 0$ . a)  $H = 0.25$ ,  $\theta = 5$ ,  $n = 0.25$ , b)  $H = 3$ ,  $\theta = 5$ ,  $n = 0.2$ , c)  $H = 4.5$ ,  $\theta = 5$ ,  $n = 0.2$ .

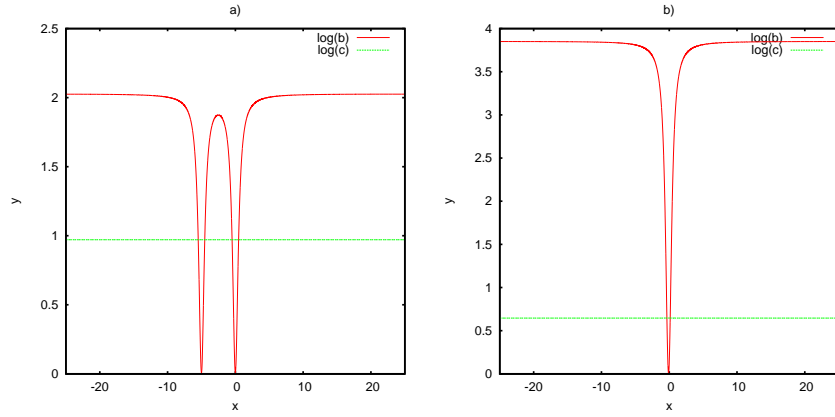


Figura B.7: Fase IX: Fase isolante ferromagnética:  $\frac{\ln b}{\beta}$  apenas toca a linha  $y = 0$  por cima e  $\frac{\ln c}{\beta}$  está completamente abaixo da linha  $y = 0$ ; a)  $H = 3$ ,  $\theta = 5$ ,  $n \rightarrow 1$ , b)  $H = 4.5$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n \rightarrow 1$ .

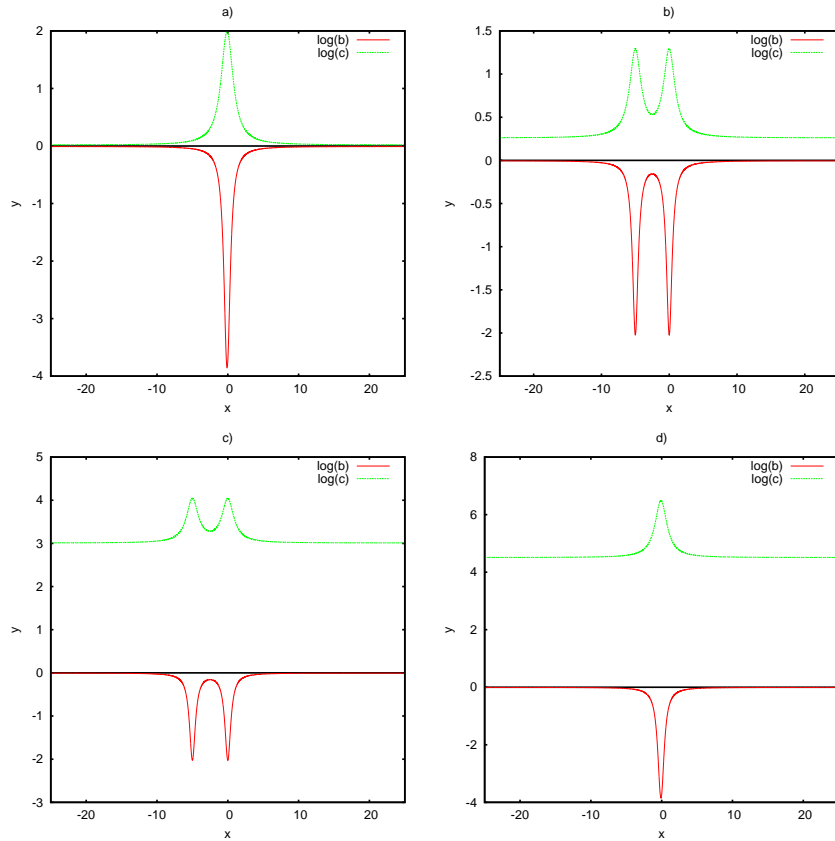


Figura B.8: Fase X: Fase de densidade nula  $n = 0$ ;  $\frac{\ln b}{\beta}$  toca a linha  $y = 0$  por baixo quando  $x \rightarrow \pm\infty$  enquanto  $\frac{\ln c}{\beta}$  está completamente acima: a)  $H = 0$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n \rightarrow 0$ , b)  $H = 0.25$ ,  $\theta = 5$ ,  $n \rightarrow 0$ , c)  $H = 3$ ,  $\theta = 5$ ,  $n \rightarrow 0$  d)  $H = 4.5$ ,  $\theta = 0.2$ ,  $n \rightarrow 0$ .

