

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Criticalidade do Modelo de Oito Vértices
na Vizinhança de Modelos Solúveis pelo
Método de Cotas Superior e Inferior

Claudio Fernandes de Souza Rodrigues¹

INSTITUTO DE FÍSICA
Serviço de Biblioteca e Informação
Tombo: 3967 ex. 1

SBI-IFUSP



305M810T3967

*Tese apresentada ao Instituto de
Física da Universidade de São Paulo
na obtenção do título de Doutor*

Orientador: Domingos H. U. Marchetti
Apoio Financeiro: FAPESP

Membros da comissão examinadora:

Prof. Dr. Domingos Humberto Urbano Marchetti (orientador) (IFUSP)
Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski (IFUSP)
Prof. Dr. Carlos Seihiti Orii Yokoi (IFUSP)
Prof. Dr. Henrique von Dreifus (IME-USP)
Prof. Dr. Paulo Afonso Faria da Veiga (ICMC)

São Paulo
15 de Dezembro de 2003

¹e-mail:claudiof@if.usp.br

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

def. 15/12/03

530

R696c

①

ex:1

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Rodrigues, Claudio Fernandes de Souza

Criticalidade do modelo de oito vértices na
vizinhança de modelos solúveis pelo método de cotas
superior e inferior. São Paulo, 2003.

Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Departamento de Física Geral.

Orientador: Prof. Dr. Domingos Humberto Urbano
Marchetti

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Modelo de oito vértices; 2. Modelo de
Heisenberg; 3. Expoentes críticos; 4. Positividade por
reflexão; 5. Desigualdade do tabuleiro de xadrez.

USP/IF/SBI-002/2004

RESUMO. O objetivo deste trabalho é analisar o comportamento dos expoentes críticos do modelo de Oito Vértices através de cotas superior e inferior para sua função de partição na vizinhança de modelos solúveis. O método é ilustrado pelo modelo de Heisenberg quântico unidimensional também denominado modelo XYZh. Aplica-se igualmente ao modelo de Ising bidimensional (com interação quártica e segundos vizinhos). Assim, propomos um modo alternativo de abordar universalidade nos modelos de Heisenberg unidimensional quântico e Ising bidimensional clássico por desigualdades satisfeitas por suas funções de partição. Dentre os métodos que utilizamos para a obtenção das cotas destacam-se: a integração Gaussiana nas variáveis reais e nas variáveis de Grassmann; o mapeamento de um modelo unidimensional em um bidimensional através do auxílio da fórmula de Trotter; a representação da função de partição pelo Pfaffiano de uma matriz; e, para a obtenção da cota superior, a técnica de positividade por reflexão, estendida ao caso de variáveis que anti-comutam.

Abstract. The aim of this work is to analyze the behavior of critical exponents in the eight-vertex model starting from the upper and lower bound obtained for its partition function. We studied the quantum onedimensional Heisenberg model also denominated XYZh model. We propose an alternative way of approaching universality in Heisenberg and Ising models using inequalities satisfied for their partition functions. Among the methods that we used in the solutions of the models stand out the integration on the Grassmann variables, the mapping of a onedimensional model in a two-dimensional one through the aid of the Trotter formula and, finally, the representation of the partition function as Pfaffian of a matrix. To obtain an upper bound, the positivity reflection technique was used, extended to the case of variables that anticommute, and the method of the chess board estimate.

Conteúdo

Agradecimentos	vii
Capítulo 1. Introdução	1
Capítulo 2. Definições Preliminares e Modelos Considerados	5
1. Função de Partição	5
2. Os observáveis	10
3. Transição de fase e expoentes críticos	14
Capítulo 3. Modelo de Oito Vértices	19
1. Introdução	19
2. Oito Vértices	21
3. Variáveis de Grassmann	22
4. Função de Partição - Z_{8v}	25
Capítulo 4. Modelo de Heisenberg	33
1. Modelo XYh	33
2. Modelo XYZh	48
Capítulo 5. Modelo de Ising	51
1. Interação entre primeiros vizinhos	53
Capítulo 6. Cota Superior para o Modelo de Oito Vértices	57
1. Positividade por Reflexão: Introdução	58
2. Aplicação da PRT ao Modelo de Oito Vértices	61
3. Interpretação matricial da positividade pela reflexão θ	82
4. Simetrias do modelo	86
5. Cota Superior de Z_{8v}	87
6. Aplicação ao modelo de Heisenberg	90
Capítulo 7. Cota Inferior para o Modelo de Oito Vértices	99
1. Modelo de Heisenberg-Cota Inferior	106
Capítulo 8. Análise das Cotas - Modelo de Heisenberg	109
1. Análise das Cotas	109
2. Estado fundamental	111
3. Estado Fundamental - J^z próximo a zero	115

Apêndice A. Variáveis de Grassmann	117
Apêndice B. Exemplo-Positividade por Reflexão	119
Apêndice C. Interação Quártica	125
1. Introdução	125
2. Condição de fermions livres	125
3. Função de partição	129
Bibliografia	135
Índice	137

Agradecimentos

Este trabalho é dedicado à minha mãe, Noy Fernandes de Almeida.

Agradeço aos meus irmãos, Carlos, Hebe e Clério pelo apoio. Também agradeço aos meus amigos, Mário Salles, Fernando Nishigima, Ricardo Agresta, Leonardo Guidi, Lívio, Maíra, Andrea, Margarete, Marisa e Ana Paula. Agradeço ao meu orientador, D. H. U. Marchetti, por sua disponibilidade e discussão dos resultados. ¹

¹Este trabalho foi escrito em L^AT_EX.

CAPÍTULO 1

Introdução

Universalidade é o mais importante conceito na teoria dos fenômenos críticos: “O conceito de universalidade está associado à transição de fase e não a um sistema teórico ou físico. Sistemas com suficiente complexidade podem exibir transições de fase distintas, em diferentes partes de seu espaço de fase, pertencendo a diferentes classes de universalidade.” (veja [LB]).

Universalidade é expressa por relações envolvendo expoentes críticos diversos. Os expoentes críticos descrevem o comportamento de variáveis termodinâmicas de um sistema próximo a um ponto crítico. A teoria de grupo de renormalização permite descrever a criticalidade de um sistema em termos de pontos fixos da transformação das grandezas termodinâmicas induzida por mudanças de escala. O espaço funcional onde esta transformação atua é decomposto em direções relevantes e irrelevantes determinadas pelas autofunções da transformação linearizada em torno do ponto fixo associadas a autovalores positivos e negativos, respectivamente. Expoentes críticos estão intimamente relacionados com os autovalores positivos e a universalidade se expressa pela direções irrelevantes da transformação que não contribuem nem alteram a criticalidade (veja, por exemplo, [M]). Apesar do avanço técnico das idéias de grupo de renormalização, ainda não temos uma compreensão do cenário de universalidade, com todo rigor matemático, com exceção dos modelos hierárquicos. Além disso, o maior obstáculo do grupo de renormalização para esta compreensão é justamente o excesso de aspectos técnicos acessível apenas a especialistas.

Para uma classe de modelos cuja função de partição é explicitamente calculada, os chamados *modelos exatamente solúveis*, a criticalidade pode ser estudada e seus expoentes críticos determinados. Encontra-se nesta classe alguns modelos bidimensionais clássicos e unidimensionais quânticos, ambos com interação entre vizinhos mais próximos. Outros, como o modelo de oito vértices, necessitam condições adicionais sobre os parâmetros para que sua função de partição seja resolvida. Esta restrição impede que o conceito de universalidade seja estabelecido de maneira tão abrangente como na teoria de grupo de renormalização.

Nesta tese propomos um método alternativo de análise da criticalidade. Os modelos considerados não são exatamente solúveis, porém, no espaço de parâmetros apropriado, encontram-se em uma vizinhança de algum modelo exatamente solúvel. A criticalidade é abordada através de cotas¹, superior e inferior, para a função de partição.

¹Utilizaremos os termos cota superior para “upper bound” e cota inferior para “lower bound”.

O modelo de oito vértices tem a peculiar propriedade de possuir expoentes críticos que variam continuamente com relação a seus parâmetros. Isto segue do solução por Baxter[Ba] do modelo de oito vértice satisfazendo a condição de “campo nulo”. Além disso, a maioria dos modelos exatamente solúveis são ou um caso particular ou um caso limite deste modelo. O estudo dos expoentes críticos do modelo de oito vértices é fundamental para a compreensão da noção de universalidade que pretendemos descrever nesta tese.

No presente trabalho, analisamos as cotas superior e inferior da função de partição do modelo de Heisenberg e investigamos como estas informações estão relacionadas aos seus expoentes críticos. O modelo de Heisenberg unidimensional quântico é obtido por um processo limite do modelo de oito vértices cujos parâmetros não satisfazem a condição de “fermions livres” nem de “campo nulo”, necessárias para sua solução exata. O modelo de oito vértices, por sua vez, é escrito como uma integral funcional cuja ação contém interação quártica. É justamente este termo que destrói a integridade.

De acordo com resultados recentes devido a Pinson e Spencer ([PS] e [Sp]), certas perturbações quárticas de modelos integráveis, e interações entre segundos vizinhos, podem não alterar os expoentes críticos do modelo não perturbado. Os resultados são compreendidos via técnicas de grupo de renormalização e causaram uma certa surpresa, tendo em vista que o modelo de oito vértices satisfazendo a condição “campo nulo”, resolvido por ansatz de Bethe por Baxter, possui interação quártica e expoentes críticos “fracamente universais” [Ba].

Pelo simples fato de considerar uma família a parâmetros contínuos de modelos, nossa abordagem pode elucidar esta aparente contradição. Nosso quadro pode ser resumido da seguinte forma: existe uma superfície crítica, no espaço de parâmetros, cujos expoentes críticos são universais e uma outra superfície crítica interceptando a primeira (ou mesmo contendo-a) cujos expoentes críticos são “fracamente universais”. Apesar de bastante sugestivo, a análise realizada nesta tese não estabelece este resultado pois, para ter acesso aos modelos considerado por Baxter, dois modelos de oito vértices relacionados por dualidade devem ser considerados simultaneamente. A elaboração de cotas, superior e inferior, para função de partição compatíveis com as relações de dualidade será assunto de uma investigação futura.

As cotas inferior e superior obtidas nesta tese são ótimas no sentido que os dois limites igualam-se ao valor exato da função de partição sob a condição de fermions livres, $\Delta = 0$. É justamente esta propriedade que permite comparar os expoentes críticos com os dos modelos exatamente solúveis e estabelecer classes de universalidade. Consideramos este resultado o principal da tese.

Devido a dificuldade de extrair conclusões a partir das expressões analíticas, faremos uso de resultados numéricos. Nossas estimativas preliminares ainda não são suficientes para determinar expoentes críticos com precisão. Os cálculos realizados no modelo de Heisenberg $XYZh$ incluem a energia livre e derivadas até segunda ordem com respeito ao campo magnético e são mostrados nas Figuras do capítulo 8. Uma comparação

destes resultados com os valores críticos exatos ainda não é possível devido a falta de controle das superfícies críticas. A inclusão de simetrias originadas por dualidade auxiliariam nesta tarefa.

Este trabalho está organizado da seguinte forma.

No capítulo 2, apresentamos sucintamente as definições preliminares e os modelos considerados. Os conceitos abordados incluem a função de partição, energia livre, magnetização, susceptibilidade, correlação, transição de fase e expoentes críticos.

No capítulo 3, introduzimos o modelo de oito vértices. Em seguida, a função de partição deste modelo é escrita como uma integral Gaussiana de Grassmann perturbada por uma interação quártica. Sob a condição de fermions livres, a Gaussiana é integrada resultando no Pfaffiano de uma matriz antisimétrica. No caso geral, substituímos o termo quártico, definido para cada vértice da rede, por outra integral Gaussiana (de variável real) de dois termos de interação quadrática nas variáveis de Grassmann e linear na variável real (veja a expressão (3.17)). O resultado final, resumido no Teorema 3.5, descreve a função de partição de modelo de oito vértices como a esperança, com respeito a uma medida Gaussiana real, de um Pfaffiano de uma matriz aleatória. No apêndice C, elaboramos um outro método de obtenção da expressão da função de partição.

No capítulo 4, obtivemos os oito vértices correspondentes ao modelo de Heisenberg, ou $XYZh$, através do auxílio da fórmula de Trotter. Assim, mapeamos modelos unidimensionais quânticos em bidimensionais clássicos. Apresentamos a solução do modelo XYh unidimensional calculando sua função de partição através do Pfaffiano de uma matriz. Também apresentamos a análise de dois expoentes críticos: o expoente crítico α e o expoente crítico do comprimento de correlação ξ . Em seguida, apresentamos uma tabela com todos os expoentes críticos do modelo XYh .

Calculamos rapidamente, no capítulo 5, a energia livre do modelo de Ising bidimensional ilustrando o método das variáveis de Grassmann, e apresentamos seus expoentes críticos.

No capítulo 6, utilizamos a positividade por reflexão para obtermos uma cota superior para a função de partição do modelo de oito vértices. Observamos que a álgebra dos espaços obtida pela positividade por reflexão anticomuta, assim obtivemos uma reflexão em que a rede deve ser torcida para observarmos uma simetria do modelo de oito vértices. Apresentamos um modo alternativo de interpretação da positividade por reflexão analisando diretamente a ação da reflexão sobre a matriz que define o modelo de oito vértices. Em seguida, utilizamos a desigualdade de Schwarz e a estimativa do tabuleiro de xadrez para homogeneizar as variáveis e parâmetros sobre toda a rede. Aplicamos a cota obtida ao modelo XXZ com campo nulo e ao modelo $XYZh$.

No capítulo 7, obtemos uma cota inferior para a função de partição do modelo de Heisenberg examinando termo a termo os fatores da expansão do Pfaffiano. Em seguida, aplicamos esta cota inferior ao modelo $XYZh$.

Finalmente, no capítulo 8, por intermédio das cotas da função de partição do modelo de Heisenberg, apresentamos uma análise, pela observação dos gráficos, das funções derivadas da energia livre: a capacidade térmica, a magnetização e a susceptibilidade magnética. As cotas para a função de partição do modelo de Heisenberg tendem à função de partição do modelo XYh à medida que J^z tende a zero. Falta, neste capítulo, o estudo dos expoentes críticos obtidos pela variação do parâmetro J^z .

CAPÍTULO 2

Definições Preliminares e Modelos Considerados

O intuito deste capítulo é apresentar sucintamente as definições das expressões mais utilizadas nos capítulos posteriores. Existem ótimos textos sobre a teoria básica da mecânica estatística que poderiam substanciar as definições aqui introduzidas. Citamos, por exemplo, os capítulos introdutórios de Colin Thompson[Co] e Callen[Ca].

Na mecânica estatística usamos a *hipótese ergódica*, a média é calculada em um “ensemble”. Assim, a média temporal é substituída pela média de ensemble. O *ensemble* é entendido como o conjunto dos estados microscópicos com seus respectivos pesos estatísticos.

Afirmamos que um modelo possui solução conhecida quando sua função de partição e sua energia livre são calculadas. Relativamente, são poucos os modelos que apresentam solução conhecida.

Representamos sistemas magnéticos reais por hamiltonianos idealizados. Os hamiltonianos descrevem as formas de energias de tais sistemas. Apesar desta idealização, a análise de tais sistemas é consideravelmente difícil. O interesse em determinados modelos depende da quantidade e qualidade das informações que os resultados trazem. Sempre há esperança que métodos que geram informações sobre sistemas idealizados também gerem informações sobre sistemas reais. Assim, se somos incapazes de solucionar sistemas idealizados, somos mais incapazes ainda de discutir e analisar sistemas reais.

Estudaremos os modelos de *spins* (momento angular intrínseco da partícula) que são modelos estatísticos que descrevem o magnetismo, os quais exibem comportamentos de sistemas reais e portanto nos dá uma compreensão dos mecanismos físicos envolvidos. Apesar de sua aparente simplicidade, muitos destes modelos não apresentam solução conhecida através dos métodos teóricos atuais. Um dos aspectos mais interessantes destes modelos é a análise de seus comportamentos em sua transição de fase que pode ser caracterizada pelo cálculo de seus expoentes críticos. Sem restrição a qualquer tipo de modelo, esta análise é uma meta extremamente desafiadora.

1. Função de Partição

Em 1902, Josiah Willard Gibbs publicou “Elementary Principles In Statistical Mechanics”. Ele formulou os cálculos das funções termodinâmicas a partir das forças microscópicas entre os componentes de um sistema. O ponto inicial na análise de Gibbs foi o princípio que fundamentou sistemas em equilíbrio termodinâmico, o princípio da

máxima entropia. Notamos que a formulação de Gibbs é completamente independente de qualquer visão microscópica da matéria, é válida para mecânica clássica e quântica.

O problema básico em mecânica estatística é calcular a soma sobre todos os estados possíveis da função de partição

$$Z = \sum_{\sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) ,$$

tal que σ representa os estados e $E(\sigma)$ a energia do sistema. Infelizmente, trata-se de um problema difícil devido às interações fundamentais do sistema. Desta forma, somos forçados a substituir o sistema real que encontramos na natureza por uma idealização. Esta idealização é conhecida por *modelo*. Matematicamente, isto consiste em especificar através de aproximações e simplificações os estados σ e a energia $E(\sigma)$ do sistema. Segundo Barry Simon, “modelos na rede são caricaturas inventadas para iluminar vários aspectos da mecânica estatística elementar, especialmente o fenômeno de transição de fase e da quebra de simetria espontânea”. Os modelos aqui tratados estarão mecânica e quimicamente isolados, mas em equilíbrio térmico com o ambiente.

Seja $G = (V, L)$ um grafo finito composto pelos conjuntos de vértices V e ligações L entre pares de vértices. Por exemplo, no Modelo de Ising chamamos $\Omega = \{+1, -1\}^V$ o espaço dos possíveis estados e denotamos por $\sigma = \{\sigma_x\}_{x \in V}$ seus elementos. A variável $\sigma_x \in \{+1, -1\}$ indica o spin no sítio x . Uma configuração do sistema, $\sigma \in \Omega$, é o conjunto de valores de σ_x que determina um macroestado (sistema com infinito número de grau de liberdade). Usualmente, V é o conjunto de vértices, um hipercubo de dimensão D , $V = \mathbb{Z}^D$. Denotamos por Λ um subconjunto finito de \mathbb{Z}^D . A energia de uma configuração com suas interações representamos por $E(\sigma)$. Nos sistemas quânticos, $E(\sigma)$ é um operador hamiltoniano atuando sobre um espaço de Hilbert.

No *ensemble* canônico, a função de partição tem um papel de gerador das funções termodinâmicas. A função de partição canônica é

$$Z(T) = \sum_{\sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) \tag{2.1}$$

tal que $\beta = 1/(kT)$, k é a constante de Boltzmann, T a temperatura do sistema e a soma é realizada sobre todos os estados σ permitidos do sistema. O fator $\exp(-\beta E(\sigma))$ é conhecido como *distribuição ou peso de Boltzmann*.

De acordo com o postulado de Gibbs, a probabilidade do sistema encontrar-se no estado σ é

$$\rho(\sigma) = \frac{\exp(-\beta E(\sigma))}{Z} . \tag{2.2}$$

Em um sistema com um número finito de configurações, cada configuração é proporcional a (2.2), ou seja, a distribuição dos estados não é uniforme, mas proporcional ao peso de Boltzmann. Percebemos que Z é também um fator de normalização, é a soma das contribuições de cada configuração σ do sistema com peso dado pela distribuição

de Boltzmann. Notamos que (2.1) é consistente com a definição de probabilidade,

$$\sum_{\sigma} \rho(\sigma) = 1 .$$

Na mecânica quântica, a função de partição Z é obtida pelo traço de $\exp(-\hat{H}/kT)$, onde \hat{H} é o operador Hamiltoniano. $E(\sigma)$ é a auto-energia do autoestado σ .

Seja M o número de partículas e $N = |\Lambda|$ o volume ou número de sítios do subconjunto $\Lambda \subset \mathbb{Z}^D$. Se permitirmos que o número $M \leq N$ (restrição fermiônica) de partículas em um sistema varie, teremos a definição da função de partição grande-canônica

$$\Xi(N, T, \mu) = \sum_{M=0}^{\infty} \frac{1}{M!} \exp[-\beta(E(M) - \mu M)] ,$$

tal que $E(M)$ é a energia de interação do sistema para um subconjunto com M partículas. Neste termos, a pressão é definida por

$$P(N, T, \mu) = \frac{kT}{N} \ln \Xi(N, T, \mu) .$$

A função de partição grande-canônica pode ser expressa em relação à função de partição canônica na forma

$$\Xi(N, T, \mu) = \sum_{M=0}^N Z(T, M) z^M ,$$

tal que $z = \exp(\beta\mu)$ é a fugacidade e $Z(T, M)$ a função de partição canônica contendo M sítios.