# Apêndice C

## Formulação alternativa das equações integrais para correções de tamanho finito no $osp(1|2)$

Neste apêndice nós derivamos o conjunto “padrão” de equações integrais não-lineares[42, 45] para correções de tamanho finito para o modelo  $osp(1|2)$ . Nós evitamos tal formulação no corpo central do texto porque ela nos leva a um tratamento não uniforme quando consideramos a variação do parâmetro de torção  $\eta$ . Para  $0 \leq \eta < \frac{\pi}{3}$  temos o regime onde o maior auto-valor  $\tilde{\Lambda}(x)$  possui dois zeros dentro da faixa de analiticidade, isto é, uma faixa que contém pelo menos a região  $|\Im z| < 1$  do plano complexo. Para  $\frac{\pi}{3} < \eta \leq \pi$  o maior auto-valor  $\tilde{\Lambda}(x)$  não possui nenhum zero dentro da faixa de analiticidade, de modo que este regime deve ser tratado de forma bem semelhante ao caso da matriz de transferência quântica. Devemos notar, todavia, que estas diferenças qualitativa não se refletem no auto-valor  $S(x)$  associado ao maior auto-valor. Nós definimos as funções auxiliares

$$\begin{aligned} \mathfrak{b}(x) &= \frac{\lambda_3(x + \frac{i}{4} - i\epsilon)}{\lambda_1(x + \frac{i}{4} - i\epsilon) + \lambda_2(x + \frac{i}{4} - i\epsilon)}, & \mathfrak{B}(x) &= 1 + \mathfrak{b}(x), \\ \bar{\mathfrak{b}}(x) &= \frac{\lambda_1(x - \frac{i}{4} + i\epsilon)}{\lambda_2(x - \frac{i}{4} + i\epsilon) + \lambda_3(x - \frac{i}{4} + i\epsilon)}, & \bar{\mathfrak{B}}(x) &= 1 + \bar{\mathfrak{b}}(x), \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

sendo

$$\tilde{\Lambda}(x) = \lambda_1(x) + \lambda_2(x) + \lambda_3(x), \quad (\text{C.2})$$

e

$$\begin{aligned}
(-1)^L \lambda_1(x) &= -e^{-i\eta} \phi\left(x + \frac{i}{4}\right) \phi\left(x + \frac{3i}{4}\right) \frac{Q\left(x - \frac{5i}{4}\right)}{Q\left(x - \frac{i}{4}\right)}, \\
(-1)^L \lambda_2(x) &= \phi\left(x - \frac{3i}{4}\right) \phi\left(x + \frac{3i}{4}\right) \frac{Q\left(x - \frac{3i}{4}\right) Q\left(x + \frac{3i}{4}\right)}{Q\left(x - \frac{i}{4}\right) Q\left(x + \frac{i}{4}\right)}, \\
(-1)^L \lambda_3(x) &= -e^{i\eta} \phi\left(x - \frac{i}{4}\right) \phi\left(x - \frac{3i}{4}\right) \frac{Q\left(x + \frac{5i}{4}\right)}{Q\left(x + \frac{i}{4}\right)}. \tag{C.3}
\end{aligned}$$

Nas definições (C.1) e (C.3) o parâmetro  $\epsilon$  entra como um regularizador do modo a evitar singularidades devido às funções  $\phi$  quando calculadas as transformadas de Fourier das derivadas logarítmicas. Para proceder, nós precisamos de propriedades de fatorização, das quais podemos escrever as funções auxiliares numa forma produto. De fato, temos

$$\lambda_1(x) + \lambda_2(x) = (-1)^L e^{-i\frac{\eta}{2}} \frac{\phi\left(x + \frac{3i}{4}\right) S\left(x - \frac{i}{4}\right)}{Q\left(x + \frac{i}{4}\right)} = -(\overline{\lambda_2(\bar{x})} + \lambda_3(\bar{x})), \tag{C.4}$$