As quantidades termodinâmicas são, na mecânica estatística, valores médios de funções $f(\sigma)$ das variáveis σ . De acordo com a teoria da probabilidade, os valores médios aumentam em significado com a diminuição da dispersão ou variância. Assim, a convergência na direção dos comportamentos termodinâmicos aumenta com o aumento no volume $|\Lambda|$. As propriedades estatísticas do estado de equilíbrio no *limite termodinâmico* são obtidas quando $N \rightarrow \infty$. “Em volume finito, há, em princípio, flutuações em torno das previsões da termodinâmica, assim espera-se que os argumentos termodinâmicos sejam exatos apenas no limite em que o volume torna-se infinito.” (Veja Barry Simon[BS]). Notemos que transição de fase somente ocorre no limite termodinâmico em que a função de partição (2.1) deixa de ser uma função analítica conforme a variação de algum parâmetro, tal como a temperatura ou campo magnético. Os ingredientes suficientes a existência do limite termodinâmico são (veja página 116 do volume II de [LB]):

- a) Invariância translacional das interações entre as partículas,
- b) Alguma restrição ao alcance das interações e
- c) Limitação sobre a proporção do número de sítios na fronteira quando a rede ou volume do sistema aumenta.

A demonstração do limite termodinâmico foi realizado por Yang e Lee[YL] em 1952 com a demonstração do *teorema do círculo* em que os zeros da função de partição

grande-canônica encontram-se situados no círculo unitário $|z| = 1$. O correspondente teorema para sistemas em redes foi apresentado por Ruelle[**Ru**] em 1969.

Voltemos à função de partição canônica. A *Energia Livre de Gibbs* é dada por

$$F_{\Lambda}(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \quad (2.3)$$

no limite termodinâmico, definimos a energia livre por unidade de volume

$$f(\beta) = \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^D} \frac{1}{|\Lambda|} F(\beta).$$

Se X for um observável do sistema, tal como sua energia total ou magnetização, então seu valor termodinâmico médio observado será

$$\langle X \rangle = Z^{-1} \sum_{\sigma} X(\sigma) \exp(-\beta E(\sigma)).$$

Em probabilidade, $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ é uma variável aleatória definida no espaço de medida (Ω, Σ, ρ) , tal que Σ é a álgebra sigma dos eventos (subconjuntos do conjunto de estados Ω) e ρ o peso de Boltzmann. Nesta linguagem, $\langle X \rangle$ é a esperança da variável X .

Em particular, a energia interna é

$$\begin{aligned} U &= \langle E \rangle \\ &= Z^{-1} \sum_{\sigma} E(\sigma) \exp(-\beta E(\sigma)) \\ &= kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} (F/T) \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde usamos as definições (2.1) e (2.3).

Podemos aplicar um campo externo aos spins σ_x de uma rede regular e também ter modelos onde apenas os vizinhos mais próximos interagem, ou com interações estendidas aos segundos vizinhos e assim por diante.

Consideraremos o *modelo de Ising* cuja energia é dada por

$$E(\sigma = \{\sigma_i\}) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i,$$

com interação somente entre os primeiros vizinhos, $\langle i,j \rangle$, tal que $J_{i,j}$ é uma constante de interação entre o spin σ_i e o spin σ_j . O spin σ_j localiza-se no sítio j da rede e assume os valores $\sigma_j = \pm 1$. Se $J_{i,j} > 0$, teremos o caso ferromagnético em que o estado de mais baixa energia é alcançado com todos os spins alinhados. Quando a interação entre os spins depender somente da distância entre eles e não do sítio da rede em que se situa, $J_{i,j} = J(|i-j|)$, e as condições de fronteira forem cíclica ou periódica, o modelo terá *invariância translacional*. Isto é, se X_A for uma variável aleatória que depende apenas dos vértices no conjunto $A \subset \Lambda$, então

$$\langle X_A \rangle = \langle X_{A+i} \rangle,$$

$\forall i \in \Lambda$, onde $A+i = \{j+i, j \in A\}$ é o conjunto A transladoado por i . Notemos que um sistema com impurezas (variáveis que mantemos fixas em um dado valor que depende da posição) não exhibe invariância translacional.

O modelo de Ising é o mais simples modelo para o ferromagnetismo que prediz transições de fase e fenômenos críticos. Este modelo foi proposto em 1920 por W. Lenz como modelo microscópico para explicar o magnetismo, antes do advento da teoria da mecânica quântica e do modelo de Heisenberg. Lenz delegou a responsabilidade da solução deste modelo para seu aluno E. Ising. Em 1925, Ising[Is] foi capaz de solucionar este modelo apenas no caso unidimensional, ficando desapontado por este não apresentar transição de fase. Em 1944, Lars Onsager[On] solucionou analiticamente este modelo em duas dimensões com campo nulo, exibindo transição de fase para temperatura finita não nula. Onsager usou álgebras de Lie em sua solução, Kaufmann[Kau] simplificou o trabalho de Onsager usando a representação de spinor e Schultz e colaboradores[SML] mostraram que a matriz de transferência poderia ser expressa em termos de fermions livres. Outras derivações relacionam o modelo de Ising com cobertura de dímeros ou métodos combinatórios[Ka]. Este modelo ainda não foi resolvido analiticamente em duas dimensões com campo magnético $h \neq 0$ e em três dimensões. Assim, simulações numéricas através do método de *Monte Carlo* tem sido um dos métodos usado para obter resultados numéricos.

Um importante resultado do modelo de Ising, numa rede de duas ou mais dimensões, é o fato de exibir magnetização espontânea para temperaturas suficientemente baixas e $h \rightarrow 0$, apesar do modelo ser simétrico pelas mudanças dos sinais “+” e “-” em $h = 0$.

Para ilustrar um modelo quântico apresentamos o Hamiltoniano do modelo de Heisenberg isotrópico

$$-J \sum \sigma_i \cdot \sigma_j . \quad (2.5)$$

Este é um modelo realístico para o fenômeno do ferromagnetismo, onde dois spins vizinhos σ_i e σ_j possuem uma energia de interação $-J\sigma_i \cdot \sigma_j$, sendo J uma constante de acoplamento e “.” um produto interno,

$$\sigma_i \cdot \sigma_j = \sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y + \sigma_i^z \sigma_j^z .$$

σ^x , σ^y e σ^z são as matrizes de Pauli (veja 4.2).

Para ficar mais claro, expandiremos o produto interno da equação (2.5) e acrescentaremos um campo magnético externo, além de permitir interações distintas para cada direção. Assim, obtemos

$$H_{Heis} = \sum_{\langle i,j \rangle} J^x \sigma_i^x \sigma_j^x + J^y \sigma_i^y \sigma_j^y + J^z \sigma_i^z \sigma_j^z + h \sigma_i^z .$$

$\langle i, j \rangle$ refere-se às interações somente entre primeiros vizinhos de uma rede unidimensional $\Lambda \subset \mathbb{Z}$. Este é o modelo de Heisenberg mais geral, pois é anisotrópico ($J^x \neq J^y \neq J^z$) e possui um campo h aplicado. Ele é conhecido também por *modelo XYZh*.

σ_i^α é uma matriz da forma produto tensorial,

$$\sigma_i^\alpha = I \otimes \dots \otimes \sigma^\alpha \otimes \dots \otimes I ,$$

diferente da identidade somente na i -ésima posição do produto, atuando no espaço $\mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2$. σ_i^α satisfaz as regras de comutação

$$[\sigma_i^x, \sigma_j^y] = 2i\delta_{i,j}\epsilon^{x,y,z}\sigma_i^z .$$

Na equação acima, $\epsilon^{x,y,z}$ é um tensor antissimétrico.

Podemos tomar, dentre várias, a condição de fronteira livre ou periódica. Para condição de fronteira periódica temos

$$\sigma_i = \sigma_{i+N} .$$

A função de partição do modelo $XYZh$ é

$$Z = Tr [e^{-\beta H_{Heis}}] .$$

Informamos que o modelo de Ising é típico para ligações binárias (átomos de dois tipos A e B correspondendo aos spins “+” e “-”) e o modelo unidimensional quântico de Heisenberg pode ser mapeado no modelo de Ising clássico bidimensional com o uso da fórmula de Trotter.

2. Os observáveis

Os observáveis nestes modelos são calculados por

$$\langle O \rangle = \frac{Tr [e^{-\beta H_{Heis}} O]}{Tr [e^{-\beta H_{Heis}}]} .$$

A seguir, definimos os observáveis mais utilizados obtidos pelos modelos que serão discutidos e analisados nos capítulos posteriores.

A capacidade térmica, mantido o campo magnético constante, é definida por

$$C = \left. \frac{\partial}{\partial T} U \right|_h ,$$

tal que U é dado por (2.4).

Em temperaturas elevadas com campo externo nulo, $h = 0$, um sistema apresenta-se em *fase paramagnética*: os spins não apresentam direções preferenciais. Assim, o momento magnético resultante é nulo.

Abaixo de uma temperatura crítica, T_c , entretanto, os spins tendem a alinhar em uma determinada direção no espaço, mesmo na ausência de campo externo. Neste caso, teremos uma magnetização e o sistema estará na *fase ferromagnética*.

Definimos *magnetização* como a média dos spins do sistema,

$$M_N(h, T) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle \quad (2.6)$$

sendo função da temperatura T e do campo magnético aplicado h . Observamos que $M_N(0, T) = 0$. No limite termodinâmico, $\lim_{N \rightarrow \infty}$, (2.6) pode ser escrita como

$$M(h, T) = -\frac{\partial}{\partial h} f(h, T) ,$$

para $h \neq 0$ como resultado do Teorema de Lee e Yang.

A *magnetização espontânea* é obtida no limite de ausência de campo agindo sobre o sistema

$$M_{0+} = \lim_{h \downarrow 0} M(h, T)$$

e

$$M_{0-} = \lim_{h \uparrow 0} M(h, T) .$$

A magnetização espontânea ocorre se existir $T_c > 0$ tal que $M_{0+} \neq M_{0-}$ para $T < T_c$. Este é o fenômeno essencial associado ao ferromagnetismo.

No modelo de Ising a magnetização é o parâmetro de ordem. Na teoria de transição de fase, o *parâmetro de ordem* é a variável cuja média provê a ordem ou quebra de simetria do sistema. Usualmente, o parâmetro escolhido assume valores não nulos no estado ordenado quando a simetria é quebrada, passando a zero no estado simétrico (estado desordenado). No modelo de Ising, o parâmetro de ordem $M(T)$ é não nulo abaixo de T_c (*temperatura crítica*). $T_c = \inf \{T \in \mathbb{R} : M_{0+} = M_{0-}\}$. Abaixo de T_c o modelo possui dois estados, um estado (+) com magnetização M_{0+} , e um estado (-) com magnetização M_{0-} . Mais precisamente, tomando condições de fronteira (+) e $N \rightarrow \infty$, obtemos um estado M_{0+} , com condições de fronteira (-) obtemos M_{0-} . Se $T > T_c$, $M_{0+} = M_{0-} = 0$, se $T < T_c$, $M_{0+} \neq M_{0-}$ não nulos.

A *susceptibilidade* é uma medida da variação de M quando se varia o campo h ,

$$\chi = \frac{\partial}{\partial h} M(h, T) .$$

A *variância* de σ_i é

$$var[\sigma_i] = \langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)^2 \rangle = \langle \sigma_i^2 \rangle - \langle \sigma_i \rangle^2 .$$

A *covariância* entre os spins σ_i e σ_j é

$$c_{ij}(\Lambda) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda} - \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda} \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda} . \quad (2.7)$$

Se σ_i e σ_j forem independentes, $c_{ij} = 0$. A independência de σ_i e σ_j é condição suficiente mas não necessária para $c_{ij} = 0$!

A variância e a covariância relacionam-se através de

$$var[\sigma_i \pm \sigma_j] = var[\sigma_i] + var[\sigma_j] \pm 2c_{ij} .$$

Definimos $g_{i,j}$, o coeficiente de *correlação* entre σ_i e σ_j , como a versão normalizada da covariância

$$g_{i,j} = \frac{c_{ij}}{\sqrt{var[\sigma_i] \cdot var[\sigma_j]}} ,$$

por conseqüência

$$-1 \leq g_{i,j} \leq 1 .$$

Observamos, devido a definição acima, que a correlação pode ser negativa ou positiva. Como indica o próprio nome, a correlação mede a influência, a interação de um spin sobre um outro spin do sistema. A ausência completa de correlação entre as variáveis confrontadas é indicada pelo valor zero do coeficiente de correlação ($g_{i,j} = 0$),

neste caso, teremos variáveis independentes. Em geral, a covariância é referida como correlação, notando que a distinção entre as duas medidas é apenas um fator de normalização.

É interessante notar que a susceptibilidade está relacionada com a soma de todas as correlações,

$$\chi(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\beta}{|\Lambda|} \sum_{i,j} c_{ij}(\Lambda) . \quad (2.8)$$

Susceptibilidade nula indica um modelo em que os spins estão totalmente descorrelacionados, ou seja, não há interação dos spins. No ponto crítico, ponto no diagrama de fase onde ocorre a transição de fase de um modelo, em geral, a susceptibilidade diverge. Neste ponto, a correlação entre os spins do sistema alcança seu valor máximo, evidenciando um fenômeno cooperativo de interação. Portanto, a divergência da susceptibilidade está associada com a existência de ordem de longo alcance (veja definição (2.11)). Por outro lado, a divergência da susceptibilidade também está relacionada com a quebra de simetria. Para vermos isto[Or], assumimos $T < T_c$ e $h \rightarrow +0$. Assim, teremos $M = \langle \sigma_i \rangle$. Se $T < T_c$ e $h \rightarrow -0$ teremos $M = -\langle \sigma_i \rangle$. Então, M é uma função descontínua em $h = 0$.

A partir de (2.8), notamos que a susceptibilidade é uma quantidade sempre positiva, pois

$$\chi(h) = N\beta \left\langle \left[\frac{1}{N} \sum_i \sigma_i - M(h) \right]^2 \right\rangle \geq 0 .$$

No caso de invariância translacional do modelo, considera-se somente a diferença $|i - j|$. Assim, uma soma na expressão (2.8) pode ser realizada, obtendo

$$\begin{aligned} \chi(h) &= \beta \sum_j c_{0j} \\ &= \beta \sum_j [\langle \sigma_0 \sigma_j \rangle - M^2(h)] . \end{aligned} \quad (2.9)$$

0 é o sítio deixado fixo como poderia ser qualquer outro e $\langle \sigma_j \rangle = \langle \sigma_0 \rangle = M(h)$.

Também no caso de invariância translacional, o coeficiente de correlação entre σ_i e σ_j dependerá apenas do vetor distância entre os sítios i e j (veja Baxter[Ba])

$$g_{i,j} = g(\vec{r}_{i,j}) ,$$

tal que $g(\vec{r})$ é a função de correlação. Expressaremos $\vec{r} = r \vec{k}$, sendo \vec{k} um vetor unitário. Desta forma,

$$g(r \vec{k}) \sim \begin{cases} r^{-\tau} e^{-r/\xi} & \text{se } T \neq T_c , \\ r^{-d+2-\eta} & \text{se } T = T_c . \end{cases} \quad (2.10)$$

quando $r \rightarrow \infty$. τ é um número, ξ o comprimento de correlação na direção \vec{k} , D a dimensão do sistema e η um expoente crítico que expressa a potência de decaimento.

O comprimento de correlação $\xi(T)$ é dependente da temperatura e torna-se infinito em T_c . Seu comportamento crítico é descrito pelos expoentes críticos do comprimento de correlação ν e ν' ,

$$\xi(T) \sim \begin{cases} t^{-\nu} & \text{para } t \downarrow 0, \\ (-t)^{-\nu'} & \text{para } t \uparrow 0, \end{cases}$$

dado em termos da temperatura reduzida $t = \frac{T-T_c}{T_c}$. Notamos que ξ depende da direção \vec{k} , no entanto, próximo a T_c , esta dependência desaparece e em distâncias grandes as correlações tornam-se isotrópicas. À medida que aproximamos de T_c , ξ torna-se o comprimento característico do sistema e de magnitude macroscópica. Quando detalhes microscópicos do sistema tornam-se insignificantes próximo a T_c , o fenômeno crítico é dito possuir *universalidade*.

Em $h = 0$, se o limite

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \sigma_j \rangle > 0, \quad (2.11)$$

ou seja, se existe e é diferente de zero dizemos que ocorre *ordem de longo alcance* no sistema. Notamos de (2.9) que se $\chi(h)$ for finito e existir ordem longo alcance, então

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \sigma_j \rangle = M^2(h).$$

Se M for zero, χ pode ser infinito caso $\langle \sigma_0 \sigma_j \rangle$ não seja uma função somável de j . Conforme [MW], o comportamento de $\langle \sigma_0 \sigma_j \rangle$ em $h = 0$ está relacionado com as singularidades da energia livre f . Desta forma, a função de correlação entre os spins é uma ferramenta importante no estudo da magnetização espontânea e da susceptibilidade a campo nulo.

A ordem de longo alcance no modelo de Ising unidimensional é nula para $T > 0$, indicando o fato deste modelo não apresentar transição de fase para temperatura não nula. Em duas dimensões, ocorre transição de fase no modelo de Ising com $h = 0$, portanto, sua ordem de longo alcance é não nula.

Dizemos que um sistema apresenta interação de curto alcance quando

$$\sum_r J_r |r|^2 < \infty. \quad (2.12)$$

Para sistemas com alcance finito ou com decaimento exponencial, a condição acima é claramente satisfeita. Para interações de decaimento com potência α , $|J_r| \propto r^{-\alpha}$, (2.12) é satisfeita desde que $\alpha > D + 2$, tal que D é a dimensão do sistema.

Em geral, fenômenos críticos são caracterizados por *quebra de simetria* (simetria entendida como uma medida de indistingüibilidade). Tipicamente, a fase mais simétrica ocorre no lado de temperatura mais alta da transição de fase, e a fase menos simétrica no lado de temperatura mais baixa. O hamiltoniano do sistema usualmente exibe todas as possíveis simetrias do sistema. Em temperaturas mais baixas, o sistema tende a estar confinado aos estados de mais baixa energia. Em temperaturas mais altas, as flutuações térmicas permitem ao sistema alcançar estados de energia mais elevada, e

assim mais simetrias do hamiltoniano são alcançadas. Observa-se, em geral, que em uma fase com simetria menor, existe ordem de longo alcance, e em outra fase com simetria maior existe apenas ordem de curto alcance e ocorre em temperaturas mais elevadas.

A transição ferromagnética é um exemplo de quebra de simetria, a simetria com relação à reversão das linhas do campo magnético conhecida como *up-down symmetry*. Na ausência de um campo magnético aplicado, a fase paramagnética não contém nenhuma magnetização espontânea, e é simétrica pela reversão das linhas do campo magnético; enquanto a fase ferromagnética possui uma magnetização espontânea e não mais é simétrica pela reversão das linhas do campo magnético.

3. Transição de fase e expoentes críticos

Quando alteramos variáveis termodinâmicas tais como temperatura, pressão, campo magnético etc. podem ocorrer mudanças abruptas nas propriedades do sistema. Referimos a isto como *transição de fase* e está associada a zeros da função de partição. No ponto de transição, o sistema exhibe comportamento singular, seu diagrama de fase apresenta analiticamente partes distintas. É importante notar que a transição de fase ocorre apenas no limite termodinâmico pois afinal a função de partição é a soma finita de funções analíticas (exponenciais da energia).

Exemplos de transições de fase são:

- transição entre as fases líquida/sólida/gasosa;
- transição entre as fases ferromagnética e paramagnética em materiais magnéticos;
- o surgimento da supercondutividade em certos metais quando esfriados abaixo de uma temperatura crítica;
- condensação quântica de fluidos bosônicos, tal como a condensação de Bose-Einstein e a transição de superfluido no hélio líquido.

A temperatura é o parâmetro de controle na transição de fase de sistemas clássicos. Nos sistemas quânticos, a transição de fase ocorre à temperatura nula. Assim, o parâmetro de controle é outra variável tal como o campo magnético, e a transição de fase ocorre à $T = 0$ quando varia-se o parâmetro de controle. Em $T = 0$ não há flutuações térmicas presentes e a transição de uma fase ordenada para uma fase desordenada é devida a flutuações da mecânica quântica, consequência do princípio da incerteza.