e portanto encontramos

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}(x) &= -e^{\frac{3\eta i}{2}} \frac{\phi(x - i\epsilon) \phi\left(x - \frac{i}{2} - i\epsilon\right) Q\left(x + \frac{3i}{2} - i\epsilon\right)}{\phi(x + i - i\epsilon) S(x - i\epsilon)}, \\
\bar{\mathbf{b}}(x) &= -e^{-\frac{3\eta i}{2}} \frac{\phi(x + i\epsilon) \phi\left(x + \frac{i}{2} + i\epsilon\right) Q\left(x - \frac{3i}{2} + i\epsilon\right)}{\phi(x - i + i\epsilon) S(x + i\epsilon)}, \\
\mathfrak{B}(x) &= (-1)^L e^{\frac{i\eta}{2}} \frac{Q\left(x + \frac{i}{2} - i\epsilon\right) \tilde{\Lambda}\left(x + \frac{i}{4} - i\epsilon\right)}{\phi(x + i - i\epsilon) S(x - i\epsilon)}, \\
\bar{\mathfrak{B}}(x) &= (-1)^L e^{-\frac{i\eta}{2}} \frac{Q\left(x - \frac{i}{2} + i\epsilon\right) \tilde{\Lambda}\left(x - \frac{i}{4} + i\epsilon\right)}{\phi(x - i + i\epsilon) S(x + i\epsilon)}. \tag{C.5}
\end{aligned}$$

Estas equações, por si só, não são fechadas. Aqui o sistema-Y (3.2.13) se faz necessário.

Notemos a seguinte relação quando  $\epsilon = 0$

$$y_c\left(x + \frac{i}{4}\right) y_c\left(x - \frac{i}{4}\right) = \frac{\mathbf{b}(x) \bar{\mathbf{b}}(x)}{\mathfrak{B}(x) \bar{\mathfrak{B}}(x)}, \tag{C.6}$$

que por meio de uma conjugação partícula-buraco em todas as funções se torna a expressão usual  $y\left(x + \frac{i}{4}\right) y\left(x - \frac{i}{4}\right) = \mathfrak{B}_c(x) \bar{\mathfrak{B}}_c(x)$ .

Agora nós devemos discriminar entre os dois regimes. Podemos aplicar o procedimento descrito no corpo principal do texto, sem modificação nenhuma para o caso  $\frac{\pi}{3} < \eta \leq \pi$ .

Encontramos o seguinte conjunto de equações integrais

$$\begin{bmatrix} \log \mathbf{b}(x) \\ \log \bar{\mathbf{b}}(x) \\ \log y_c(x) \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} F_1 & F_2 & F_3 \\ \bar{F}_2 & F_1 & \bar{F}_3 \\ \bar{F}_3 & F_3 & F_4 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} \log \mathfrak{B}(x) \\ \log \bar{\mathfrak{B}}(x) \\ \log Y_c(x) \end{bmatrix} + i \begin{bmatrix} L\mathcal{D}\left(x + \frac{i}{2}\right) - \pi + \eta \\ L\mathcal{D}\left(x - \frac{i}{2}\right) + \pi - \eta \\ L\left(\mathcal{D}\left(x + \frac{i}{4}\right) - \mathcal{D}\left(x - \frac{i}{4}\right)\right) \end{bmatrix}, \tag{C.7}$$

sendo que  $\mathcal{D}(x)$  denota o mesmo driving-term como no texto principal e o kernel é exatamente o mesmo que aquele para matriz de transferência quântica. A expressão do auto-valor se torna

$$\log \frac{\tilde{\Lambda}(x)}{\phi(x - \frac{3i}{4})\phi(x - \frac{i}{4})} = \mathcal{D}' * \left( \log \mathfrak{B}(x + \frac{i}{4}) + \log \bar{\mathfrak{B}}(x - \frac{i}{4}) + \log Y_c(x) \right) - iLE(x - \frac{3i}{4}) - \pi i \text{Mod}(L, 2). \quad (\text{C.8})$$

sendo  $E(x) = \int_{-\infty}^x e(v)dv$ , veja a equação (2.2.10).

Para  $0 \leq \eta < \frac{\pi}{3}$  nós não conseguimos obter equações integrais numericamente satisfatórias devido à aparição de zeros dentro da faixa de analiticidade. Para evitar este problema, nós escolhemos trabalhar com um conjunto menor de funções auxiliares com prejuízo de se obter a expressão para o auto-valor de forma mais implícita.

# Apêndice D

## Ansatz de Bethe para o maior auto-valor do setor $n = \frac{L}{2}$ no regime ferroelétrico

Para mostrar que o maior auto-valor dos diferentes setores de spin- $z$  produzem a mesma energia-livre no limite termodinâmico, nós analisamos a solução das equações do ansatz de Bethe (4.2.32). Podemos assumir, sem perda de generalidade,  $a > b + c$  na fase ferroelétrica. Uma possível parametrização para  $\Delta > 1$  é

$$\begin{aligned} a(\lambda) &= \varrho \sinh(\lambda + \gamma), \\ b(\lambda) &= \varrho \sinh(\lambda), \quad \Rightarrow \quad \Delta = \cosh(\gamma), \\ c(\lambda) &= \varrho \sinh(\gamma), \end{aligned} \tag{D.1}$$

sendo  $\varrho$  um fator de escala e  $\gamma$  o parâmetro de anisotropia.