Devemos notar que os modelos unidimensionais de curto alcance, tanto os modelos quânticos quanto os clássicos, só apresentam transição de fase à temperatura nula. Já alguns modelos bidimensionais de solução conhecida, tais como os modelos de Ising, ferroeelétricos, oito vértices e modelos spin-3, apresentam de fato transição de fase para temperatura não nula. As soluções destes modelos bidimensionais, exceto o modelo ferroeelétrico, são obtidas somente na ausência de campo, $H = 0$.

Agora descrevemos um exemplo de transição de fase. Considere uma barra de ferro sob o efeito de um campo magnético intenso H , paralelo ao seu eixo. Depois de um

dado tempo, a barra estará completamente magnetizada. Em unidades apropriadas, podemos dizer que sua magnetização, M , é $+1$. Agora, diminuimos H para zero, M irá diminuir, mas não para zero. Ao invés, na ausência de campo teremos uma magnetização espontânea M_0 . M_0 é função monotônica da temperatura T . À medida que aumentamos T , M_0 decresce estritamente até se anular. Existirá uma temperatura T_c acima da qual M_0 será nulo e abaixo dela M_0 terá um valor não nulo. Tal temperatura T_c será denominada *temperatura crítica*. Em $H = 0$ e $T = T_c$ dizemos que ocorre uma transição de fase, e para todo $T < T_c$ a magnetização, $M(H)$, é descontínua quando variamos H de um valor negativo para um valor positivo. Veja a figura 1.

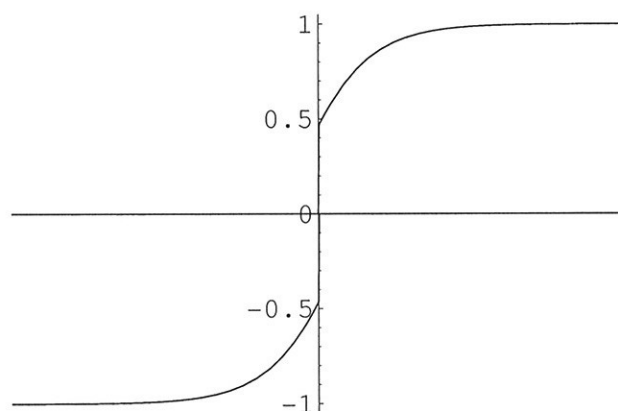


Figura 1: Magnetização M em função do campo H para $T < T_c$. Para $T > T_c$, M_0 será zero e M uma função contínua de H .

Descreveremos duas classificações das transições de fase[Wiki].

Classificação de Transições de Fase por Ehrenfest: Esta classificação foi a primeira tentativa de classificação das transições de fase.

- Uma transição de fase é de *primeira ordem* se a primeira derivada da energia livre de Gibbs com respeito a um parâmetro de ordem for descontínuo.
- É de *segunda ordem* uma transição de fase quando as funções obtidas através da segunda derivada da energia livre de Gibbs, susceptibilidade magnética e o calor específico, divergem, enquanto as primeiras derivadas são funções contínuas no ponto crítico.

Segundo a classificação de Ehrenfest, pode ocorrer transição de fase de ordem maior ou igual a três.

Moderna Classificação das Transições de Fase: Nesta classificação, existem somente duas grandes categorias.

- Uma transição de fase é de *primeira ordem* quando envolve calor latente. Durante tal transição, o sistema absorve ou libera uma quantidade fixa

de energia. Como a energia não pode ser transferida instantaneamente entre o sistema e o ambiente, transições de fase de primeira ordem são associadas a “regimes de fase de mistura” na qual uma parte do sistema completou a transição e a outra não. Este fenômeno pode ser observado em um pote com água fervendo. Nesta categoria estão as transições sólido/líquido/gás.

- Uma transição de fase é de *segunda ordem* quando for contínua, ou seja, quando não houver calor latente associada a esta transição. Exemplos de transição de fase de segunda ordem são: transição ferromagnética; transição de superfluido; e condensação de Bose-Einstein.

Suponha que $A(t)$ seja uma função descrevendo o comportamento de uma certa quantidade, em termos de $t = (1 - T/T_c)$, tal que T é a temperatura e T_c é a temperatura crítica. Então o limite

$$\lambda = \lim_{T \rightarrow T_c} \frac{\ln A(t)}{\ln t},$$

se existir, é chamado de *expoente crítico* associado a A . Neste caso, escrevemos $A \sim t^\lambda$.

Por exemplo, no *modelo de Curie-Weiss* temos para a magnetização na vizinhança do ponto crítico $M/M_0 = \pm\sqrt{3}t^{1/2}$. O expoente $1/2$, neste caso, é denominado β e $\sqrt{3}$ a *amplitude crítica*.

Abaixo listamos os expoentes críticos e as quantidades a estes relacionadas.

Capacidade Térmica	$C \sim t ^{-\alpha}$
Magnetização-parâmetro de ordem	$M \sim t ^\beta$
Susceptibilidade	$\chi \sim t ^\gamma$
Equação de Estado em T_c	$M \sim H ^{1/\delta}$
Comprimento de Correlação	$l \sim t ^{-\nu}$
Potência de decaimento em T_c	$p = D - 2 + \eta$

tal que D é a dimensão do sistema.

A *Teoria de escala* envolve a aplicação de análise dimensional para o estudo dos pontos críticos. As equações obtidas pela teoria de escala são

$$\begin{aligned} \gamma &= \nu(2 - \eta) && \text{Lei de Fisher,} \\ \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 && \text{Lei de Rushbrooke,} \\ \gamma &= \beta(\delta - 1) && \text{Lei de Widom,} \\ \nu D &= 2 - \alpha && \text{Lei de Josephson.} \end{aligned}$$

Com a teoria de escala notamos que dos seis expoentes críticos apenas dois são independentes.

A partir dos expoentes críticos apresentamos o conceito de classe de universalidade. Muitas propriedades dos sistemas na vizinhança das transições de fase não dependem de detalhes microscópicos, mas são compartilhadas por muitos outros sistemas similares. Dois modelos de mecânica estatística são equivalentes quanto a sua criticalidade

se possuírem os mesmos expoentes críticos. Esta relação estabelece uma classe de equivalência ou *classe de universalidade*.

Sabe-se que a universalidade dependa da dimensão do sistema e das simetrias de seu Hamiltoniano. Surgem, assim, dificuldades apontadas por Baxter[Ba] quando há mais de uma forma de descrever um mesmo sistema. Em uma descrição pode ocorrer uma simetria em que não ocorre em outra. Temos então diferentes expoentes críticos para um mesmo sistema dependendo de como descrevê-lo.

Desta forma, o modelo de oito vértices bidimensional apresenta expoentes críticos que variam continuamente com os parâmetros do Hamiltoniano violando a hipótese de universalidade. Porém, acredita-se que este modelo satisfaça a hipótese de escala.

CAPÍTULO 3

Modelo de Oito Vértices

1. Introdução

Numa rede retangular, desenhamos ligações entre os primeiros vizinhos. Permittimos cada ligação estar em dois diferentes estados de acordo com sua orientação e introduzimos uma flexa na ligação para indicar as duas orientações possíveis: para cima (direita) ou para baixo (esquerda) nas ligações verticais (horizontais). Assim, os estados possíveis da rede são todas as configurações de flexas na rede. O conjunto de quatro ligações orientadas encontrando um sítio da rede é chamado de uma configuração do vértice, ou, simplesmente, *vértice*. Há um total de dezesseis diferentes vértices.

Se associarmos para cada configuração de vértices j ($j = 1, 2, \dots, 16$) uma energia ϵ_j e um correspondente peso estatístico $w_j = \exp(-\beta\epsilon_j)$, obteremos um sistema chamado de *modelo 16-vértices* ou *modelo ferroelétrico geral*. O modelo 16-vértices é dito simétrico se for invariante pela reversão do sentido de todas as flexas na rede [Ka].

O modelo de oito vértice em uma rede retangular é obtido do modelo de 16-vértices, permitindo apenas aquelas configurações com um número par de flechas apontando para cada vértice (veja figura 1). Então, do total de dezesseis, teremos oito possíveis diferentes configurações das flechas em cada vértice da rede (assim surge o nome do modelo). A seguir, associamos as energias ϵ_i ($i = 1, \dots, 8$) àquelas oito configurações dos vértices e o problema será o cálculo da função de partição

$$\begin{aligned} Z_{8v} &= \sum (w_1)^{n_1} (w_2)^{n_2} \dots (w_8)^{n_8} \\ &= \sum \exp\left(-\beta \sum_{j=1}^8 n_j \epsilon_j\right), \end{aligned} \tag{3.1}$$

tal que a soma \sum é sobre todas as configurações permitidas na rede, e n_j é o número de vértices do tipo j . Note que $Z_{8v} = Z_{8v}(\{w_j\})$ é uma função dos oito pesos de Boltzmann $w_j = e^{-\beta\epsilon_j}$.

O estudo do fenômeno de transição de fase de diversos modelos e de suas propriedades físicas inicia-se pelo cálculo da função de partição. Estes modelos podem ser descritos utilizando-se várias técnicas: linguagem de grafos planares ou cobertura de dímeros; teoria de campo fermionico via integrais de Grassmann; o formalismo dos operadores de fermions; método da matriz de transferência entre outros.

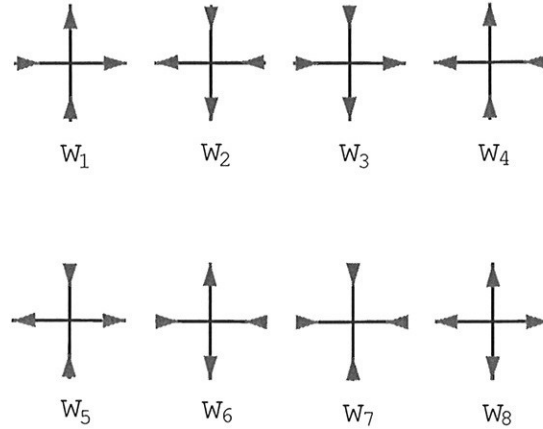


Figura 1: Oito vértices.

O modelo de oito vértices foi introduzido para descrever cristais com ligações de hidrogênio. Ele é exatamente solúvel [LSM] (veja a solução em (C.6)) sob a condição de fermions livres

$$w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8 = 0 .$$

Se impusermos ao modelo invariabilidade devido à reversão do sentido de todas as flexas na rede, teremos

$$w_1 = w_2 , \quad w_3 = w_4 ,$$

$$w_5 = w_6 , \quad w_7 = w_8 .$$

Na terminologia ferroelétrica, isto implica ausência de campo elétrico (condição de “campo nulo”).

Em mecânica estatística, vários modelos estão associados ao modelo de oito vértices, podemos citar, dentre outros, o modelo de Heisenberg unidimensional quântico e o modelo de Ising bidimensional. Fan e Wu[FW] foram os que primeiro calcularam a função de partição do modelo de oito vértice restrito à condição de fermions livres satisfeita por estes vértices. Assim, todos estes modelos de solução conhecida são intrinsecamente dependentes desta condição.

Pretendemos ir além desta condição, controlando cotas superiores e inferiores para a função de partição, evitando, assim, a resolução exata. Isto nos dá parâmetros na comparação da solução deste modelo via o *Ansatz de Bethe*. Como em Stuart Samuel[SS], utilizaremos as integrais de Grassmann, variáveis que anti-comutam entre si, para formularmos a função de partição como um Pfaffiano. Em seguida, com o auxílio do tratamento conhecido das matrizes circulantes, chegaremos aos resultados desejados.

A condição de fermions livres faz com que a interação quártica, que surge no caso geral, anule-se . Escrevemos a exponencial da interação quártica como uma integral

gaussiana de exponenciais de termos quadráticos. Com isto, o modelo adquire características não-homogêneas e alguns pesos passam a depender do sítio da rede.

2. Oito Vértices

Seja w_i ($i = 1, \dots, 8$) os pesos dos oito vértices deste modelo. Considere agora uma rede retangular Λ finita de \mathbb{Z}^2 com condições livres de fronteira (uma generalização para, por exemplo, um toro é imediata). Uma cobertura de Λ com os oito vértices é obtida quando em cada sítio de Λ colocamos um dos oito vértices com seu centro situado nos sítios da rede Λ . O conjunto \mathcal{T} de coberturas admissíveis/permitidas são aquelas cujos arranjos/disposições de w_i 's (veja figura 2) são tais que as linhas pretas nunca tenham um final aberto, admitindo somente caminhos fechados (para os sítios na fronteira, nem todos os oito vértices podem ocorrer).

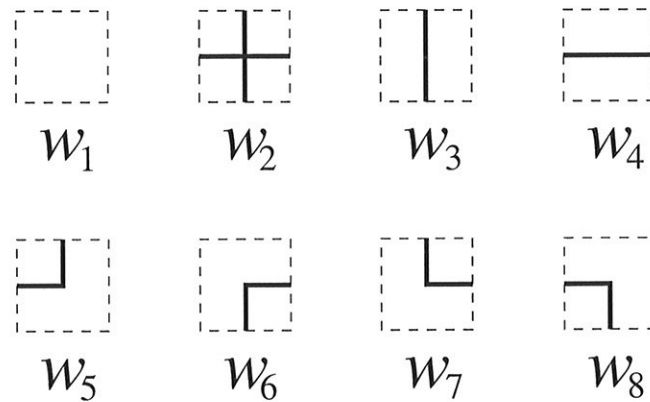


Figura 2: Os oito vértices com seus pesos w_i . A correspondência com a figura 1 é obtida como segue: linha vazia (cheia) para as flechas apontando para a direita (esquerda) ou para cima (baixo).

A função de partição do modelo de oito vértices é a soma sobre todas as coberturas permitidas $t \in \mathcal{T}$ na rede Λ e o peso de Boltzmann para uma particular cobertura t é dado pelo produto dos pesos w_i usados nesta cobertura. A função de partição do modelo de oito vértices é dada por

$$Z_{8v} = \sum_{t \in \mathcal{T}} \prod_{i=1}^8 (w_i)^{n_i(t)} . \quad (3.2)$$

$n_i(t)$ denota o número de vértice w_i que aparece na cobertura t .

Observamos na figura (2) que sempre teremos

$$n_5(t) = n_6(t) ,$$

$$n_7(t) = n_8(t) ,$$

na cobertura de uma rede. Desta forma, (3.2) é igual a

$$Z_{8v} = \sum_{t \in T} (w_1)^{n_1(t)} (w_2)^{n_2(t)} (w_3)^{n_3(t)} (w_4)^{n_4(t)} (w_5 w_6)^{n_5(t)} (w_7 w_8)^{n_7(t)}. \quad (3.3)$$

Portanto, se $w_5 \neq w_6$ e $w_7 \neq w_8$, redefinimos

$$\begin{aligned} \bar{w}_5 = \bar{w}_6 &= \sqrt{w_5 w_6}, \\ \bar{w}_7 = \bar{w}_8 &= \sqrt{w_7 w_8}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

na função de partição do modelo de oito vértices (3.3). Assim, teremos

$$Z_{8v} = \sum_{t \in T} (w_1)^{n_1(t)} (w_2)^{n_2(t)} (w_3)^{n_3(t)} (w_4)^{n_4(t)} (\bar{w}_5 \bar{w}_6)^{n_5(t)} (\bar{w}_7 \bar{w}_8)^{n_7(t)}. \quad (3.5)$$

Notamos em (3.5) que Z é invariante pela transformação (3.4).

3. Variáveis de Grassmann

As *variáveis de Grassmann* são variáveis que anticomutam entre si.

Consideraremos a álgebra de Grassmann de 4^N dimensões com os geradores

$$\{\phi_1, \dots, \phi_j, \dots, \phi_N\},$$

tal que

$$\phi_j = \begin{pmatrix} \phi_{j,1} \equiv H_j \\ \phi_{j,2} \equiv V_j \\ \phi_{j,3} \equiv \bar{H}_j \\ \phi_{j,4} \equiv \bar{V}_j \end{pmatrix}$$

satisfazendo as relações usuais de anti-comutação

$$\{\phi_{i,l}, \phi_{j,k}\} = \phi_{i,l} \phi_{j,k} + \phi_{j,k} \phi_{i,l} = 0, \quad (3.6)$$

para $\forall (i, j) \in \{1, 2, \dots, N\}$ e $\forall (l, k) \in \{1, 2, 3, 4\}$. Isto implica na propriedade *nilpotente*

$$(\phi_{j,k})^2 = 0, \quad \forall j \in \{1, 2, \dots, N\} \text{ e } \forall k \in \{1, 2, 3, 4\}.$$

A integração das variáveis de Grassmann pode ser realizada e obedece as seguintes regras

$$\begin{cases} \int dH_j H_j = 1, \\ \int dH_j = 0. \end{cases}$$

Para o conjunto de N variáveis $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$ temos

$$\int d\phi (\phi_1 \phi_2 \dots \phi_N) = 1$$

e

$$\int d\phi (\{\phi_j\}) = 0,$$

tal que $\{\phi_j\}$ é o produto dos $j < N$ elementos de $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N$.

Utilizamos acima a seguinte notação para representar a integração das variáveis de Grassmann

$$\int d\phi^N(\dots) = (-1)^N \int d\phi_N d\phi_{N-1} \dots d\phi_2 d\phi_1(\dots)$$

tal que $d\phi_j = dH_j dV_j d\bar{H}_j d\bar{V}_j$. N será identificado com o número de sítios da rede Λ .

A diferenciação com respeito às variáveis de Grassmann é definida pela identificação

$$\partial_{H_j} \equiv \int dH_j ,$$

pois

$$\begin{aligned} \partial_{H_j} 1 &= \int dH_j 1 = 0 , \\ \partial_{H_j} H_j &= \int dH_j H_j = 1 . \end{aligned}$$

Escrevemos uma função de duas variáveis como

$$f[H_j, \bar{H}_j] = f_0 + f_1 \bar{H}_j + \tilde{f}_1 H_j + f_{12} H_j \bar{H}_j .$$

Note que a série de Taylor possui até termos lineares em cada variável de Grassmann. Sua diferenciação é

$$\begin{aligned} \partial f &= \tilde{f}_1 + f_{12} \bar{H}_j , \\ \bar{\partial} f &= f_1 - f_{12} H_j . \end{aligned}$$

A função mais geral construída com as variáveis $\phi_{j,k}$ é da forma

$$\begin{aligned} f &= a_0 + \sum_{j,k} a_{j,k} \phi_{j,k} + \sum_{(j,k) < (j_1, k_1)} a_{j,k} \phi_{j,k} \phi_{j_1, k_1} + \dots + \\ & a_{(1,1)(1,2)(1,3)\dots(N,4)} \phi_{1,1} \phi_{1,2} \phi_{1,3} \phi_{1,4} \phi_{2,1} \dots \phi_{N,4} , \end{aligned}$$

sendo os a 's números reais ou complexos. Funções destas variáveis são definidas via série de Taylor que termina na $4N$ -ésima ordem devido à propriedade (3.6).

A integral de f é definida por

$$\int d\phi(f) = a_{(1,1)(1,2)(1,3)\dots(N,4)} .$$

O único termo de f que contribui na integral é aquele em que cada $\phi_{j,k}$ ocorre precisamente uma vez. O sinal é determinado pela ordem.

A seguir, definiremos o Pfaffiano e o determinante de uma matriz Q .

DEFINIÇÃO 1 (Determinante). *O determinante da matriz Q de ordem N é dado por:*

$$\det(Q) = \sum_P \nu_P Q_{1,p_1} \dots Q_{N,p_N} . \quad (3.7)$$

A soma é realizada sobre todas permutações dos números $1, 2, \dots, N$, são $N!$ termos; P é a permutação p_1, p_2, \dots, p_N dos índices $1, 2, \dots, N$ e $\nu_P = \pm 1$ é o sinal da permutação.

DEFINIÇÃO 2 (Pfaffiano). O Pfaffiano da matriz Q de ordem N é dado por:

$$\text{Pf}(Q) = \sum_{\pi} \nu_{P(\pi)} Q_{p_1, p_2} \cdots Q_{p_{N-1}, p_N} . \quad (3.8)$$

A soma é realizada sobre todas partições dos números $1, 2, \dots, N$ em $N/2$ pares desordenados; $P(\pi)$ é a permutação p_1, p_2, \dots, p_N dos índices $1, 2, \dots, N$ tal que $|p_1 p_2| p_3 p_4| \dots |p_{N-1} p_N|$ é uma descrição de uma partição π e $\nu_{P(\pi)} = \pm 1$ é o sinal da permutação.