Nós substituímos os pesos de Boltzmann nas equações de Bethe (4.2.32) e na respectiva expressão do auto-valor, onde também executamos as translações  $\lambda \rightarrow \lambda - \gamma/2$  e  $\lambda_i \rightarrow \lambda_i - \gamma/2$  por conveniência. Dados  $a, b, c$  na região  $a > b + c$ , sempre podemos encontrar os valores correspondentes de  $\gamma, \varrho, \lambda$ . Nós checamos a solução via ansatz de Bethe com a diagonalização exata no setor  $n = L/2$  para identificar a estrutura de raízes associada ao maior auto-valor neste setor. Fizemos isto para  $2 \leq L \leq 10$ . Listamos as raízes de Bethe na Tabela D.1, onde escolhemos  $a = 2.1, b = 0.7, c = 0.62$ . Esta escolha para os pesos de Boltzmann corresponde a  $\gamma \approx 0.93881$ . Ainda, a estrutura de raízes parece um  $n \leq \frac{L}{2}$



$L$	$\Lambda^{(0)}$	Bethe roots
2	3.3244	$\lambda_1 = 0. - 1.5708i$
4	7.15616	$\lambda_1 = 0.755792 - 1.5708i$ $\lambda_2 = -0.755792 + 1.5708i$
6	18.9897	$\lambda_1 = 1.24738 - 1.5708i$ $\lambda_2 = 0. - 1.5708i$ $\lambda_3 = -1.24738 - 1.5708i$
8	59.0169	$\lambda_1 = 1.67202 - 1.5708i$ $\lambda_2 = 0.513821 - 1.5708i$ $\lambda_3 = -0.513821 - 1.5708i$ $\lambda_4 = -1.67202 - 1.5708i$
10	214.268	$\lambda_1 = 2.11256 - 1.5708i$ $\lambda_2 = 0.998365 - 1.5708i$ $\lambda_3 = 0. - 1.5708i$ $\lambda_4 = -0.998365 - 1.5708i$ $\lambda_5 = -2.11256 - 1.5708i$

Tabela D.1: Raízes de Bethe para  $a = 2.1$ ,  $b = 0.7$ ,  $c = 0.62$ .

string centrada em  $-i\pi/2$  e distribuída ao longo de um eixo paralelo ao eixo real[27, 28].

De fato, a solução das equações de Bethe para  $L = 26$  possui desvios bem pequenos deste padrão  $L/2$ -string, veja Figura D.1.

Assumindo que a string exata é dada por

$$\lambda_j = -i\frac{\pi}{2} + \gamma \left( \frac{L/2 - 1}{2} - (j - 1) \right), \quad j = 1, \dots, L/2, \quad (\text{D.2})$$

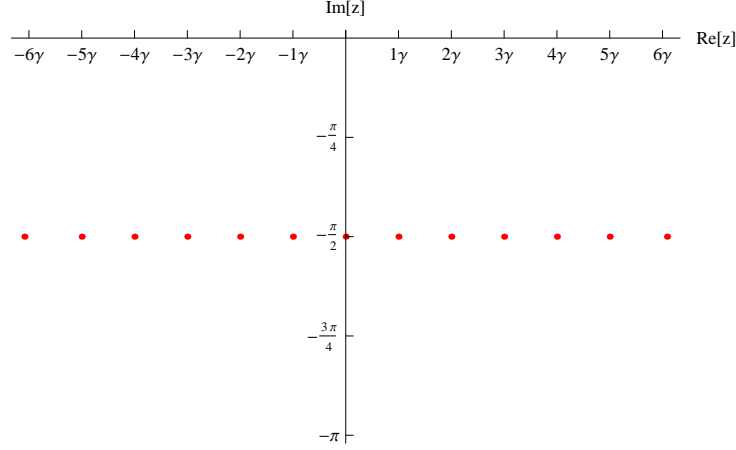


Figura D.1: Distribuição de raízes de Bethe para o maior auto-valor no setor  $L/2$  com  $L = 26$ . Existe um pequeno desvio do padrão  $L/2$ -string