Se Q for uma matriz antissimétrica, $Q_{ij} = -Q_{ji}$, o fator $\nu_{P(\pi)}$ de (3.8) será cancelado. Assim, todos os termos da expansão (3.8) serão positivos. Esta positividade é importante e será usada posteriormente.

As variáveis de Grassmann possui as seguintes propriedades:

$$\int d\phi d\phi^\dagger \exp \left(\sum_{\alpha\beta} \phi_\alpha Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^\dagger \right) = \det(Q) \quad (3.9)$$

e

$$\int d\phi \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \phi_\alpha Q_{\alpha\beta} \phi_\beta \right) = \text{Pf}(Q) , \quad (3.10)$$

tal que em (3.9) Q deve ser uma matriz de ordem par e em (3.10) Q deve ser uma matriz antissimétrica.

O poder matemático das variáveis de Grassmann citado por S. Samuel[SS] pode ser observado pela

PROPOSIÇÃO 3.1. Seja Q uma matriz antissimétrica de ordem par. Então

$$\text{Pf}(Q) = \pm \sqrt{\det(Q)} .$$

DEMONSTRAÇÃO. Usamos a equação (3.9), reescrevemos

$$\phi_\alpha = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\phi_\alpha^{(1)} + i\phi_\alpha^{(2)} \right) , \quad \phi_\alpha^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\phi_\alpha^{(1)} - i\phi_\alpha^{(2)} \right) .$$

Desta forma,

$$\begin{aligned} \phi_\alpha \phi_\alpha^\dagger &= \frac{1}{2} \left[\left(\phi_\alpha^{(1)} \right)^2 - i\phi_\alpha^{(1)} \phi_\alpha^{(2)} + i\phi_\alpha^{(2)} \phi_\alpha^{(1)} + \left(\phi_\alpha^{(2)} \right)^2 \right] \\ &= i\phi_\alpha^{(2)} \phi_\alpha^{(1)} \end{aligned}$$

e

$$d\phi_\alpha d\phi_\alpha^\dagger = -id\phi_\alpha^{(1)} d\phi_\alpha^{(2)} ,$$

pois $\left(\phi_\alpha^{(1)} \right)^2 = \left(\phi_\alpha^{(2)} \right)^2 = 0$ e $\phi_\alpha^{(1)} \phi_\alpha^{(2)} = -\phi_\alpha^{(2)} \phi_\alpha^{(1)}$.

Notamos que $-(i/2)\phi_\alpha^{(1)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(2)} = -(i/2)Q_{\alpha\beta} \phi_\alpha^{(1)} \phi_\beta^{(2)} = (i/2)Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(2)} \phi_\alpha^{(1)} = (i/2)Q_{\beta\alpha} \phi_\alpha^{(2)} \phi_\beta^{(1)}$, assim $-(i/2)\phi_\alpha^{(1)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(2)} + (i/2)\phi_\alpha^{(2)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(1)} = (i/2)\phi_\alpha^{(2)} (Q_{\beta\alpha} + Q_{\alpha\beta}) \phi_\beta^{(1)} = 0$ pois Q é uma matriz antissimétrica, $Q_{\alpha\beta} + Q_{\alpha\beta} = 0$.

Então,

$$\begin{aligned} \phi_\alpha Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^\dagger &= (1/2) \phi_\alpha^{(1)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(1)} + (1/2) \phi_\alpha^{(2)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(2)} - (i/2) \phi_\alpha^{(1)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(2)} + \\ &\quad (i/2) \phi_\alpha^{(2)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(1)} \\ &= (1/2) \phi_\alpha^{(1)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(1)} + (1/2) \phi_\alpha^{(2)} Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^{(2)} . \end{aligned}$$

Desta forma, o exponencial de $\phi_\alpha Q_{\alpha\beta} \phi_\beta^\dagger$ fatora-se em dois exponenciais e a integral em duas integrais da forma (3.10), ou seja, $\det(Q) = (\text{Pf}(Q))^2$. ■

4. Função de Partição - Z_{8v}

O objetivo desta seção é demonstrar a fórmula (3.26) do Teorema 3.5. Para isto vamos usar alguns resultados preliminares.

A representação da função de partição através das variáveis de Grassmann é devida a Stuart Samuel[SS]. Ela foi escolhida pois se apresenta de forma mais simples e elegante, principalmente quando escrita na forma integral. A ação envolvendo termos locais e vizinhos é facilmente interpretada e manipulada, graças à comutatividade de termos pares destas variáveis.

No trabalho de Christof Gatttringer[Ga] é tratado o modelo de oito vértices generalizado em que os vértices são acoplados a um campo variável local. Sua função de partição é escrita como integral sobre as variáveis de Grassmann e explicitamente calculado todos os termos de sua expansão. O resultado final é expresso em função da soma de todos os grafos fechados ou *loops*.

Vale ressaltar que diferentemente de S. Samuel e C. Gatttringer, estamos considerando os oito vértices totalmente independentes entre si. A condição de fermions livres é um caso particular.

Existe também a formulação do modelo de oito vértices utilizando os operadores de fermions, definidos pelas relações

$$\begin{aligned} \{b_i, b_j^\dagger\} &= b_i b_j^\dagger + b_j^\dagger b_i = \delta_{i,j} , \\ \{b_i, b_j\} &= \{b_i^\dagger, b_j^\dagger\} = 0 . \end{aligned} \tag{3.11}$$

b_j^\dagger é operador de criação e b_j de aniquilação. Devido a relação de anti-comutação (3.11) deve-se utilizar o teorema de Wick para ordenar os operadores de criação à direita e os operadores de aniquilação à esquerda. Esta opção encontra-se no apêndice. Comparando estas duas formulações, notamos que com as variáveis de Grassmann o resultado obtido é mais rápido e direto.

A idéia é substituir cada sítio j da rede por 4 variáveis de Grassmann $\bar{V}_j, \bar{H}_j, V_j$ e H_j e arranjarmos um par de variáveis de Grassmann para cada ligação.

A função de partição do modelo de oito vértices pode ser gerada pelas variáveis de Grassmann através da expressão

$$\begin{aligned}
 Z_{8v} = & \int d\phi \left(\prod_{j \in \Lambda} \left[\frac{w_2}{4} (\bar{H}_j H_j H_{j+1} \bar{H}_{j-1} + \bar{H}_j \bar{V}_j V_{j+1} H_{j+1} + \bar{H}_j V_j H_{j+1} \bar{V}_{j-1} + \right. \right. \\
 & H_j \bar{V}_j \bar{H}_{j-1} V_{j+1} + H_j V_j \bar{V}_{j-1} \bar{H}_{j-1} + \bar{V}_j V_j V_{j+1} \bar{V}_{j-1}) + \\
 & \frac{w_3}{2} H_j \bar{H}_j (V_{j+1} \bar{V}_j + V_j \bar{V}_{j-1}) + \frac{w_4}{2} \bar{V}_j V_j (\bar{H}_j H_{j+1} + \bar{H}_{j-1} H_j) + \\
 & \frac{w_5}{2} V_j \bar{H}_j (\bar{H}_{j-1} H_j + \bar{V}_j V_{j+1}) + \frac{w_6}{2} H_j \bar{V}_j (\bar{H}_j H_{j+1} + \bar{V}_{j-1} V_j) + \\
 & \frac{w_7}{2} H_j V_j (\bar{H}_j H_{j+1} + \bar{V}_j V_{j+1}) + \frac{w_8}{2} \bar{H}_j \bar{V}_j (\bar{H}_{j-1} H_j + \bar{V}_{j-1} V_j) - \\
 & \left. \left. w_1 H_j \bar{H}_j V_j \bar{V}_j \right] \right)
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

As variáveis de Grassmann, \bar{V}_j , \bar{H}_j , V_j e H_j , estão dispostas como exibido na figura 3.

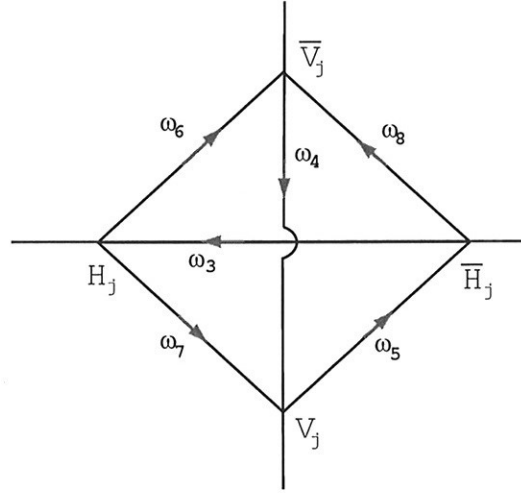


Figura 3: Variáveis de Grassmann no ponto (j) da rede. Em cada sítio da rede inicial substituiremos por esta célula com 4 variáveis.

A interpretação de Z a partir da expressão (3.12) segue da figura acima. Por exemplo, para gerar w_6 temos as conexões locais $H_j \bar{V}_j$ do sítio j e as duas contribuições vizinhas $(\bar{H}_j H_{j+1} + \bar{V}_{j-1} V_j)$. Como cada contribuição vizinha tem 1 como fator precisamos dividir por 2 para obtermos a contribuição correta para w_6 .

Definiremos a função ação S da seguinte forma

$$S = \sum_{j \in \Lambda} S_j . \tag{3.13}$$

tal que

$$S_j = \frac{\sqrt{w_2}}{2} [\bar{H}_j H_{j+1} + \bar{H}_{j-1} H_j + \bar{V}_j V_{j+1} + \bar{V}_{j-1} V_j] - \frac{w_3}{\sqrt{w_2}} H_j \bar{H}_j - \frac{w_4}{\sqrt{w_2}} V_j \bar{V}_j - \frac{w_5}{\sqrt{w_2}} \bar{H}_j V_j - \frac{w_6}{\sqrt{w_2}} \bar{V}_j H_j - \frac{w_7}{\sqrt{w_2}} V_j H_j - \frac{w_8}{\sqrt{w_2}} \bar{V}_j \bar{H}_j - \frac{\Delta}{w_2} H_j \bar{H}_j V_j \bar{V}_j, \quad (3.14)$$

sendo

$$\Delta = w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8. \quad (3.15)$$

DEFINIÇÃO 3 (Condição de Fermions Livres). *Os oito vértices w_1, w_2, \dots, w_8 satisfazem a condição de fermions livres se*

$$\begin{aligned} \Delta &= w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8 \\ &= 0. \end{aligned}$$

Note que interação quártica das variáveis de Grassmann, em (3.14), é proporcional a Δ .

A ação S pode ser reagrupada nos termos $S = S_h + S_m + S_c + S_q$ com os índices *hopping, monomer, corner e quartic*

$$\begin{aligned} S_h &= \frac{\sqrt{w_2}}{2} \sum_{j \in \Lambda} [\bar{H}_j H_{j+1} + \bar{H}_{j-1} H_j + \bar{V}_j V_{j+1} + \bar{V}_{j-1} V_j] \\ &= \sqrt{w_2} \sum_{j \in \Lambda} [H_j H_{j+1} + \bar{V}_j V_{j+1}] \\ S_m &= \frac{-1}{\sqrt{w_2}} \sum_{j \in \Lambda} [w_3 H_j \bar{H}_j + w_4 V_j \bar{V}_j] \\ S_c &= \frac{-1}{\sqrt{w_2}} \sum_{j \in \Lambda} [w_5 \bar{H}_j V_j + w_6 \bar{V}_j H_j + w_7 V_j H_j + w_8 \bar{V}_j \bar{H}_j] \\ S_q &= \frac{-\Delta}{w_2} \sum_{j \in \Lambda} H_j \bar{H}_j V_j \bar{V}_j \end{aligned}$$

A ação possui termos quadráticos e termos quárticos na variáveis de Grassmann. S. Samuel considerou apenas o caso particular de fermions livres ($\Delta = 0$) na qual não surge o termo quártico S_q na ação S .

A partir de (3.12), com a definição de S e utilizando as propriedades das variáveis de Grassmann, é verdadeira a proposição

PROPOSIÇÃO 3.2. *A função de partição do modelo de oito vértices em função da ação S é dada por*

$$Z_{8v} = \int d\phi (e^S). \quad (3.16)$$

tal que S é dado por (3.13).

DEMONSTRAÇÃO. De (3.12), segue

$$\begin{aligned} Z_{8v} &= \int d\phi \left(\prod_{j \in \Lambda} \left[S_q(j) + \frac{1}{2} (S_j)^2 \right] \right) \\ &= \int d\phi \left(\prod_{j \in \Lambda} \left[1 + S_j + \frac{1}{2} (S_j)^2 \right] \right) \\ &= \int d\phi \left(\prod_{j \in \Lambda} e^{S_j} \right) \end{aligned}$$

pois $(S_j)^k = 0$, para $k \geq 3$. Note que $\int d\phi (f(\phi_{j,k})) = \int d\phi (1 + f(\phi_{j,k}))$.

Para cada j , temos a contribuição de e^{S_j} na integral. Em e^{S_j} só sobrevivem aqueles termos em que ocorre exatamente 4 variáveis de Grassmann distintos. Estes termos são $[S_q(j) + \frac{1}{2} (S_j)^2]$ e estão na forma $\bar{H}H\bar{V}V$ com os índices correspondentes.

Sendo os termos em S_j termos de ordem par nas variáveis de Grassmann, estes comutam entre si, então

$$\begin{aligned} \prod_{j \in \Lambda} e^{S_j} &= \exp \left\{ \sum_{j \in \Lambda} S_j \right\} \\ &= \exp \{ S \} . \end{aligned}$$

Se as variáveis de fermions (3.11) fossem utilizadas, esta propriedade não seria verdadeira devido sua relação de anti-comutação. ■

Notamos em Z uma interação quártica das variáveis de Grassmann. Esta interação anula-se quando os oito vértices satisfazem a condição de fermions livres.

Em seguida, vamos dividir $S_q(j)$ em dois termos quadráticos utilizando a integral gaussiana. Denotando por

$$\begin{aligned} a &= H_j \bar{H}_j , \\ b &= V_j \bar{V}_j \end{aligned}$$

e usando

$$a^2 = b^2 = 0 ; [a, b] = ab - ba = 0$$

temos

$$e^{S_q(j)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2 + \sqrt{\alpha}(a-b)x} dx \quad (3.17)$$

com $S_q(j) = \frac{-\Delta}{w_2} H_j \bar{H}_j V_j \bar{V}_j = -\alpha ab$ e $\alpha = \frac{\Delta}{w_2}$.

Incorporando os dois novos termos quadráticos $(x\sqrt{\alpha}a)$ e $(-x\sqrt{\alpha}b)$ em $S_m(j)$ obtemos

$$S_m(j) = -\frac{1}{\sqrt{w_2}} (w'_3 H_j \bar{H}_j + w'_4 V_j \bar{V}_j)$$

tal que

$$\begin{cases} w'_3 = w_3 - \sqrt{\Delta}x \\ w'_4 = w_4 + \sqrt{\Delta}x, \end{cases}$$

sob a integração gaussiana. Notamos, com isto, que os vértices w_3 e w_4 perdem a característica de homogêneos e passam a depender dos sítios da rede. Os outros vértices permanecem da mesma forma.

Assim,

$$e^{S_j} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2} e^{S_j(x)} dx \quad (3.18)$$

com

$$\begin{aligned} S_j(x) = & w_2 [\bar{H}_j H_{j+1} + \bar{V}_j V_{j+1}] - w'_3 H_j \bar{H}_j - w'_4 V_j \bar{V}_j - \\ & w_5 \bar{H}_j V_j - w_6 \bar{V}_j H_j - w_7 V_j H_j - w_8 \bar{V}_j \bar{H}_j. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Em $S_j(x)$ há somente termos quadráticos nas variáveis de Grassmann, pois S_q foi incorporado à S_m .

PROPOSIÇÃO 3.3.

$$Z_{8v} = \mathbb{E}_\mu(Z_1) \quad (3.20)$$

tal que

$$\mathbb{E}_\mu(\cdot) = \int_{-\infty}^{\infty} (\cdot) \left(\prod_{j=1}^N d\mu(x_j) \right) \quad (3.21)$$

é a esperança com respeito a medida gaussiana,

$$d\mu(x_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x_j^2} dx_j$$

e

$$Z_1 = \int d\phi \left(\prod_j^N e^{S_j(x)} \right) = \int d\phi \left(e^{\sum_{j=1}^N S_j(x)} \right).$$

DEMONSTRAÇÃO. Substituindo (3.18) em (3.16), temos

$$\begin{aligned} Z_{8v} &= \int d\phi (e^S) = \int d\phi \left(\prod_{j=1}^N e^{S_j} \right) \\ &= \int d\phi \left[\prod_{j=1}^N \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x_j^2} e^{S_j(x_j)} dx_j \right) \right] \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^N d\mu(x_j) \right) Z_1 \\ &= \mathbb{E}_\mu(Z_1) \end{aligned}$$

■

Tornaremos $S_j(x)$ uma função anti-simétrica subtraindo de (3.19) os mesmos termos mas com ordem inversa das variáveis de Grassmann e dividindo por 2. Utilizaremos as notações matriciais para expressar $S_j(x)$, mesma notação que C. Gattlinger[**Ga**] usou.

Definiremos matrizes $P_{\pm 1}$ e $P_{\pm 2}$ (matrizes 4×4)

$$\begin{aligned} P_{+1}(i, j) &\equiv \sqrt{w_2} \delta_{i,1} \delta_{j,2} \quad , \quad P_{-1}(i, j) \equiv -\sqrt{w_2} \delta_{i,2} \delta_{j,1} \\ P_{+2}(i, j) &\equiv \sqrt{w_2} \delta_{i,3} \delta_{j,4} \quad , \quad P_{-2}(i, j) \equiv -\sqrt{w_2} \delta_{i,4} \delta_{j,3} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Estas matrizes obedecem $P_\nu^t = -P_{-\nu}$ (t denota transposição). Também definiremos

$$K_j^{-1} = \frac{1}{\sqrt{w_2}} \begin{bmatrix} 0 & w_7 & -w_3'(x_j) & w_6 \\ -w_7 & 0 & w_5 & -w_4'(x_j) \\ w_3'(x_j) & -w_5 & 0 & w_8 \\ -w_6 & w_4'(x_j) & -w_8 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

Usando a notação matricial

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N S_j(x) &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} (\phi_i)^t Q(i, j) \phi_j \\ &= \frac{1}{2} (\phi, Q\phi) \end{aligned}$$

tal que

$$Q = -K^{-1} + A \quad (3.24)$$

com

$$\begin{aligned} K^{-1}(i, j) &= K_j^{-1} \delta_{i,j} \\ &= \text{diag}(K_1^{-1}, K_2^{-1}, \dots, K_N^{-1}) \end{aligned}$$

a matriz bloco diagonal representando a estrutura interna e

$$\begin{aligned} A(i, j) &= \sum_{\nu=\pm 1}^{\pm 2} P_\nu \delta_{i+\nu, j} \\ &= \sqrt{w_2} \{-\Pi \otimes X + \Pi^{-1} \otimes X^t - \Pi^m \otimes Y + \Pi^{-m} \otimes Y^t\} \end{aligned}$$

a matriz de ligação dos sítios da rede retangular $i, j \in \{1, 2, \dots, N\}$. $N = nm$. Temos que Π é uma matriz quadrada de ordem N dada por

$$\Pi = \begin{bmatrix} 0 & I_{N-1} \\ -1 & 0^t \end{bmatrix} ,$$

tal que I_k é a matriz identidade de ordem k e 0 é a matriz coluna nula. Π surge da matriz identidade por um deslocamento da diagonal principal de uma unidade para cima. Veja a representação matricial de X e Y em (C.13).

PROPOSIÇÃO 3.4.

$$\begin{aligned}
 Z_1 &= \int d\phi \left(e^{\frac{1}{2}(\phi, Q\phi)} \right) \\
 &= (-1)^\Lambda \text{Pf}(Q) \\
 &= (-1)^\Lambda \sqrt{\det(Q)}
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

DEMONSTRAÇÃO. Depois de antissimetrizada a matriz S , Z_1 pode ser escrita como o Pfaffiano de uma matriz dada pela raiz quadrada de Q (veja 3.10). ■

Quando $\Delta = 0$, K^{-1} torna-se uma matriz cujos blocos em sua diagonal ficam independentes de x e portanto idênticos. Com isto, a matriz Q passa a ser diagonalizável por uma transformação de Fourier.

Finalmente, temos

TEOREMA 3.5 (Função de Partição do Modelo de Oito Vértices). *A função de partição do modelo de oito vértices expressa em função do pfaffiano (considerando $\Lambda = 4N$ par) é dada por*

$$\boxed{Z_{8v} = \mathbb{E}_\mu(\text{Pf}(Q))} \tag{3.26}$$

com a média $\mathbb{E}_\mu(\cdot)$ definida em (3.21) e Q dada por (3.24).

DEMONSTRAÇÃO. Basta substituírmos (3.25) em (3.20). ■

CAPÍTULO 4

Modelo de Heisenberg

Analisaremos, neste capítulo, primeiramente o modelo XYh, apresentando sua solução e o cálculo de alguns de seus expoentes críticos. A seguir, analisaremos o modelo XYZh calculando seus oito vértices para análise em capítulos posteriores.

1. Modelo XYh

Pretendemos, nesta seção, analisar o modelo quântico unidimensional XYh.

Apresentamos a solução do modelo XYh e suas propriedades pelo estudo de alguns de seus expoentes críticos. Veremos que ocorre uma transição de fase de segunda ordem na variável h em $T = 0$. A solução do modelo XYh inicia-se pelo mapeamento do modelo unidimensional em uma rede bidimensional através da utilização da fórmula de Trotter. Faremos a nova dimensão, indexada por m , tender a infinito colhendo termos da solução em suas primeiras ordens de expansão. Observamos que os oito vértices correspondentes ao modelo XYh satisfazem à condição de fermions livres. Isto possibilita o cálculo de sua função de partição.

Os expoentes críticos deste modelo serão utilizados para uma posterior comparação com o modelo XYZh.

1.1. Hamiltoniano. Lieb, Shultz e Mattis[LSM] introduziram o modelo XYh para estudar a influência da simetria, ou sua ausência, em um sistema de muitos corpos. As variáveis independentes deste sistema são as constantes de acoplamento e o campo magnético externo.

O Hamiltoniano do *modelo anisotrópico XYh* em uma rede unidimensional com n sítios é escrito como

$$H_n = - \sum_{i=1}^n \left\{ J^x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J^y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \frac{h}{2} (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) \right\}. \quad (4.1)$$

Denotando por σ^a , ($a = x, y, z$) as matrizes de Pauli

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

H é uma matriz que atua sobre o espaço vetorial $\underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2}_{n\text{-termos}}$ dado pela combinação linear de termos da forma $I \otimes \dots \otimes \sigma^a \otimes \sigma^a \otimes \dots \otimes I$ tal que I é a matriz 2×2 identidade.

$$\sigma_i^a = \|\| I \otimes \dots \otimes \sigma^a \otimes \dots \otimes I \|\|$$

indica que a matriz de Pauli σ^a está inserida na i -ésima posição do produto.

Note as seguintes propriedades de comutação

$$[\sigma_i^a, \sigma_j^b] = 2i\delta_{i,j}\epsilon^{a,b,c}\sigma_i^c, \quad (4.3)$$

e

$$(\sigma^a)^2 = 1.$$

Usaremos as condições de fronteira toroidal.

Este é um modelo quântico pelo fato das matrizes de Pauli não comutarem uma com as outras.

Vários modelos clássicos de dimensão D na mecânica estatística possuem modelos quânticos matematicamente equivalentes de dimensão $D - 1$. A relação entre estes modelos é estabelecida por meio da matriz de transferência. Por exemplo, o modelo de Ising $2D$ sem campo é equivalente ao modelo $1D$ de fermions livres.

1.2. Mapeamento em uma rede bidimensional. Através deste mapeamento, transformaremos o modelo quântico unidimensional XYh em um modelo clássico bidimensional.

Dado o Hamiltoniano (4.1), sua função de partição canônica é

$$Z_n = Tr(e^{-\beta H_n}) = Tr(e^{\beta \sum_{i=1}^n \{J^x \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + J^y \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \frac{h}{2}(\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z)\}}), \quad (4.4)$$

onde $\beta > 0$ é o inverso da temperatura.

Defino

$$\begin{aligned} P^1 &= \sum_{i=1}^{n/2} \{J^x \sigma_{2i-1}^x \sigma_{2i}^x + J^y \sigma_{2i-1}^y \sigma_{2i}^y\} = \sum_{i=1}^{n/2} H_{2i-1,2i}, \\ P^2 &= \sum_{i=1}^{n/2} \{J^x \sigma_{2i}^x \sigma_{2i+1}^x + J^y \sigma_{2i}^y \sigma_{2i+1}^y\} = \sum_{i=1}^{n/2} H_{2i,2i+1}, \\ P^3 &= \sum_{i=1}^{n/2} \frac{h}{2} (\sigma_{2i-1}^z + \sigma_{2i}^z) \end{aligned} \quad (4.5)$$

e

$$P^4 = \sum_{i=1}^{n/2} \frac{h}{2} (\sigma_{2i}^z + \sigma_{2i+1}^z). \quad (4.6)$$

Assim,

$$-H_n = P^1 + P^3 + P^2 + P^4. \quad (4.7)$$

Substituindo (4.7) em (4.4) e usando a fórmula de Trotter generalizada,

$$e^{(A_1+A_2+\dots+A_q)} = \lim_{m \rightarrow \infty} (e^{\frac{A_1}{m}} e^{\frac{A_2}{m}} \dots e^{\frac{A_q}{m}})^m, \quad (4.8)$$

onde A_1, A_2, \dots, A_q são matrizes finitas, temos

$$Z_n = \lim_{m \rightarrow \infty} Tr(e^{\frac{\beta P^1}{m}} e^{\frac{\beta P^3}{m}} e^{\frac{\beta P^2}{m}} e^{\frac{\beta P^4}{m}})^m$$

$$= \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_n} \langle \sigma_1 \dots \sigma_n | (e^{\frac{\beta P^1}{m}} e^{\frac{\beta P^3}{m}} e^{\frac{\beta P^2}{m}} e^{\frac{\beta P^4}{m}})^m | \sigma_1 \dots \sigma_n \rangle ,$$

onde os elementos da base canônica $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\rangle$ de $\bigotimes_{j=1}^n \mathbb{C}^2$ representam a coleção de spins da cadeia. Um elemento desta base $\{|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\rangle, \sigma_i = \pm 1, j = 1, \dots, n\}$ é, por exemplo,

$$\begin{aligned} |+, -, \dots, +\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= |+\rangle \otimes |-\rangle \otimes \dots \otimes |+\rangle . \end{aligned}$$

Denotando por $|\tilde{\sigma}\rangle$ estes estados $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n\rangle$, temos

$$\begin{aligned} Z_n &= \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{\tilde{\sigma}} \langle \tilde{\sigma} | \underbrace{(e^{\frac{\beta P^1}{m}} e^{\frac{\beta P^3}{m}} e^{\frac{\beta P^2}{m}} e^{\frac{\beta P^4}{m}}) \dots (e^{\frac{\beta P^1}{m}} e^{\frac{\beta P^3}{m}} e^{\frac{\beta P^2}{m}} e^{\frac{\beta P^4}{m}})}_{m\text{-vezes}} | \tilde{\sigma} \rangle \\ &\equiv \lim_{m \rightarrow \infty} Z_{n,m} . \end{aligned}$$

Inserindo conjuntos completos

$$\sum_{\tilde{\sigma}_j} |\tilde{\sigma}_j\rangle \langle \tilde{\sigma}_j| = I \quad (\text{com } j = 1, 2, \dots, m)$$

(aqui I é a identidade de ordem 2^m) entre cada par de fatores do produto, obtemos:

$$Z_{n,m} = \sum_{\tilde{\sigma}_1, \tilde{\sigma}_2, \dots, \tilde{\sigma}_m} \prod_{j=1}^{m/2} \langle \tilde{\sigma}_{2j-1} | e^{\frac{\beta P^1}{m}} e^{\frac{\beta P^3}{m}} | \tilde{\sigma}_{2j} \rangle \langle \tilde{\sigma}_{2j} | e^{\frac{\beta P^2}{m}} e^{\frac{\beta P^4}{m}} | \tilde{\sigma}_{2j+1} \rangle ,$$

tal que

$$\langle \tilde{\sigma}_{2j-1} | e^{\frac{\beta P^1}{m}} e^{\frac{\beta P^3}{m}} | \tilde{\sigma}_{2j} \rangle = \prod_{i=1}^{n/2} M_{ij}$$

com

$$M_{ij} = \langle \sigma_{2i-1, 2j-1} \sigma_{2i, 2j-1} | e^{\frac{\beta}{m} H_{2i-1, 2i}} e^{\frac{\beta h}{2m} (\sigma_{2i-1}^z + \sigma_{2i}^z)} | \sigma_{2i-1, 2j} \sigma_{2i, 2j} \rangle .$$

O índice j refere-se à particular coleção $\tilde{\sigma}$ e o índice i ao elemento desta coleção.

Usando a base de $|\sigma^z\rangle$

$$\sigma_{2i}^z |\sigma_{2i, 2j}\rangle = \sigma_{2i, 2j} |\sigma_{2i, 2j}\rangle$$

$$\sigma_{2i}^x |\sigma_{2i, 2j}\rangle = |-\sigma_{2i, 2j}\rangle ,$$

$$\sigma_{2i}^y |\sigma_{2i, 2j}\rangle = i \sigma_{2i, 2j} |-\sigma_{2i, 2j}\rangle ,$$

onde $\sigma_{2i, 2j} = \pm 1, i = \sqrt{-1}$, temos

$$M = e^{\frac{\beta h}{2m} (\sigma_{2i-1, 2j}^z + \sigma_{2i, 2j}^z)} \langle \sigma_{2i-1, 2j-1} \sigma_{2i, 2j-1} | e^{\frac{\beta}{m} H_{2i-1, 2i}} | \sigma_{2i-1, 2j} \sigma_{2i, 2j} \rangle$$

de maneira que

$$\langle \sigma_{2i-1,2j-1} \sigma_{2i,2j-1} | e^{\frac{\beta}{m} H_{2i-1,2i}} | \sigma_{2i-1,2j} \sigma_{2i,2j} \rangle =$$

$$\langle \sigma_{2i-1,2j-1} \sigma_{2i,2j-1} | e^{\frac{\beta J^x}{m} \sigma_{2i-1}^x \sigma_{2i}^x + \frac{\beta J^y}{m} \sigma_{2i-1}^y \sigma_{2i}^y} | \sigma_{2i-1,2j} \sigma_{2i,2j} \rangle$$

Definindo

$$\sigma_i^\pm = \frac{1}{2} (\sigma_i^x \pm i \sigma_i^y) ,$$

com

$$\sigma_i^+ |-\rangle = |+\rangle ,$$

$$\sigma_i^- |+\rangle = |-\rangle ,$$

$$\sigma_i^+ |+\rangle = \sigma_i^- |-\rangle = 0 ,$$

temos

$$\frac{\beta J^x}{m} \sigma_{2i-1}^x \sigma_{2i}^x + \frac{\beta J^y}{m} \sigma_{2i-1}^y \sigma_{2i}^y =$$

$$\frac{\beta}{m} \eta [\sigma_{2i-1}^+ \sigma_{2i}^+ + \sigma_{2i-1}^- \sigma_{2i}^-] + \frac{\beta}{m} \kappa [\sigma_{2i-1}^+ \sigma_{2i}^- + \sigma_{2i-1}^- \sigma_{2i}^+]$$

com $\eta = (J^x - J^y)$ e $\kappa = (J^x + J^y)$.

Desta forma

$$M = e^{\frac{\beta h}{2m} (\sigma_{2i-1,2j} + \sigma_{2i,2j})} \langle \sigma_{2i-1,2j-1} \sigma_{2i,2j-1} |$$

$$e^{\frac{\beta}{m} \eta [\sigma_{2i-1}^+ \sigma_{2i}^+ + \sigma_{2i-1}^- \sigma_{2i}^-] + \frac{\beta}{m} \kappa [\sigma_{2i-1}^+ \sigma_{2i}^- + \sigma_{2i-1}^- \sigma_{2i}^+]} | \sigma_{2i-1,2j} \sigma_{2i,2j} \rangle$$

Escrevendo

$$h_{1,2} = \eta [\sigma_1^+ \sigma_2^+ + \sigma_1^- \sigma_2^-] + \kappa [\sigma_1^+ \sigma_2^- + \sigma_1^- \sigma_2^+] + \frac{h}{2} (\sigma_1^z + \sigma_2^z)$$

e usando

$$\begin{aligned} (h_{1,2})^{2k} |++\rangle &= \zeta^{2k} |++\rangle \\ (h_{1,2})^{2k} |+-\rangle &= \kappa^{2k} |+-\rangle \\ (h_{1,2})^{2k} |-+\rangle &= \kappa^{2k} |-+\rangle \\ (h_{1,2})^{2k} |--\rangle &= \zeta^{2k} |--\rangle \end{aligned} \quad (4.9)$$

e

$$\begin{aligned} (h_{1,2})^{2k-1} |++\rangle &= \zeta^{2k-2} \{h |++\rangle + \eta |--\rangle\} \\ (h_{1,2})^{2k-1} |+-\rangle &= \kappa^{2k-1} |+-\rangle \\ (h_{1,2})^{2k-1} |-+\rangle &= \kappa^{2k-1} |-+\rangle \\ (h_{1,2})^{2k-1} |--\rangle &= \zeta^{2k-2} \{\eta |++\rangle - h |--\rangle\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

com $\zeta = \sqrt{\eta^2 + h^2}$, para qualquer inteiro $k \geq 1$, podemos escrever M na forma matricial.

Para isto, tendo que

$$M_{ij} = \langle \sigma_{2i-1,2j-1} \sigma_{2i,2j-1} | e^{\frac{\beta}{m} h_{2i-1,2i}} | \sigma_{2i-1,2j} \sigma_{2i,2j} \rangle$$

e usando

$$\begin{aligned} e^{\frac{\beta}{m}h_{1,2}} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left(\frac{\beta}{m}h_{1,2}\right)^k \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \left(\frac{\beta}{m}h_{1,2}\right)^{2k} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(2k-1)!} \left(\frac{\beta}{m}h_{1,2}\right)^{2k-1}, \end{aligned}$$

juntamente com (4.9) e (4.10), obtemos

$$M_{ij} = \langle \sigma_{2i-1,2j-1} \sigma_{2i,2j-1} | M | \sigma_{2i-1,2j} \sigma_{2i,2j} \rangle$$

tal que

$$M = \begin{pmatrix} \backslash & ++ & +- & -+ & -- \\ ++ & e^{\frac{\beta h}{m}} \cosh \frac{\beta}{m} \eta & 0 & 0 & e^{-\frac{\beta h}{m}} \sinh \frac{\beta}{m} \eta \\ +- & 0 & \cosh \frac{\beta}{m} \kappa & \sinh \frac{\beta}{m} \kappa & 0 \\ -+ & 0 & \sinh \frac{\beta}{m} \kappa & \cosh \frac{\beta}{m} \kappa & 0 \\ -- & e^{\frac{\beta h}{m}} \sinh \frac{\beta}{m} \eta & 0 & 0 & e^{-\frac{\beta h}{m}} \cosh \frac{\beta}{m} \eta \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Analogamente

$$\begin{aligned} &\langle \tilde{\sigma}_{2j} | e^{\frac{\beta P^2}{m}} e^{\frac{\beta P^4}{m}} | \tilde{\sigma}_{2j+1} \rangle = \\ &\prod_{i=1}^{n/2} \langle \sigma_{2i,2j} \sigma_{2i+1,2j} | e^{\frac{\beta}{m} H_{2i,2i+1}} e^{\frac{\beta h}{2m} (\sigma_{2i}^z + \sigma_{2i+1}^z)} | \sigma_{2i,2j+1} \sigma_{2i+1,2j+1} \rangle = \\ &\prod_{i=1}^{n/2} \bar{M}_{ij}, \end{aligned}$$

onde \bar{M} é a mesma matriz da expressão (4.11).

Dada esta rede bidimensional que obtivemos por Trotter, podemos calcular sua função de partição observando que existe uma correspondência com o problema de oito vértices mapeados na rede. Desta forma, obtemos

$$\begin{aligned} \omega_1 &= e^{\frac{\beta h}{m}} \cosh \frac{\beta}{m} \eta, \quad \omega_2 = e^{-\frac{\beta h}{m}} \cosh \frac{\beta}{m} \eta, \\ \omega_3 &= \omega_4 = \sinh \frac{\beta}{m} \kappa, \quad \omega_5 = \omega_6 = \cosh \frac{\beta}{m} \kappa, \\ \omega_7 &= e^{\frac{\beta h}{m}} \sinh \frac{\beta}{m} \eta \quad \text{e} \quad \omega_8 = e^{-\frac{\beta h}{m}} \sinh \frac{\beta}{m} \eta. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Estes são os oito vértices para o modelo XYh .

1.3. Função de Partição. Uma vez obtido os oito vértices correspondentes a este modelo, sua solução será realizada através das variáveis de Grassmann de acordo com o capítulo 3. Estes vértices satisfazem a condição de fermions livres

$$\Delta = w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8 = 0. \quad (4.13)$$

Sua função de partição é

$$Z_{XYh} = (-1)^{\Lambda} \sqrt{\det(Q)} \quad (4.14)$$

tal que

$$\begin{aligned} Q &= -K^{-1} + A, \\ K^{-1}(i, j) &= K_j^{-1} \delta_{i,j}, \\ A(i, j) &= \sum_{\nu=\pm 1, \pm 2} P_\nu \delta_{i+\nu, j} \end{aligned}$$

e

$$K_j^{-1} = \frac{1}{\sqrt{w_2}} \begin{bmatrix} 0 & w_7 & -w_3 & w_6 \\ -w_7 & 0 & w_5 & -w_4 \\ w_3 & -w_5 & 0 & w_8 \\ -w_6 & w_4 & -w_8 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.15)$$

P_ν é dado por (3.22). $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ e $j \in \{1, 2, \dots, m\}$ são os índices dos sítios da rede retangular $N = nm$. Para K_j^{-1} constante, independente de x_j da integral gaussiana (3.21), a matriz Q pode ser explicitamente diagonalizada pela matriz F de Fourier definida logo abaixo.

Utilizando as expressões acima, temos (veja Fan e Wu [FW2])

$$\text{Pf}(Q) = \sqrt{\det(Q)} = \sqrt{\det[FQF^{-1}]}, \quad (4.16)$$

F é a matriz de Fourier que diagonaliza Q ,

$$F = [f_{kl}] \quad (4.17)$$

tal que

$$f_{kl} := \frac{1}{\sqrt{N}} \exp \left\{ -i \frac{2\pi}{N} kl \right\}.$$

$k \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ e $l \in \{1, 2, \dots, m-1\}$. Note que $F = F^\dagger = F^{-1}$ é uma matriz unitária (veja Davis[Da]).

Assim

$$\begin{aligned} FQF^{-1} &= F(-K^{-1} + A)F^{-1} = -F(K^{-1})F^{-1} + F(A)F^{-1} \\ &= -K^{-1} + F(A)F^{-1}, \end{aligned}$$

pois K^{-1} já é bloco diagonal e

$$\begin{aligned} F(A)F^{-1} &= \sqrt{w_2} [-\lambda_j X + \lambda_j^{-1} X^t - \lambda_j^m Y + \lambda_j^{-m} Y^t] \\ &= \sqrt{w_2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \lambda_j^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_j^{-m} \\ -\lambda_j & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda_j^m & 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

A forma de Q diagonalizada é

$$FQF^{-1} = \sum_{j=1}^N [I \otimes I \otimes \dots \otimes Q_j \otimes \dots \otimes I] \quad (4.18)$$

tal que

$$Q_j = \frac{1}{\sqrt{w_2}} \begin{bmatrix} 0 & -w_7 & w_3 + w_2\lambda_j^{-1} & -w_6 \\ w_7 & 0 & -w_5 & w_4 + w_2\lambda_j^{-m} \\ -w_3 - w_2\lambda_j & w_5 & 0 & -w_8 \\ w_6 & -w_4 - w_2\lambda_j^m & w_8 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.19)$$

I é a matriz identidade 4×4 e $\lambda_j = e^{(2j-1)\frac{\pi}{N}i}$.