Obtemos que uma aproximação razoável para  $\Lambda_{n=L/2}^{(0)}$  com  $L$  grande como segue

$$\begin{aligned} \frac{\Lambda_{\max, n=L/2}^{(0)}(\lambda)}{\varrho^L} &\approx \sinh^L(\lambda + \gamma/2) \prod_{q=-L/4+1/2}^{L/4-1/2} \frac{\cosh(\lambda + q\gamma - \gamma)}{\cosh(\lambda + q\gamma)} \\ &+ \sinh^L(\lambda - \gamma/2) \prod_{q=-L/4+1/2}^{L/4-1/2} \frac{\cosh(\lambda + q\gamma + \gamma)}{\cosh(\lambda + q\gamma)}, \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

$$\begin{aligned} &= \sinh^L(\lambda + \gamma/2) \frac{\cosh(\gamma(L/4 - 1/2)\gamma - \lambda)}{\cosh(\gamma(L/4 - 1/2) + \lambda)} \\ &+ \sinh^L(\lambda - \gamma/2) \frac{\cosh(\gamma(L/4 - 1/2) + \gamma + \lambda)}{\cosh(\gamma(L/4 - 1/2) - \lambda)}, \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

$$\approx \sinh^L(\lambda + \gamma/2)e^{\gamma-2\lambda} + \sinh^L(\lambda - \gamma/2)e^{\gamma+2\lambda}. \quad (\text{D.5})$$

Tomando o limite termodinâmico encontramos

$$e^{-\beta F_{PA}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \left( \Lambda_{\max, n=L/2}^{(0)}(\lambda) \right)^{\frac{1}{L}} = a(\lambda). \quad (\text{D.6})$$

Esta é a exatamente a energia-livre do modelo de seis-vértices com condições periódicas de contorno no regime ferroelétrico tal que  $a > b$ [8].

# Apêndice E

## Inversões separadas

No caso de inversões separadas nós temos

$$Z_{j,1} = \sum_{g_1, g_2', g_3, g_4'} (\Lambda_{g_1}^{(0)})^{N-m_2+m_1-1} (\Lambda_{g_2}^{(1)}) (\Lambda_{g_3}^{(0)})^{m_2-m_1-1} (\Lambda_{g_4}^{(1)}) \times \\ \times \langle g_1^{(0)} | g_2^{(1)} \rangle \langle g_2^{(1)} | g_3^{(0)} \rangle \langle g_3^{(0)} | g_4^{(1)} \rangle \langle g_4^{(1)} | g_1^{(0)} \rangle [1 + (-1)^{1+\alpha_{g_1}+\alpha_{g_3}}]^2, \quad (\text{D.1})$$

portanto  $\alpha_{g_1}$  e  $\alpha_{g_3}$  devem ser diferentes para contribuições não nulas. Ainda, na soma acima, nós devemos restringir  $\{g_1, g_3\}$  a sequências onde  $\alpha_{g_1} = 1 - \alpha_{g_3}$ .

Para  $L$  ímpar, os setores  $n$  e  $L - n$  possuem paridades diferentes. Além disso, como podemos ver das relações (4.2.14) e (4.2.16), para cada auto-vetor  $|g\rangle$  no setor  $n$  nós temos outro auto-vetor  $\Pi^x |g\rangle$  no setor  $L - n$  com o mesmo auto-valor. Portanto, para  $L$  ímpar temos

$$F_{j,1} = \lim_{L, N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta NL} \ln \left( 4 \sum_{n=0}^L (\Lambda_{\max, n}^{(0)})^{N-2} (\Lambda_{\max}^{(1)})^2 |\langle g_{\max, n}^{(0)} | g_{\max}^{(1)} \rangle|^4 \right) = F_{PP}. \quad (\text{D.2})$$

assumindo (4.2.53).

Para  $L$  par, os setores  $n$  e  $L - n$  possuem a mesma paridade. Neste caso, uma possível aproximação é reter o máximo auto-vetor no setor  $n$  para  $g_1$  e usar o maior auto-vetor nos setores  $n \pm 1$  e  $L - n \pm 1$  para  $g_3$ . Portanto, encontramos

$$F_{j,1} = - \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta NL} \ln \left( 8 \sum_{n=0}^L \left[ \sum_{|m-n|=1} (\Lambda_{\max, n}^{(0)})^{N-m_2+m_1-1} (\Lambda_{\max, m}^{(0)})^{m_2-m_1-1} \right. \right. \\ \left. \left. \times (\Lambda_{\max}^{(1)})^2 |\langle g_{\max, n}^{(0)} | g_{\max}^{(1)} \rangle \langle g_{\max, m}^{(0)} | g_{\max}^{(1)} \rangle|^2 \right] \right) = F_{PP}, \quad (\text{D.3})$$

sendo que utilizamos a hipótese (4.2.53) e também o seguinte:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left( \Lambda_{\max, n}^{(0)} \right)^{\frac{1}{L}} = \lim_{L \rightarrow \infty} \left( \Lambda_{\max, n \pm 1}^{(0)} \right)^{\frac{1}{L}}. \quad (\text{D.4})$$

# Apêndice F

## Configurações Néel

Neste apêndice nós exibimos o número de configurações do modelos de seis-vértices sob condições de contorno tipo Néel. O número de configurações foi calculado para redes quadradas com  $N$  variando de 1 a 20.