Substituindo FQF^{-1} (4.18) em (4.16), encontramos

$$\begin{aligned} \text{Pf}(Q) &= \sqrt{\det [FQF^{-1}]} \\ &= \left\{ \prod_{j=1}^N \det [Q_j] \right\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Resolvendo este determinante, encontramos

$$\begin{aligned} \text{Pf}(Q) &= \left\{ \prod_{j=1}^N [a + b(\lambda + \lambda^{-1}) + c(\lambda^m + \lambda^{-m}) \right. \\ &\quad \left. + d(\lambda^{m+1} + \lambda^{-m-1}) + e(\lambda^{m-1} + \lambda^{-m+1})] \right\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (4.21)$$

com

$$\begin{aligned} a &= w_1^2 + w_2^2 + w_3^2 + w_4^2, \\ b &= w_2w_3 - w_1w_4, \\ c &= w_2w_4 - w_1w_3, \\ d &= w_3w_4 - w_5w_6 \end{aligned}$$

e

$$e = w_3w_4 - w_7w_8.$$

PROPOSIÇÃO 4.1.

$$Z_{XYh} = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x_l)\}^{\frac{1}{2}} \quad (4.22)$$

tal que

$$R(\theta_i, \phi_j) = a + 2b \cos \theta_i + 2c \cos \phi_j + 2d \cos(\theta_i + \phi_j) + 2e \cos(\theta_i - \phi_j), \quad (4.23)$$

com $\theta_i = \frac{\pi}{m}(2i - 1)$ e $\phi_j = \frac{\pi}{n}(2j - 1)$.

DEMONSTRAÇÃO. Basta substituírmos (4.21) em (4.14), usando (4.16), para obtermos a expressão de Z_{XYh} . ■

Analisaremos, em seguida, a função $R(\theta_i, \phi_j)$. Para isto, introduziremos uma função real

$$G := \frac{1}{2} (a + 2c \cos(\phi))$$

e uma função complexa

$$H := b + de^{i\phi} + ee^{-i\phi},$$

como feito em [MR].

Assim,

$$\begin{aligned} R(\theta_i, \phi_j) &= 2G + He^{i\theta} + \overline{H}e^{-i\theta} = \frac{H}{e^{i\theta}} \left(e^{2i\theta} + \frac{2G}{H} e^{i\theta} + \frac{\overline{H}}{H} \right) \\ &= \frac{H}{e^{i\theta}} (e^{i\theta} - \rho^+) (e^{i\theta} - \rho^-) \end{aligned} \quad (4.24)$$

com $\rho^\pm = \frac{-G \pm \Omega}{H}$ e

$$\begin{aligned} \Omega^2(z) &= G^2 - H\overline{H} \\ &= \left[\frac{a^2}{4} - b^2 + \frac{c^2}{2} - d^2 - e^2 \right] + \left[\frac{ac}{2} - b(d+e) \right] (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \\ &\quad + \left[\frac{c^2}{4} - de \right] (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}) \end{aligned}$$

Com isto, eliminamos a dependência de $\theta = \theta(m)$ em R através da realização do produto em m ,

$$\prod_{j=1}^m (\rho - e^{i\theta_j}) = \rho^m + 1 \quad (4.25)$$

$e^{i\theta_j}$ são as m raízes de (-1) , pois $\theta_j = \frac{\pi}{m} (2j - 1)$.

Usando (4.25) em (4.24) e $\prod_{j=1}^m (-e^{i\theta_j}) = 1$, encontramos

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^m R(\theta_i, \phi_j) &= \prod_{j=1}^m \frac{H}{e^{i\theta}} (\rho^+ - e^{i\theta}) (\rho^- - e^{i\theta}) \\ &= (-H)^m \{[(\rho^+)^m + 1][(\rho^-)^m + 1]\} \\ &= \{(-H)^m + (-\overline{H})^m + (G + \Omega)^m + (G - \Omega)^m\}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Temos que Ω é da ordem de q/m (q fator que independe de m) enquanto que G contribui com $1 + q'/m^2$. Desta forma, $\lim_{m \rightarrow \infty} (G + \Omega)^m \rightarrow e^q$.

Em seguida, faremos a expansão em série dos vértices deste modelo em ordem $O(\frac{1}{m})$.

Substituindo os valores dos oito vértices do modelo (4.12) nas expressões acima, encontramos

$$\Omega = \frac{2\beta}{m} E(\phi_i)$$

com

$$E(\phi_i) = \sqrt{[h - (J^x + J^y) \cos \phi_i]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi_i}.$$

Assim,

$$m \ln(G \pm \Omega) = \pm 2\beta E(\phi_i) + O\left(\frac{1}{\sqrt{m}}\right)$$

$$m \ln(-H) = mi\phi$$

Substituindo estas expressões, temos

$$\prod_{j=1}^m R(\theta_i, \phi_j) = 2 \cos(m\phi_i) + e^{2\beta E(\phi)} + e^{-2\beta E(\phi)} \quad (4.27)$$

com

$$\begin{aligned} E(\phi) &= \sqrt{[(J^x + J^y) \cos \phi - h]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi} \\ &= [h^2 + (J^x)^2 + (J^y)^2 - 2h(J^x + J^y) \cos(\phi) + 2J^x J^y \cos(2\phi)]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Notemos que $\cos(m\phi_i) = \cos\left(\frac{m\pi}{n}(2i-1)\right) = 1$ pois $m = kn + 1$.

Usamos $\cos(2\phi) = 2\cos^2(\phi) - 1$ e $\cos(\phi - \pi) = -\cos(\phi)$ na proposição abaixo.

PROPOSIÇÃO 4.2. A função de partição do modelo XYh é dada por

$$Z_{XYh} = \exp \left\{ \frac{n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh(\beta E(\phi))] d\phi \right\}.$$

com

$$E(\phi) = [h^2 + (J^x - J^y)^2 + 2h(J^x + J^y) \cos(\phi) + 4J^x J^y \cos^2(\phi)]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.28)$$

DEMONSTRAÇÃO. Substituindo a expressão (4.27) em (4.22) encontramos o resultado acima. ■

Adotaremos variáveis apropriadas para o estudo dos pontos críticos desta energia,

$$\gamma = \frac{J^x - J^y}{J^x + J^y}$$

e

$$\eta = \frac{h}{J^x + J^y}.$$

Notemos que $-1 \leq \gamma \leq 1$. A adoção destas novas variáveis é equivalente a escrever o Hamiltoniano do modelo XYh como

$$H_n = \sum_{i=1}^n \left\{ [(1 + \gamma) \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + (1 - \gamma) \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y] + \frac{\eta}{2} (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) \right\}.$$

Com isto, teremos $\varepsilon(\phi)$, a energia $E(\phi)$ dividida por um fator fixo $(J^x + J^y)$ que não altera seus pontos críticos,

$$\begin{aligned}\varepsilon(\phi) &= \frac{E(\phi)}{(J^x + J^y)} \\ &= \sqrt{\eta^2 + \gamma^2 + 2\eta \cos(\phi) + (1 - \gamma^2) \cos^2(\phi)}.\end{aligned}\tag{4.29}$$

A energia livre normalizada pelo número de sítios n e por $(J^x + J^y)$ é

$$f_{XYh} = -\frac{1}{2\pi\beta} \int_{-\pi}^{\pi} \ln [2 \cosh(\beta\varepsilon(\phi))] d\phi.$$

O estado fundamental, f_0 , é obtido pelo processo limite $\beta \rightarrow \infty$ na expressão da energia livre.

$$\begin{aligned}f_0 &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} f_{XYh} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \varepsilon(\phi) d\phi\end{aligned}\tag{4.30}$$

1.4. Criticalidade do modelo. Nesta seção, estudaremos a criticalidade do modelo XYh.

A criticalidade deste modelo ocorre somente em $T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$), ou seja, em seu estado fundamental f_0 . Os expoentes críticos podem ser calculados através do estudo do “gap” da energia fundamental (vamos aqui seguir a análise feita pelos autores Bunder e McKenzie em [BuMc]). O “gap” g analisado é a separação entre as duas bandas de energia (veja figura 1 e figura 2). O sistema alcança a criticalidade quando se anula o gap. O gap ocorre no mínimo ϕ_0 de $\varepsilon(\phi)$:

$$\begin{aligned}\left. \frac{\partial}{\partial \phi} \varepsilon(\phi) \right|_{\phi=\phi_0} &= 0 \rightarrow \\ \frac{\sin(\phi_0)}{\varepsilon(\phi_0)} \{ \eta + (1 - \gamma^2) \cos(\phi_0) \} &= 0.\end{aligned}\tag{4.31}$$

$\varepsilon(\phi)$ é dado por (4.29). Isolando ϕ_0 , temos que as raízes da equação acima, no intervalo $[-\pi, \pi]$, são

$$\{0, \pm \cos^{-1}[\alpha], \pm \pi\},$$

tal que

$$\alpha = -\frac{\eta}{(1 - \gamma^2)}.\tag{4.32}$$

Analisando a forma de $\varepsilon(\phi)$, temos que o *mínimo* de $\varepsilon(\phi)$ ocorre em

$$\pm \cos^{-1}[\alpha].\tag{4.33}$$

$\{0, \pm \pi\}$ são, quando não coincidentes com $\pm \cos^{-1}[\alpha]$, pontos máximos de $\varepsilon(\phi)$.

Teremos duas fases dependendo do valor de α . Conforme Nijs[Ni], para $|\alpha| > 1$ estaremos na fase comensurável e para $|\alpha| < 1$ na fase incomensurável. Esta classificação é derivada do comportamento do comprimento de correlação que será visto mais adiante.

Devido à simetria da energia em ϕ , os dois gaps de energia ocorrem em $\pm\phi_0$. Consideraremos ϕ_0 como o valor positivo de (4.33), ou seja, pertencente ao intervalo $[0, \pi]$. Quando $|\alpha| > 1$, $\phi_0 = 0$ ou π são as únicas soluções de (4.31). Fixamos $\phi_0 = 0$ para $\alpha > 1$ e $\phi_0 = \pi$ para $\alpha < -1$, por continuidade:

$$\phi_0 = \begin{cases} \pi & \text{se } \alpha < -1 \\ \cos^{-1} [\alpha] & \text{se } |\alpha| \leq 1 \\ 0 & \text{se } \alpha > 1. \end{cases}$$

Veja as curvas de dispersão típicas para os casos $|\alpha| < 1$ (figura 1) e $|\alpha| > 1$ (figura 2).

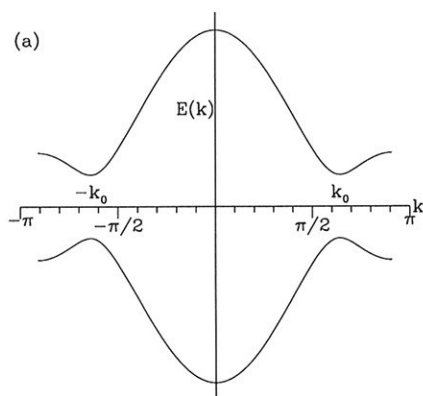


Figura 1: Caso em que $|\alpha| < 1$. $E(k)$ é dado por (4.28). Fonte: [BuMc] O mínimo de $E(k)$ ocorre em $\pm k_0$. O gap é calculado pela distância entre o mínimo de $E(k)$ e o máximo de $-E(k)$.

O gap g no espectro da energia em ϕ_0 é sempre igual a $2|\varepsilon(\phi_0)|$, com

$$g = \begin{cases} 2|\eta - 1| & \text{se } \alpha < -1 \\ 2\sqrt{\eta^2 + \gamma^2 + 2\eta \cos(\phi_0) + (1 - \gamma^2) \cos^2(\phi_0)} & \text{se } |\alpha| \leq 1 \\ 2|\eta + 1| & \text{se } \alpha > 1. \end{cases}$$

O sistema apresenta criticalidade quando o gap g é nulo, ou seja, quando

$$\varepsilon(\phi_0) = 0. \quad (4.34)$$

À temperatura nula, este modelo apresenta duas transições de fase quânticas distintas, ambas de segunda ordem.

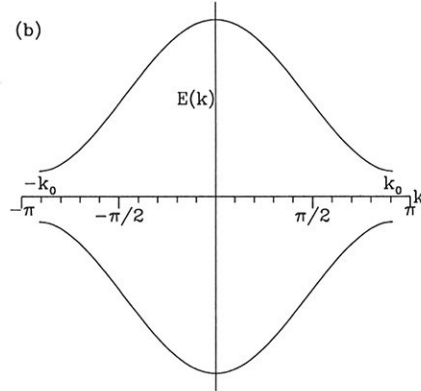


Figura 2: Caso em que $|\alpha| > 1$. $E(k)$ é dado por (4.28). Fonte: [BuMc]

Vamos analisar os casos $\alpha = -1$, $\alpha < -1$ e $\alpha > -1$ em que $\eta \geq 0$. Os casos em que $\eta < 0$ são obtidos de maneira análoga.

- A fronteira entre as fases comensurável e incomensurável é definida por

$$\alpha = -1 \iff \eta = 1 - \gamma^2 .$$

Esta fronteira é observada na linha tracejada da figura 3. Assim, a linha que separa as duas regiões é uma linha de transição comensurável-incomensurável. Estes pontos dão origem à singularidade da susceptibilidade magnética.

- Quando $\alpha < -1$ ($\phi_0 = \pi$) $\rightarrow \eta > 1 - \gamma^2$, o gap anula-se ao longo da linha

$$\eta = 1 \iff h = J^x + J^y .$$

Esta é uma transição da fase ferromagnética(FM) para a paramagnética(PM) referida como *transição de Ising*.

- Quando $\alpha > -1$ ($\phi_0 = 0$) $\rightarrow \eta < 1 - \gamma^2$, o gap anula-se ao longo da linha

$$\gamma = 0 \iff J^x = J^y$$

desde que $\eta < 1$. Esta é uma transição ferromagnética de Ising com magnetização na direção x para magnetização na direção y e referida como *transição anisotrópica*. Assim, os spins são ordenados e o sistema exhibe uma fase ferromagnética (FM) para $\gamma \neq 0$. No limite isotrópico, $\gamma = 0$, o gap anula-se juntamente com a magnetização espontânea. As curvas no diagrama $\gamma \times \eta$ na qual o gap anula-se são expressas com linhas sólidas (veja figura 3).

Expressaremos a solução da equação (4.34) em termos de h , pois esta é a variável independente da magnetização e da susceptibilidade magnética. Segue da equação (4.34) que o ponto crítico da susceptibilidade magnética $\chi(h, T = 0)$ à temperatura

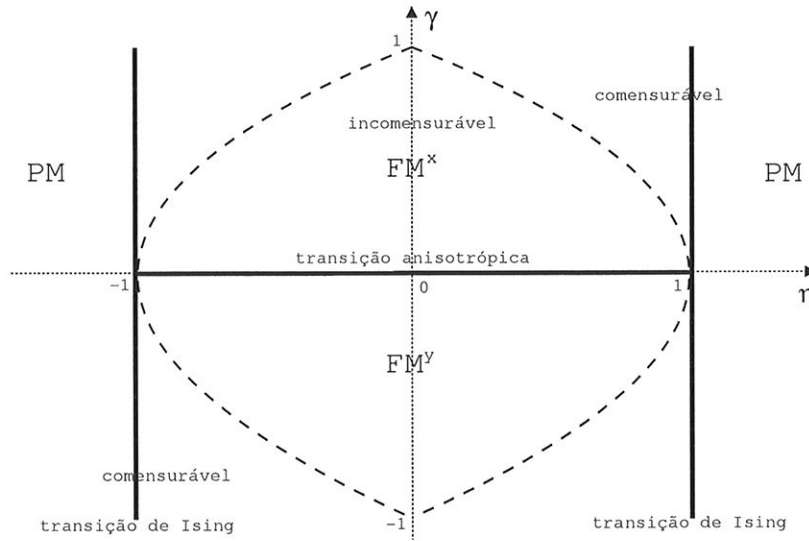


Figura 3: Diagrama de fase no plano $\gamma \times \eta$, $\gamma = \frac{J^x - J^y}{J^x + J^y}$ ($-1 \leq \gamma \leq 1$) e $\eta = \frac{h}{J^x + J^y}$. As linhas sólidas representam transições de fase de segunda ordem com estados excitados de gap nulo, em todos os outros locais o gap será não nulo. A linha horizontal será referida como transição anisotrópica e a linha vertical como transição de Ising. PM denota fase paramagnética e FM^x denota ferromagneto de Ising com magnetização na direção x . FM^x indica a região em que $\langle \sigma^x \rangle \neq 0$. As parábolas tracejadas são dadas por $\alpha = \pm 1 \rightarrow \eta = \mp(1 - \gamma^2)$. Dentro da região limitada pelas parábolas, temos a fase incomensurável; fora, temos a fase comensurável.

zero é dado por

$$h_0 = \pm 2\sqrt{J^x J^y} .$$

1.5. Expoente Crítico α . Calcularemos, nesta seção, o expoente crítico α

O comportamento crítico para estados de baixa energia é obtido próximo do gap de energia onde $\phi \sim \phi_0$. Se $\phi - \phi_0$ for pequeno, a energia pode ser expressa como uma série de Taylor

$$\varepsilon(\phi)^2 = \varepsilon(\phi_0)^2 + v_0^2(\phi - \phi_0)^2 + O(\phi^4) , \quad (4.35)$$

tal que

$$v_0 = [(1 - \gamma^2) - \eta \cos \phi_0 - 2(1 - \gamma^2) \cos^2 \phi_0]^{1/2}$$

e

$$\varepsilon(\phi_0) = [\eta^2 + \gamma^2 + 2\eta \cos(\phi_0) + (1 - \gamma^2) \cos^2(\phi_0)]^{1/2} .$$

Analisaremos a natureza da singularidade da energia do estado fundamental em $\varepsilon(\phi_0) = 0$. Para isto, diferenciaremos (4.30) com respeito à $\varepsilon(\phi_0)^2$. Para pequenos valores de $\varepsilon(\phi_0)$ a derivada da integral de f_0 é dominada pelos estados de baixas

energias próximo ao “gap” de energia. Assim, consideraremos apenas aqueles estados determinados pelos primeiros termos na expansão (4.35),

$$\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon(\phi_0)^2} = \int_{\phi_0 - \phi_c}^{\phi_0 + \phi_c} \frac{d\phi}{4\pi} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(\phi_0)^2 + v_0^2(\phi - \phi_0)^2}},$$

tal que ϕ_c é um ângulo de corte.

Realizando a transformação de variável $x = \frac{v_0(\phi - \phi_0)}{\varepsilon(\phi_0)} \rightarrow dx = \frac{v_0}{\varepsilon(\phi_0)} d\phi$, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon(\phi_0)^2} &= \frac{1}{4\pi v_0} \int_{-\frac{v_0}{\varepsilon(\phi_0)}\phi_c}^{\frac{v_0}{\varepsilon(\phi_0)}\phi_c} dx \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \\ &= \frac{1}{4\pi v_0} \left[\sinh^{-1}(x) \right]_{-\frac{v_0}{\varepsilon(\phi_0)}\phi_c}^{\frac{v_0}{\varepsilon(\phi_0)}\phi_c} \\ &= \frac{1}{4\pi v_0} \left[\ln(x + \sqrt{1+x^2}) \right]_{-\frac{v_0}{\varepsilon(\phi_0)}\phi_c}^{\frac{v_0}{\varepsilon(\phi_0)}\phi_c} \\ &= -\frac{1}{2\pi v_0} \ln \left[\frac{\varepsilon(\phi_0)}{2v_0\phi_c} \right]. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Usando $\int (\ln y) dy = y \ln y - y$, integramos (4.36) com respeito a $\varepsilon(\phi_0)^2$ e obtemos f_0 em função de $\varepsilon(\phi_0)$,

$$f_0(\varepsilon(\phi_0)) - f_0(0) = \frac{\varepsilon(\phi_0)^2}{4\pi v_0} \left(1 - 2 \ln \left[\frac{\varepsilon(\phi_0)}{2v_0\phi_c} \right] \right).$$

Portanto, notamos que a singularidade da energia fundamental é logarítmica. O expoente crítico α , definido por

$$f_0(\varepsilon(\phi_0)) \sim \varepsilon(\phi_0)^{2-\alpha},$$

é

$$\alpha = 0^+.$$

Este expoente crítico corresponde ao expoente crítico do calor específico do modelo de Ising bidimensional clássico.

1.6. Comprimento de Correlação ξ . Barouch e McCoy[BaMc] calcularam a função de correlação como um valor esperado sobre produtos de operadores de fermions e o expressou, através do teorema de Wick, como Pfaffianos. Em seguida, utilizaram a técnica dos determinantes de Toeplitz na solução dos Pfaffianos. No estudo das propriedades assintóticas do comprimento de correlação foi usado o teorema de Szegö.

O comprimento de correlação (veja também Bunder e McKenzie [BuMc]), ξ , é definido pelo comportamento assintótico ($r \rightarrow \infty$) da função de correlação,

$$\langle \sigma_n^x \sigma_{n+r}^x \rangle - (M^x)^2 \rightarrow \frac{A}{r^2} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \quad (4.37)$$

tal que A é uma constante e $M^x \equiv \langle \sigma^x \rangle$ a magnetização na direção x (veja a definição em (2.7) e (2.10)).

M^x pode ser expressa em função da função de correlação,

$$M^x = \left[\lim_{r \rightarrow \infty} (-1)^r \langle \sigma_n^x \sigma_{n+r}^x \rangle \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Se $\eta > 1$ o sistema encontra-se na fase paramagnética que possui a magnetização nula. Se $\eta < 1$ e $J^x > J^y$ o sistema encontra-se na fase ferromagnética, e a magnetização na direção x é dada por (veja página 797 de [BaMc])

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (M^x)^2 = (-1)^r \frac{2\gamma^{\frac{1}{2}}}{1+\gamma} [1 - \eta^2]^{\frac{1}{4}}.$$

Notamos que a ordem de longo alcance anula-se quando $\eta = \pm 1$. E esta expressão de M^x implica no expoente crítico $\beta = 1/8$ para transição de Ising e $\beta = 1/4$ para transição anisotrópica.

O comprimento de correlação, ξ , é dado por

$$e^{-\frac{1}{\xi}} \sim |\lambda_2|^{-2}$$

tal que

$$\lambda_2 = \frac{\eta - [\eta^2 - (1 - \gamma^2)]^{\frac{1}{2}}}{1 - \gamma}.$$

λ_2 é uma quantidade real (complexa) na fase comensurável (incomensurável). Como resultado

$$e^{-\frac{1}{\xi}} \sim \begin{cases} \lambda_2^{-2} & \text{comensurável} \\ \frac{1-\gamma}{1+\gamma} & \text{incomensurável.} \end{cases}$$

Isto implica no expoente crítico

$$\nu = 1$$

para as transições de Ising e anisotrópica. Na fase incomensurável, o comprimento de correlação ξ é muito maior que o espaçamento da rede r .

Sobre a linha crítica de Ising

$$\langle \sigma_n^x \sigma_{n+r}^x \rangle \sim \frac{1}{r^{\frac{1}{4}}}$$

e o expoente crítico $\eta = 5/4$. Sobre a linha crítica anisotrópica

$$\langle \sigma_n^x \sigma_{n+r}^x \rangle \sim \frac{1}{r^{\frac{1}{2}}}$$

e o expoente crítico $\eta = 3/2$.

1.7. Expoentes Críticos. Apresentaremos, abaixo, uma tabela com os expoentes críticos para este modelo. Δ é uma medida de desvio em relação ao ponto crítico (não confundir com (3.15)).

Expoente	Definição	Valor
α	$\epsilon \sim \Delta^{2-\alpha}$	$0^+(\log)$
β	$\langle \sigma_n^x \rangle \sim \Delta^\beta$	1/8
γ	$\chi_{xx} \sim \Delta^\gamma$	7/4
δ	$\langle \sigma_n^x \rangle \sim H^{1/\delta} (\Delta = 0)$	15
ν	$\xi_{av} \sim \Delta^{-\nu}$	1
η	$\langle \sigma_r^x \sigma_0^x \rangle \sim r^{1-\eta} (\Delta = 0)$	5/4

2. Modelo XYZh

Nesta seção, obteremos o modelo de oito vértices correspondente a este modelo, onde observamos que este não obedece a condição de fermions livres. Nos capítulos posteriores faremos análise de sua função de partição, obtendo cotas inferior e superior.

O Hamiltoniano do modelo de Heisenberg anisotrópico é dado por $H = \sum_{i \in \Lambda}^n h_{i,i+1}$ com

$$h_{i,j} = J^x \sigma_i^x \sigma_j^x + J^y \sigma_i^y \sigma_j^y + J^z \sigma_i^z \sigma_j^z + \frac{h}{2} (\sigma_i^z + \sigma_j^z),$$

tal que σ_i^x , σ_i^y e σ_i^z são as matrizes de Pauli (veja (4.2)) localizadas no sítio i da rede.

Este modelo é também conhecido como modelo XYZ com campo h aplicado ao sistema.

2.1. Os oito vértices do modelo XYZh. Mapearemos este modelo num problema de oito vértices (veja (3.2) de [MR]). Para isto, acrescentaremos J^z à seção (1.2) introduzindo $\beta J^z \sigma_{2i-1}^z \sigma_{2i}^z$ em (4.5) e $\beta J^z \sigma_{2i}^z \sigma_{2i+1}^z$ em (4.6). Depois de algumas manipulações algébricas, obteremos os oito vértices do modelo XYZh

$$w_1 = e^{\beta J^z / m} \left(\cosh \frac{\beta \zeta}{m} + \frac{h}{\zeta} \sinh \frac{\beta \zeta}{m} \right)$$

$$w_2 = e^{\beta J^z / m} \left(\cosh \frac{\beta \zeta}{m} - \frac{h}{\zeta} \sinh \frac{\beta \zeta}{m} \right)$$

$$w_3 = w_4 = e^{-\beta J^z / m} \sinh \frac{\beta \kappa}{m}$$

$$w_5 = w_6 = e^{-\beta J^z / m} \cosh \frac{\beta \kappa}{m}$$

$$w_7 = w_8 = e^{-\beta J^z / m} \frac{\eta}{\zeta} \sinh \frac{\beta \zeta}{m}$$

com $\eta = (J^x - J^y)$, $\kappa = (J^x + J^y)$ e $\zeta = \sqrt{\eta^2 + h^2}$. m é o índice oriundo da fórmula de Trotter. É importante notar que $N = nm$ será o tamanho, ou número total de

vértices, da nova rede obtida. Expandiremos a função de partição em uma série até primeira ordem em $1/m$, e tomaremos, em seguida, o limite $m \rightarrow \infty$. De acordo com as expressões para os oito vértices acima, temos

$$\begin{aligned} \Delta &= w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8 \\ &= 2 \left(1 + \frac{\eta^2}{\zeta^2} \sinh^2 \frac{\beta \zeta}{m} \right) \sinh \left(\frac{2\beta J^z}{m} \right) \\ &= \frac{4\beta J^z}{m} + O\left(\frac{1}{m}\right)^3 \end{aligned} \tag{4.38}$$

Notamos que $w_1, w_2, w_3, \dots, w_8$ não satisfazem a condição de fermions livres pois Δ não necessariamente é nulo.

CAPÍTULO 5

Modelo de Ising

Neste capítulo, para ilustrar mais uma vez o alcance que o modelo de oito vértices possui, apresentamos a solução do modelo de Ising como um caso particular do modelo de oito vértices. Assim, a solução do modelo de oito vértices possibilita-nos a compreensão de diversos outros modelos. Ao final, apresentamos uma tabela contendo os expoentes críticos do modelo de Ising bidimensional.

Mapearemos este modelo numa rede retangular Λ ($M \times N$) contendo MN sítios. Chamamos $\Omega = \{+1, -1\}^{MN}$ os possíveis estados, com elementos $\sigma = \{\sigma_{m,n}\}$, $m = 1, 2, \dots, M$ e $n = 1, 2, \dots, N$. A variável $\sigma_{m,n} = \{+1, -1\}$ é o spin do sítio (m, n) . O modelo de Ising na ausência de campo magnético com interação entre dois e quatro spins apresenta o Hamiltoniano (veja [Wu])

$$H(\sigma) = - \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \{ J_h \sigma_{m,n} \sigma_{m+1,n} + J_v \sigma_{m,n} \sigma_{m,n+1} + J \sigma_{m,n} \sigma_{m+1,n+1} + J' \sigma_{m+1,n} \sigma_{m,n+1} + J_4 \sigma_{m,n} \sigma_{m+1,n} \sigma_{m,n+1} \sigma_{m+1,n+1} \} . \quad (5.1)$$

J_h (J_v) é a constante de acoplamento horizontal (vertical), J e J' são as constantes diagonais e J_4 a constante de interação quártica.

A função de partição do modelo de Ising é dada por

$$Z_I = \sum_{\sigma \in \Omega} e^{-\beta H(\sigma)} .$$

Podemos mapear este modelo em um modelo de oito vértices (veja a seção 1). O modelo de spin numa rede retangular Λ é equivalente a um modelo de oito vértices numa rede dual Λ^* . Esta rede é obtida introduzindo um sítio no meio de cada face (quadrado elementar) formado pelas ligações de Λ . Note que Λ^* será também uma rede retangular. Basta, em seguida, identificarmos as energias dos vértices associados às energias dos spins.

A seguir, descrevemos a correspondência entre os spins $\sigma_{m,n} = \pm 1$ em Λ e os oito vértices em Λ^* . Para isto, associamos uma configuração de flexas em Λ^* desenhando uma flexa para cima (baixo) entre dois vizinhos (situados em uma linha de Λ) de spin iguais (diferentes), e uma flexa apontando para o lado direito (esquerdo) entre dois vizinhos (situados em uma coluna de Λ) de spins iguais (diferentes). Note que revertendo todos os spins em Λ teremos a mesma configuração de flexas (vértices) em Λ^* (veja figura 1). Contrariamente, para cada configuração de flexas (vértices) em Λ^*

teremos duas configurações de spins em Λ . Então,

$$Z_I = 2Z_{8v} ,$$

tal que $Z_I (Z_{8v})$ é a função de partição do modelo de Ising (oito vértices).

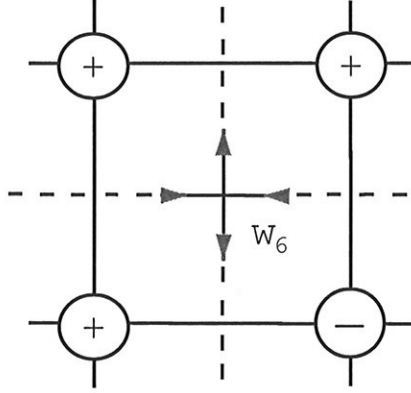


Figura 1: Correspondência entre os spins $\sigma_{m,n} = \pm 1$ em Λ (linhas cheias) e os oito vértices em Λ^* (linhas pontilhadas). Na figura, pela escolha dos spins do quadrado elementar (uma face) da rede Λ , temos a correspondência com o vértice $w_6 = e^{-\beta\epsilon_6}$ em Λ^* . Também teríamos o vértice w_6 caso revertéssemos os quatro spins da figura.

Igualando a energia dos spins de um quadrado elementar (com $H(\sigma)$ dado por (5.1)) com um tipo de vértice em seu centro (por exemplo, w_6), temos (veja figura 1):

$$\begin{aligned} -\beta\epsilon_6 &= \beta(J_h - J_h + J_v - J_v - J + J' - J_4) \rightarrow \\ \epsilon_6 &= (J - J' + J_4) . \end{aligned}$$

Na primeira equação acima, βJ_h é devido à interação horizontal superior + e +, $-\beta J_h$ é devido à interação horizontal inferior + e -, e assim por diante.

Analisando os oito vértices possíveis, encontramos a correspondência:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = \epsilon_2 &= -J - J' - J_4 , \\ \epsilon_3 = \epsilon_4 &= J + J' - J_4 , \\ \epsilon_5 = \epsilon_6 &= J - J' + J_4 , \\ \epsilon_7 = \epsilon_8 &= -J + J' + J_4 , \end{aligned}$$

com campo elétrico externo

$$(h, v) = (J_v, J_h)$$

e $w_j = \exp(-\beta\epsilon_j)$.

Baxter[**Ba2**] resolveu este modelo para o caso em que $J_h = J_v = 0$ e valores arbitrários de $\epsilon_1, \epsilon_3, \epsilon_5$ e ϵ_7 , mas com as restrições $\epsilon_1 = \epsilon_2, \epsilon_3 = \epsilon_4, \epsilon_5 = \epsilon_6$ e $\epsilon_7 = \epsilon_8$ (modelo de oito vértices simétrico). Se $J_4 = 0$, (5.1) pode ser desacoplado em dois modelos de Ising com interação apenas entre primeiros vizinhos.

1. Interação entre primeiros vizinhos

Quando $J = J' = J_4 = 0$, temos o modelo de Ising bidimensional com interação entre os primeiros vizinhos. Este modelo foi resolvido por Onsager[On]. S. Samuel[SS], Plechko[Pl], Wu e Hu[WH] utilizaram as variáveis de Grassmann como uma alternativa para a solução do modelo de Ising.

A função de partição deste modelo é dada por

$$\begin{aligned} Z_{\text{Ising}}(J_h, J_v) &= \sum_{\sigma \in \Omega} \exp \left(-\beta \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N [J_h \sigma_{m,n} \sigma_{m+1,n} + J_v \sigma_{m,n} \sigma_{m,n+1}] \right) \\ &= 2^{MN} [\cosh(b_h)]^M [\cosh(b_v)]^N Z_{\text{polígono}}(b_h, b_v) \end{aligned} \quad (5.2)$$

com (vide seção (2))

$$\begin{aligned} Z_{\text{polígono}}(t_h, t_v) &= \sum_{\sigma = \pm 1} \left\{ \prod_{m=1}^M \prod_{n=1}^N [(1 + t_h \sigma_{m,n} \sigma_{m+1,n}) (1 + t_v \sigma_{m,n} \sigma_{m,n+1})] \right\} \\ &= (-1)^{NM} \int d\phi \left(\prod_{j \in \Lambda} e^{S_j} \right), \end{aligned}$$

tal que

$$\begin{aligned} t_\alpha &= \tanh[b_\alpha], \\ b_\alpha &= \beta J_\alpha, \end{aligned}$$

$\alpha = h$ ou v , e $m = 1, \dots, M$ e $n = 1, \dots, N$. J_h é a interação horizontal e J_v a interação vertical. A soma $\sum_{\sigma = \pm 1}$ é realizada sobre todas as 2^{MN} configurações de spins notando que $\sigma_{m,n} = \pm 1$. Adotamos condição de fronteira helicoidal.

Em (5.2) usamos a identidade

$$\begin{aligned} e^{b\sigma\sigma'} &= \cosh b + \sigma\sigma' \sinh b \\ &= \cosh(b) [1 + \sigma\sigma' \tanh b]. \end{aligned}$$

$Z_{\text{polígono}}$ é a função de partição para polígonos fechados que podem cruzar entre si, mas não se sobrepor. Dito de outra forma, polígonos fechados podem ter pontos, mas não lados em comum.

Substituímos cada sítio da rede por quatro variáveis de Grassmann. Neste caso, semelhante à expressão (3.14), a ação é escrita como

$$S = \sum_{j \in \Lambda} S_j.$$

tal que

$$S_j = \frac{t_h}{2} [\overline{H}_j H_{j+1} + \overline{H}_{j-1} H_j] + \frac{t_v}{2} [\overline{V}_j V_{j+1} + \overline{V}_{j-1} V_j] - \quad (5.3)$$

$$H_j \overline{H}_j - V_j \overline{V}_j - \overline{H}_j V_j - \overline{V}_j H_j - V_j H_j - \overline{V}_j \overline{H}_j,$$

Notamos que os vértices w_3, \dots, w_8 são todos de módulo um enquanto w_1 e w_2 são responsáveis pelas interações horizontal e vertical.

Realizando os mesmos procedimentos das seções 4 e 1.3, encontramos (veja a expressão semelhante 4.20)

$$Z_{\text{Ising}}(J_h, J_v) = 2^{MN} [\cosh(b_h)]^M [\cosh(b_v)]^N \sqrt{\prod_{j=1}^{MN} \det[Q_j]}$$

tal que

$$Q(i, j) = -D + A,$$

$$D(i, j) = K^{-1} \delta_{i,j}.$$

Encontramos a matriz de estrutura interna K^{-1} , fazendo a correspondência com os oito vértices (veja (4.15)),

$$K^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

e a matriz de acoplamento

$$A(i, j) = t_h [\Pi^{-1} \otimes X^t - \Pi \otimes X] + t_v [\Pi^{-m} \otimes Y^t - \Pi^m \otimes Y].$$

Desta forma, temos

$$Q_j = \frac{1}{\sqrt{w_2}} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 + t_h \lambda_j^{-1} & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 1 + t_v \lambda_j^{-m} \\ -1 - t_h \lambda_j & 1 & 0 & -1 \\ w_6 & -1 - t_v \lambda_j^m & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

tal que $\lambda_j = e^{(2j-1)\frac{\pi}{MN}i}$.

Realizando o cálculo do determinante de Q_j , encontramos a expressão para a função de partição

$$Z_{\text{Ising}} = 2^{MN} [\cosh(b_h)]^M [\cosh(b_v)]^N \prod_{p=0}^{M-1} \prod_{q=0}^{N-1} [(1 + t_h^2)(1 + t_v^2) - 2t_h(1 - t_v^2) \cos\left(\frac{2\pi}{M}p\right) - 2t_v(1 - t_h^2) \cos\left(\frac{2\pi}{N}q\right)]$$

e para a função da energia livre deste modelo

$$f_{\text{Ising}} = \frac{-1}{\beta} \left\{ \ln 2 + \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} dpdq \ln [\vartheta(b_h, b_v)] \right\}$$

tal que

$$\vartheta(b_h, b_v) = \cosh[2b_h] \cosh[2b_v] - \sinh[2b_h] \cos p - \sinh[2b_v] \cos q .$$

Esta é a famosa solução de Onsager para a energia livre do modelo de Ising bidimensional em uma rede retangular.

1.1. Expoentes Críticos. O modelo de Ising apresenta transição de fase para temperatura não nula. A transição é observada pelo estudo da capacidade térmica. A capacidade térmica C é obtida derivando a energia livre com respeito à temperatura,

$$C = k\beta^2 \frac{\partial^2 (-\beta f_{\text{Ising}})}{\partial^2 \beta} ,$$

tal que $\beta = 1/(kT)$ e k é a constante de Boltzmann. A singularidade do calor específico é logarítmico próximo a T_c ,

$$C/k \sim \left| \ln \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right| \right| \text{ quando } T \rightarrow T_c .$$

α é o expoente crítico da capacidade térmica, neste caso, $\alpha = 0$.

A magnetização M não pode ser o parâmetro de ordem para o estudo de transição de fase do modelo de Ising com condições de contorno livre pelo fato do modelo de Ising ser simétrico pela troca do sentido de todos os spins numa rede. Assim, sua magnetização espontânea é nula na ausência de campo. É preciso utilizar o conceito de ordem de longo alcance e M^2 , o parâmetro de ordem escolhido, para estudar a quebra de simetria deste modelo.

Abaixo de uma temperatura crítica T_c , a magnetização espontânea é não nula (veja figura da página 15), e acima de T_c é nula. Próximo a T_c , temos o cálculo do expoente crítico da magnetização,

$$M \sim \tau^{1/8} \text{ quando } \tau \sim |T - T_c| \rightarrow 0 .$$

Notamos que o expoente magnético $\beta = 1/8$.

Os expoentes críticos calculados a partir da solução de Onsager são:

$$\begin{aligned} \alpha &= 0 && \text{com divergência logarítmica,} \\ \beta &= 1/8 , \\ \gamma &= 7/4 , \\ \nu &= 1 , \\ \eta &= 1/4 \quad \text{e} \\ \delta &= 15 . \end{aligned}$$

Cota Superior para o Modelo de Oito Vértices

Neste capítulo, calculamos uma cota superior da função de partição Z_{8v} do modelo de oito vértices aplicando esta cota ao modelo de Heisenberg $XYZh$. Para calcular uma cota superior utilizamos a positividade por reflexão ou de Ostewalder-Schrader[OS] com auxílio das variáveis de Grassmann.

Provamos que a positividade por reflexão é também válida para álgebras que não comutam, no caso estudado, para as variáveis de Grassmann. Este resultado é o primeiro encontrado na literatura, pois como afirmam os autores [FILS], só se conhecia até então aplicabilidade da positividade por reflexão em álgebras que comutam. Denominamos este procedimento de *Positividade por Reflexão Torcida* (PRT), pois a reflexão θ obtida torce a rede para que a simetria do modelo de oito vértices seja observada.

Provamos, na seção 2, que a função de partição (3.1) do modelo de oito vértices geral (não necessariamente satisfazendo a condição de fermions livres(veja definição 3)) possui uma cota superior. Para isto, estabelecemos um produto interno positivo dado por uma reflexão θ , em seguida, usamos a Desigualdade do Tabuleiro de Xadrez para homogeneizar a função de partição do modelo.