$N$	Configurações
1	1
2	2
3	7
4	64
5	1322
6	64914
7	7474305
8	2033739170
9	1305583070738
10	1981880443295788
11	7111657020627320662
12	60382974032926242142168
13	1213039653244899907872180826
14	57687270950680153355854587442676
15	6494209210696211480439308528411663853

16	1731204438495421321106461120147832169010790
17	1092829001103470428650265862752651675963745966742
18	1633892840599915791908254127642749411000513938128114064
19	5785898354977820698935460290451680551971080689572072829375890
20	48534629904275880189653389798729712740901732087151544103619504415896

Tabela F.1: Número de configurações para as condições de contorno do tipo Néel.

# Bibliografia

- [1] P.W. Anderson, *Science* 177 (1972) 393.
- [2] R.B. Laughlin, D. Pines, *PNAS* 97 (2000) 28.
- [3] A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, McGraw-Hill Book Company, New York (1975).
- [4] A. Altland, B. Simons, *Condensed matter field theory*, CUP, Cambridge (2010).
- [5] R. Shankar, *Rev. Mod. Phys.* 66 (1994) 129.
- [6] F.D.M. Haldane, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 14 (1981) 2585.
- [7] T. Giamarchi, *Quantum physics in one dimension*, Clarendon Press, Oxford, (2003).
- [8] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, New York, (1982).
- [9] V.E. Korepin, N.M. Bogoliubov, A.G. Izergin *Quantum inverse scattering method and correlation functions* CUP, Cambridge, (1993).
- [10] E. Ising, *Zeit. für Physik* 31 (1925) 253.
- [11] W. Heisenberg, *Zeit. für Physik* 49 (1928) 619.
- [12] H. Bethe, *Zeit. für Physik* 71 (1931) 205.
- [13] H.A. Krammers, G.H. Wannier, *Phys. Rev.* 60 (1941) 252.
- [14] L. Onsager, *Phys. Rev.* 65 (1944) 117.
- [15] L. Pauling, *J. Am. Chem.* 57 (1935) 2680.

- [16] J.C. Slater, *J. Chem. Phys.* 9 (1941) 16.
- [17] C.N. Yang, C.P. Yang, *Phys. Rev.* 147 (1966) 303; C.N. Yang, C.P. Yang, *Phys. Rev.* 150 (1966) 321.
- [18] E.H. Lieb, *Phys. Rev. Lett.* 18 (1967) 692.
- [19] B.M. McCoy, T.T. Wu, *II Nuovo Cimento B* 56, (1968) 311.
- [20] R.J. Baxter *Annals of Phys.* 70 (1972) 193; R.J. Baxter, *Annals of Phys.* 70 (1972) 323.
- [21] C.N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* 19 (1967) 1312.
- [22] E.K. Sklyanin, L.A. Takhtadzhyan, L.D. Faddeev, *Theor. und Math. Phys.* 40 (1979) 688; Takhtadzhyan, L.D. Faddeev, *Russian Math. Surv.* 34 (1979) 11.
- [23] P.P. Kulish, E.K. Sklyanin, *J. Sov. Math.* 19 (1982) 1596.
- [24] P. P. Kulish, *J. Sov. Math.* 35 (1986) 2648.
- [25] P.P. Kulish, N.Y. Reshetikhin, E.K Sklyanin, *Lett. Math. Phys.* 5 (1981) 393.
- [26] C.N. Yang, C.P. Yang, *J. Math. Phys.* 10 (1969) 1115; C.P. Yang, *Phys. Rev. A* 2 (1970) 154.
- [27] M. Gaudin, *Phys. Rev. Lett.* 26 (1970) 1301.
- [28] M. Takahashi, *Prog. Theor. Phys.* 46 (1970) 401.
- [29] A.M. Polyakov, *Sov. Phys. JETP Lett.* 12 (1970) 381.
- [30] A. Belavin, A.M. Polyakov, A.B. Zamolodchikov, *Nucl. Phys. B* (1984) 333; *J. Stat. Phys.* 34 (1984) 763.
- [31] H.W.J. Blote, J.L. Cardy, M.P. Nightingale, *Phys. Rev. Lett.* 56 (1986) 742.
- [32] I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* 56 (1986) 746.
- [33] H.J. de Vega, F. Woynarovich, *Nucl. Phys. B* 251 (1985) 439.



- [34] A. Klümper, P.A. Pearce, *J. Stat. Phys.* 64 (1991) 13.
- [35] A. Klümper, M.T. Batchelor, P.A. Pearce, *J. Phys. A: Math. Gen.* 24 (1991) 3111.
- [36] A. Klümper, *Ann. Phys.* 1 (1992) 540.
- [37] A. Klümper, *Z. Phys. B* 91 (1993) 507.
- [38] H.F Trotter, *Proc. Am. Math. Soc.* 10 (1959) 545.
- [39] M. Suzuki, *Comm. Math. Phys.* 51 (1976) 183; *Prog. Theor. Phys.* 56 (1976) 1454.
- [40] G. Jüttner, A. Klümper, *Europhys. Lett.* 37 (1997) 335; G. Jüttner, A. Klümper, J. Suzuki, *Nucl. Phys. B* 487 (1997) 650.
- [41] A. Fujii, A. Klümper, *Nucl. Phys. B* 546 (1999) 751.
- [42] J. Suzuki, *J. Phys. A: Math. Gen.* 32 (1999) 2341.
- [43] A. Klümper, K. Sakai, *J. Phys. A: Math. Gen.* 35 (2002) 2173.
- [44] J. Damerau, A. Klümper, *J. Stat. Mech.* (2006) P12014.
- [45] G.A.P. Ribeiro, A. Klümper, *Nucl. Phys. B* 801 (2008) 247; G.A.P. Ribeiro, N. Crampé, A. Klümper, *J. Stat. Mech.* (2010) P01019;
- [46] T.S. Tavares, G.A.P. Ribeiro, *J. Stat. Mech.* (2013) P09007; T.S. Tavares, G.A.P. Ribeiro, *J. Stat. Mech.* (2014) P11026.
- [47] T.S. Tavares, G.A.P. Ribeiro, *J. Stat. Mech.* (2016) P093103.
- [48] T.S. Tavares, G.A.P. Ribeiro, *Nucl. Phys. B* 921 (2017) 357.
- [49] T.S. Tavares, G.A.P. Ribeiro, V. Korepin, *J. Stat. Mech.* (2015) P06016.
- [50] T.S. Tavares, G.A.P. Ribeiro, V. Korepin, *J. Phys. A: Math. Theor.* 48 (2015) 454004.
- [51] G.A.P. Ribeiro, V.E. Korepin, *J. Phys. A: Math. Theor.* 48 (2015) 045205.
- [52] V.E. Korepin, P. Zinn-Justin, *J. Phys. A: Math. Gen.* 33 (2000) 7053.
- [53] P. Zinn-Justin, *Phys. Rev. E* 62 (2000) 3411.

- [54] H.P. Brascamp, H. Kunz, F.Y. Wu, *J. Math. Phys.* 14 (1973) 1927.
- [55] M.T. Batchelor, R.J. Baxter, M.J. O'Rourke, C.M. Yung, *J. Phys. A: Math. Gen.* 28 (1995) 2759.
- [56] A.L. Owczarek, R.J. Baxter, *J. Phys. A: Math. Gen.* 22 (1989) 1141.
- [57] G. Kuperberg, *Int. Math. Res. Notices* 3 (1996) 139.
- [58] V.F.R. Jones, *Comm. Math. Phys.* 125 (1989), 459.
- [59] M. Wadati, T. Deguchi, Y. Akutsu, *Phys. Rep.* 180 (1989) 247.
- [60] J.F. Cornwell, *Group Theory in Physics v.3*, Academic Press, London, (1989).
- [61] C. Gómez, M. Ruiz-Altaba, G. Sierra, *Quantum groups in two-dimensional physics*, CUP, Cambridge, (1996).
- [62] J.H.H. Perk, C.L. Schultz, *Phys. Lett. A* 84 (1981) 407.
- [63] G. V. Uimin, *JETP Lett.* 12 (1970), 225; B. Sutherland, *Phys. Rev. B* 12 (1975) 3795.
- [64] K.A. Chao, J. Spałek, A.M. Oleś, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 10 (1977) L271.
- [65] V. Yu. Popkov, A.A. Zvyagin, *Phys. Lett. A* 175 (1993) 295; A.A. Zvyagin, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 12579.
- [66] P. Schlottmann, *Phys. Rev. B* 36 (1987) 5177.
- [67] A. A. Zvyagin, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 15050.
- [68] B. Sutherland, *Phys. Rev. B* 12 (1975) 3795; O. Babelon, H.J. de Vega, C-M. Viallet, *Nucl. Phys. B* 200 (1982) 266.
- [69] I.V. Cherednik, *Funct. Anal. and Appl.* 20 (1986) 87; M. Jimbo, A. Kuniba, T. Miwa, M. Okado, *Comm. Math. Phys.* 119 (1988) 543.
- [70] L. Zhu, M. Garst, A. Rosch, Q. Si, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 066404; M. Garst, A. Rosch, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 205129.

- [71] H. Frahm, C. Rödenbeck, J. Phys. A: Math. Gen. 30 (1997) 4467; H. Frahm, C. Rödenbeck, Eur. Phys. J. B, 10 (1999) 409.
- [72] C. Trippe, A. Klümper, Low. Temp. Phys. 33 (2007) 920.
- [73] N. Kawakami, S. Yang, J. Phys.: Condens. Matter 3 (1991) 5983.
- [74] P. Bak, Rep. Prog. Phys, 45 (1982) 587.
- [75] A. A. Zvyagin, A. Klümper, J. Zittartz, Eur. Phys. J. B 19 (2001) 25.
- [76] Z. Tsuboi, J. Phys. A 32 (1999) 7175.
- [77] Ken-Ichiro Kobayashi, Z. Phys. C, 59 (1993) 155.
- [78] M.J. Martins, Phys. Rev. Lett. 74 (1995) 3316.
- [79] I. Krichever, O. Lipan, P. Wiegmann, A. Zabrodin, Comm. Math. Phys. 188 (1997) 267.
- [80] M. J. Martins, P.B. Ramos, Nucl. Phys. B 500 (1997) 579.
- [81] L. Lewin, *Polylogarithms and Associated Functions*, Elsevier North Holland, New York, (1981).
- [82] M. J. Martins, B. Nienhuis, R. Rietman, Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 504.
- [83] C. Itzykson, H. Saleur, J.-B. Zuber, Europhys. Lett. 2 (1986) 91.
- [84] H.J. de Vega, Nucl. Phys. B 240 (1984) 495.
- [85] V.E. Korepin, Comm. Math. Phys., 86 (1982) 361.
- [86] A.G. Izergin, Sov. Phys. Dokl. 32 (1987) 878.
- [87] A.G. Izergin, D.A. Coker, V.E. Korepin, J. Phys. A: Math. Gen. 25 (1992) 4315.
- [88] P.M. Bleher, V.V. Fokin, Comm. Math. Phys., 268 (2006) 223; P.M. Bleher, K. Liechty, Comm. Math. Phys. 286 (2009) 777; P.M. Bleher, K. Liechty, J. Stat. Phys. 134 (2009) 463; P.M. Bleher, K. Liechty, Comm. on Pure and Appl. Math., 63 (2010) 779.

- [89] N.M. Bogoliubov, A.G. Pronko, M.B. Zvonarev, *J. Phys. A: Math. Gen.* 35 (2002) 5525.
- [90] R.A. Brualdi, H.K. Kim, *Journal of Combin. Designs.* (2014) 204.
- [91] G. Andrews, *J. Combin. Theor. Ser. A* 66 (1994) 28; D. Zeilberger, *Elect. J. Combin.* 3 (1996) R13: 1-84.
- [92] F. Colomo, A.G. Pronko, *Comm. Math. Phys.* 339 (2015), 699.
- [93] P.W. Anderson, *Science* 235 (1987) 1196;
- [94] F.C. Zhang, T.M. Rice, *Phys. Rev. B* 37 (1988) 3759.
- [95] Sh. Khachatryan, A. Ferraz, A. Klümper, A. Sedrakyan, *Nucl. Phys. B* 899 (2015) 444.
- [96] M. Mourigal et al., *Nature Phys.* 9 (2013) 435; K.Y. Povarov et al., *Phys. Rev. B* 91 (2015) 020406; D. Schmidiger, et al., *Phys. Rev. Lett.* 116 (2016) 257203.
- [97] M. Milovanovic, N. Read, *Phys Rev. B* 53 (1996) 13559.
- [98] X.G. Wen, Y.S. Wu, *Nucl. Phys. B* 419 (1994) 445; X.G. Wen, Y.S. Wu, T. Hatsugai, *Nucl. Phys. B* 422 (1994) 476.
- [99] H. Saleur, *Nucl. Phys. B* 382 (1992) 486.
- [100] F.D.M. Haldane, E.H. Rezayi, *Phys. Rev. Lett.* 60 (1988) 956.