Neste capítulo, provamos o

TEOREMA 6.1 (Cota Superior do Modelo de Oito Vértices). *Seja Z_{8v} a função de partição do modelo de oito vértices dada por (3.1) e N o número total de vértices (veja a seção 2). Z_{8v} possui cota superior dada pela equação*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_{8v} \leq \ln \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{1}{8\pi^2} \int \int \ln R(\theta, \phi, x) d\theta d\phi \right] d\mu(x) \right\} ,$$

tal que

$$R(\theta, \phi, x) = 2G + He^{i\theta} + \overline{H}e^{-i\theta} ,$$

$$G = \frac{1}{2} (a + 2c \cos(\phi)) , \quad H = b + de^{i\phi} + ee^{-i\phi} ,$$

$$a = \frac{\delta^2}{w_2^2} + w_2^2 + (w_3')^2 + (w_4')^2 ,$$

$$b = w_2w_3' - \frac{\delta}{w_2}w_4' , \quad c = w_2w_4' - \frac{\delta}{w_2}w_3' ,$$

$$d = w_3'w_4' - w_5w_6 , \quad e = w_3'w_4' - w_7w_8 ,$$

$$w_3' = w_3 - \sqrt{\Delta}x , \quad w_4' = w_4 + \sqrt{\Delta}x ,$$

$$\Delta = w_1w_2 + w_3w_4 - w_5w_6 - w_7w_8 ,$$

$$\delta(x) = -w_3'w_4' + w_5w_6 + w_7w_8 ,$$

e

$$d\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2} dx .$$

À medida que os oito vértices w_1, \dots, w_8 aproximam-se da condição de fermions livres, $\Delta = 0$, a cota superior tende ao valor exato da função de partição.

Na seção 3, apresentamos uma correspondência entre a reflexão θ e um produto interno no corpo dos números complexos. Desta forma, para o modelo de Oito Vértices, concluímos que a reflexão θ efetuada nas variáveis de Grassmann, álgebras que anticomutam, é equivalente à realização de um produto interno sobre determinadas matrizes relacionadas com a função de partição do modelo.

Na última seção, utilizamos o mapeamento do Modelo de Heisenberg unidimensional quântico no Modelo de Oito Vértices com o auxílio da fórmula de Trotter (veja a seção 2). Em seguida, calculamos as cotas superiores para os modelos XXZ com campo nulo e para o caso mais geral, o modelo $XYZh$.

1. Positividade por Reflexão: Introdução

Para uma introdução à Positividade por Reflexão (PR) seguimos os textos de Fröhlich e colaboradores[**FILS**], Biskup[**Bi**], Seiler[**Se**], Shlosman[**Sh**] e Vignaud[**ViSh**].

Positividade por Reflexão (PR) é uma técnica que usa correlações somente em metade de um espaço dividido por um plano, assegura positividade para certos produtos escalares. A positividade por reflexão foi usada para demonstrações de transição de fase em modelos em redes, por exemplo, estabelece rigorosamente a quebra de simetria em modelo quântico de Heisenberg antiferromagnético.

Restringiremo-nos a uma rede finita $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ de tamanho $N = mn$ (m e n par), $d = 2$, simétrica com respeito a um hiperplano P dividindo perpendicularmente a rede ao meio (P corta as ligações da rede entre duas linhas paralelas vizinhas). Nesta situação, haverá uma decomposição natural da rede Λ

$$\Lambda = \Lambda_+ \cup \Lambda_- ; \Lambda_+ \cap \Lambda_- = \emptyset .$$

Note que o hiperplano P não contem nenhum sítio de Λ .

Analogamente, consideraremos observáveis definidos apenas em um lado Λ_+ ou Λ_- da rede. Dado P , podemos definir as σ -álgebras \mathcal{U}_+ e \mathcal{U}_- dos eventos dependendo apenas das configurações em Λ_+ e Λ_- , respectivamente. Temos

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}_+ \otimes \mathcal{U}_- ,$$

tal que \mathcal{U}_- é reflexão simétrica de \mathcal{U}_+ e vice-versa.

Assim podemos definir o operador de reflexão θ_P agindo sobre as funções $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ sobre o espaço de configurações como

$$[\theta_P f](\sigma) = f(\theta_P \sigma) , \tag{6.1}$$

$$\theta_P^2 = I ,$$

tal que $(\theta_P \sigma)_x = \sigma'_{\theta_P x}$ com $\sigma'_{\theta_P x}$ denotando o valor da configuração θ refletido no ponto x com relação a P .

DEFINIÇÃO 4 (Positividade por Reflexão). Dizemos que uma medida ν sobre Λ_N possui Positividade por Reflexão se

$$\mathbb{E}_\nu (f [\theta_P f]) \geq 0 \quad (6.2)$$

para todo $f \in \mathcal{U}_+$, para todo $P \subset \Lambda_N$ e $\mathbb{E}_\nu (\cdot) \in \mathbb{R}$.

Notamos que $\mathbb{E}_\nu (f [\theta_P f]) = \mathbb{E}_\nu (f) \mathbb{E}_\nu (\theta_P f)$. Assim, teremos positividade por reflexão se

$$\mathbb{E}_\nu (\theta_P f) = \mathbb{E}_\nu (f) . \quad (6.3)$$

Segue de (6.3) e da propriedade $\theta_P^2 = I$ que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\nu (f [\theta_P f]) &= \mathbb{E}_\nu \left(\underbrace{(\theta_P^2)}_{=I} f [\theta_P f] \right) \\ &= \mathbb{E}_\nu (\theta_P (\theta_P [f [\theta_P f]])) \\ &= \mathbb{E}_\nu ([\theta_P f] f) . \end{aligned}$$

Em outras palavras, a média $\mathbb{E}_\nu (\cdot)$ comporta-se como um produto interno e portanto define uma norma sobre os elementos da álgebra dos observáveis.

O espaço definido possui produto interno, pois as condições abaixo são satisfeitas:

- (1) $\mathbb{E}_\nu (f [\theta_P f]) \geq 0$; $\mathbb{E}_\nu (f [\theta_P f]) = 0 \rightarrow f = 0$;
- (2) $\mathbb{E}_\nu (g [\theta_P f]) = \mathbb{E}_\nu ([\theta_P g] f)$;
- (3) $\mathbb{E}_\nu ((g_1 + g_2) [\theta_P f]) = \mathbb{E}_\nu (g_1 [\theta_P f]) + \mathbb{E}_\nu (g_2 [\theta_P f])$;
- (4) $\mathbb{E}_\nu (\lambda g [\theta_P f]) = \mathbb{E}_\nu (g [\theta_P (\lambda f)])$ para $\forall \lambda \in \mathbb{C}$.

Se ν for uma medida de Gibbs e possuir positividade por reflexão, existe operadores \mathcal{O} e \mathcal{C}_i de tal modo que o Hamiltoniano pode ser expresso como

$$H = \mathcal{O} + \theta_P \mathcal{O} + \sum_{i=1}^K \mathcal{C}_i \theta_P \mathcal{C}_i \quad (6.4)$$

tal que os operadores \mathcal{C}_i referem-se às condições de fronteira e K representa o número de tais fronteiras. Esta representação ficará mais clara na próxima seção com aplicação ao modelo de oito vértices, veja também o apêndice (B).

Adotaremos a notação “ $\text{Tr}(\cdot)$ ” para indicar o traço de um operador.

TEOREMA 6.2. Seja $F \in \mathcal{U}_+$ e H da forma (6.4). Se todos os elementos de \mathcal{U}_+ comutarem com todos os elementos de \mathcal{U}_- , então

$$\langle F \theta F \rangle \equiv \frac{\text{Tr} (e^{-\beta H} F \theta F)}{\text{Tr} (e^{-\beta H})} \geq 0 .$$

DEMONSTRAÇÃO. É suficiente provar (veja [FL]) que $\text{Tr}(e^{-\beta H} F \theta F) \geq 0$. Pela fórmula de Trotter temos,

$$e^{-\beta H} = \lim_{n \rightarrow \infty} G_n ,$$

tal que

$$G_n = \left(e^{-(\beta/n)\mathcal{O}} e^{-(\beta/n)\theta_P \mathcal{O}} \left[1 + \frac{\beta}{n} \sum_{i=1}^K C_i \theta_P C_i \right] \right)^n .$$

Assim, o teorema é provado se

$$\text{Tr}(G_n F \theta F) \geq 0. \quad (6.5)$$

Note que todos os elementos em \mathcal{U}_+ comutam com todos os elementos de \mathcal{U}_- .

Em (6.5), todos os elementos com θ (que estão em \mathcal{U}_-) podem ser movidos para a direita de todos os elementos sem θ (que estão em \mathcal{U}_+). Isto mostra que $\text{Tr}(G_n F \theta F)$ é a soma dos termos da forma

$$\begin{aligned} \text{Tr}(D_1 \dots D_m F \theta D_1 \dots \theta D_m \theta F) &= \text{Tr}[D_1 \dots D_m F \theta (D_1 \dots D_m F)] \\ &= \text{Tr}(D_1 \dots D_m F) \text{Tr}(\theta (D_1 \dots D_m F)) \\ &= |\text{Tr}(D_1 \dots D_m F)|^2 \geq 0 , \end{aligned}$$

com $D_1 \dots D_m$ em \mathcal{U}_+ . Aqui usamos o fato $\text{Tr}(A \otimes B) = \text{Tr}(A) \text{Tr}(B)$ para $A \in \mathcal{U}_+$, $B \in \mathcal{U}_-$; $\text{Tr}(\theta A) = \text{Tr}(A)$ para todo $A \in \mathcal{U}_+$. ■

O mapa $f, g \mapsto \mathbb{E}_\nu(f[\theta_P g])$ pode ser visto como uma forma definida bilinear não negativa e, em particular, vale a desigualdade de Schwarz ou desigualdade de Cauchy-Schwarz.

PROPOSIÇÃO 6.3 (Desigualdade de Schwarz). A desigualdade de Schwarz é dada por

$$|\mathbb{E}_\nu(f[\theta_P g])| \leq \{\mathbb{E}_\nu(f[\theta_P f])\}^{\frac{1}{2}} \{\mathbb{E}_\nu(g[\theta_P g])\}^{\frac{1}{2}} . \quad (6.6)$$

DEMONSTRAÇÃO. Após definido um produto interno pela reflexão θ , seja $f + \lambda g$ um elemento de \mathcal{U}_+ , então

$$\mathbb{E}_\nu((f + \lambda g)[\theta_P (f + \lambda g)]) \geq 0 , \quad (6.7)$$

para $\forall \lambda \in \mathbb{R}$ e $\forall f, g \in \mathcal{U}_+$. De (6.7) segue

$$\lambda^2 \mathbb{E}_\nu(g[\theta_P g]) + 2\lambda \mathbb{E}_\nu(f[\theta_P g]) + \mathbb{E}_\nu(f[\theta_P f]) \geq 0 ,$$

esta desigualdade é sempre válida desde que seu discriminante seja menor ou igual a zero. Ou seja,

$$4 \{\mathbb{E}_\nu(f[\theta_P g])\}^2 - 4 \mathbb{E}_\nu(g[\theta_P g]) \mathbb{E}_\nu(f[\theta_P f]) \leq 0 ,$$

que corresponde à desigualdade (6.6). ■

Através da desigualdade (6.6) segue a estimativa do tabuleiro de xadrez. A idéia é que eventos do tipo $\prod_x f_x$, tal que f_x depende somente da vizinhança de x , pode ser dividido/separado um do outro por repetido uso de (6.6) com relação a todos os possíveis planos P , e ao mesmo tempo pode cobrir toda a rede Λ . Desta forma, correlações locais podem ser eficientemente estimadas em termos globais, sistemas não-homogêneos podem ser estimados por sistemas homogêneos. Segue abaixo a proposição devido a Fröhlich e Lieb[FL].

PROPOSIÇÃO 6.4 (Desigualdade do Tabuleiro de Xadrez). *Seja τ um operador de deslocamento em Λ_N , N par, e seja ν uma medida com positividade de reflexão em Λ_N . Seja $\{c_x\}$ uma coleção distinta de hipercubos de tamanho 1, com c_x centrado em x , e associado a c_x um comportamento padrão particular \mathcal{B}_x . Então*

$$\mathbb{E}_\nu \left(\prod_x \mathbb{1}_{\mathcal{B}_x} \right) \leq \prod_x \{ \mathbb{E}_\nu (\chi_{\mathcal{B}_x}^{\Lambda_N}) \}^{1/|\Lambda_N|} .$$

Aqui, $|\Lambda_N|$ denota o número de sítios de Λ_N e

$$\chi_{\mathcal{B}_x}^{\Lambda_N} = \prod_{y-\text{par}} \mathbb{1}_{\mathcal{B}_x \circ \tau^y} \prod_{y-\text{ímpar}} \mathbb{1}_{\mathcal{B}_x^* \circ \tau^y}$$

induz \mathcal{B}_x em toda translação par de c_x e sua imagem refletida \mathcal{B}_x^* em toda translação ímpar de c_x .

DEMONSTRAÇÃO. Veja Fröhlich e Lieb[FL] ou veja o apêndice A de Nussinov[Nu].

■

Veja no apêndice (B) um exemplo do uso da estimativa do tabuleiro de xadrez.

2. Aplicação da PRT ao Modelo de Oito Vértices

Para a aplicação da desigualdade do tabuleiro de xadrez à função de partição do Modelo de Oito Vértices definiremos um produto interno com as propriedades 1-4 (veja página 59). Notaremos que tal reflexão θ torce a rede Λ , por isto definiremos este procedimento como *Positividade por Reflexão Torcida* (PRT).

Do teorema 3.5 (veja página 31), temos

$$\begin{aligned} Z_{8\nu} &= \mathbb{E}_\mu (\text{Pf}(Q)) \\ &= \mathbb{E}_\mu \left(\sqrt{\det(Q)} \right) , \end{aligned}$$

tal que $\mathbb{E}_\mu ((\cdot)) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^N d\mu(x_j) \right) (\cdot)$, $d\mu(x_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x_j^2} dx_j$, e

$$Q = -K^{-1} + A .$$

A matriz K^{-1} é dada por

$$K^{-1} = \text{diag}(K_1^{-1}, K_2^{-1}, \dots, K_N^{-1}), \quad (6.8)$$

tal que

$$K_j^{-1} = \frac{1}{\sqrt{w_2}} \begin{bmatrix} 0 & w_7 & -w'_3(x_j) & w_6 \\ -w_7 & 0 & w_5 & -w'_4(x_j) \\ w'_3(x_j) & -w_5 & 0 & w_8 \\ -w_6 & w'_4(x_j) & -w_8 & 0 \end{bmatrix}, \quad (6.9)$$

com

$$\begin{cases} w'_3(x_j) = w_3 - \sqrt{\Delta}x_j, \\ w'_4(x_j) = w_4 + \sqrt{\Delta}x_j \end{cases}$$

e

$$A = \Pi \otimes X + \Pi^n \otimes Y - \Pi^{-1} \otimes X^t - \Pi^{-n} \otimes Y^t. \quad (6.10)$$

O índice t de M^t representa a transposição de uma matriz: $M_{i,j}^t = M_{j,i}$. Observamos que Q é uma matriz antissimétrica, $Q = -Q^t$.

Segue de (6.8) e (6.10) que

$$Q = -\oplus K_j^{-1} + \Pi \otimes X + \Pi^n \otimes Y - \Pi^{-1} \otimes X^t - \Pi^{-n} \otimes Y^t.$$

De acordo com (3.4), não necessitamos considerar

$$w_5 = w_6, \quad (6.11)$$

$$w_7 = w_8.$$

Seguiremos o formalismo proposto por Pinson e Spencer[PS].

Adotaremos a notação,

$$\phi = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \phi_i \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \phi_i = P_i \otimes \phi_i,$$

tal que ϕ_i ocupa a posição i do vetor coluna P_i (matriz $N \times 1$) sendo

$$\phi_i = \begin{pmatrix} H_i \\ V_i \\ \bar{H}_i \\ \bar{V}_i \end{pmatrix}, \quad (6.12)$$

em que H representa a direção horizontal e V a direção vertical. Temos o produto interno dado por

$$\begin{aligned} (\phi, Q\phi) &= \phi^t Q\phi \\ &= \sum_{i,j} (\phi_i, Q_{ij}\phi_j). \end{aligned}$$

Seguindo esta notação, o Pfaffiano da matriz Q é

$$\begin{aligned} \text{Pf}(Q) &= \int \prod_l dH_l dV_l d\bar{H}_l d\bar{V}_l e^{\frac{1}{2}(\phi)^t Q(\bar{x})\phi} \\ &= \int \prod_l d\phi_l e^{\frac{1}{2}(\phi, Q(\bar{x})\phi)}, \end{aligned}$$

com $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ e

$$\begin{aligned} (\phi, Q(\bar{x})\phi) &= -(\phi, K^{-1}(\bar{x})\phi) + (\phi, \Pi \otimes X\phi) + (\phi, \Pi^m \otimes Y\phi) - \\ &\quad (\phi, \Pi^{-1} \otimes X^t\phi) - (\phi, \Pi^{-m} \otimes Y^t\phi). \end{aligned}$$

sendo $K^{-1} = \text{diag}(K_1^{-1}, K_2^{-1}, \dots, K_N^{-1})$ e $K_l^{-1} = K^{-1}(x_l)$.

Temos

$$\begin{aligned} (\phi, \Pi \otimes X\phi) &= \sum_{i,j} (\phi_i, (\Pi \otimes X)(P_j \otimes \phi_j)) = \sum_{i,j} (\phi_i, (\Pi P_j \otimes X\phi_j)) \\ &= \sum_{i,j} (P_i \otimes \phi_i, (P_{j-1} \otimes X\phi_j)) = \sum_{i,j} \delta_{i,j-1} \phi_i X\phi_j \\ &= \sum_i \bar{H}_i H_{i+1} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} (\phi_i, K^{-1}(\bar{x})\phi_j) &= (\phi_i, K^{-1}(x_j)\phi_j)\delta_{i,j} \\ &= (\phi_i, K^{-1}(x_i)\phi_i)\delta_{i,j}, \end{aligned}$$

pois $K^{-1}(\bar{x}) = \oplus K_j^{-1}$ é uma matriz bloco diagonal.

Como no modelo de oito vértices, cada ponto l da rede retangular estará associado a uma célula com quatro vértices. Veja a figura 1.

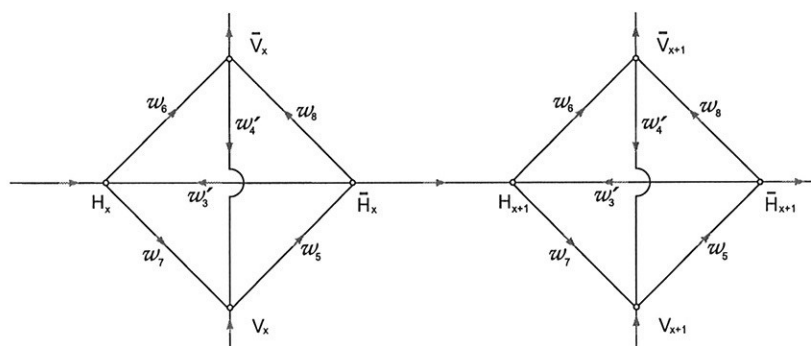


Figura 1: Célula básica centrada nos pontos x e $x + 1$ construída de acordo com a matriz K^{-1} e a notação (6.12).

$$\text{Usaremos } X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } Y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

X e Y representam as ligações horizontal e vertical respectivamente, compatível com o produto

$$\begin{aligned} (\phi_i, X\phi_j) &= (\phi_i)^t X\phi_j \\ &= (H_i, V_i, \bar{H}_i, \bar{V}_i) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_j \\ V_j \\ \bar{H}_j \\ \bar{V}_j \end{pmatrix} \\ &= \bar{H}_i H_j \end{aligned}$$

e

$$(\phi_i, Y\phi_j) = \bar{V}_i V_j.$$

Como indicado anteriormente, as variáveis de Grassmann obedecem às propriedades

$$\begin{cases} \int dH_x H_x = 1 \\ \int dH_x = 0 \end{cases}$$

e

$$H_x H_y + H_y H_x = 0.$$

Portanto,

$$H_x^2 = 0.$$

Para aliviar a notação, definiremos uma média

$$\langle \dots \rangle_0 = \int \prod_l d\phi_l (\dots), \quad (6.13)$$

correspondendo à própria integração nas variáveis de Grassmann. Ao todo, são 4^N variáveis de Grassmann, tal que N é o número de sítios da rede Λ .

Como

$$\text{Pf}(Q) = \int \prod_l d\phi_l e^{\frac{1}{2} \sum_{i,j} (\phi_i, Q_{i,j}(\vec{x}) \phi_j)}$$

e

$$\sum_{i,j} (\phi_i, Q_{i,j}(\vec{x}) \phi_j) = - \sum_{i=1}^N (\phi_i, K^{-1}(x_i) \phi_i) + \sum_{i,j=1}^N (\phi_i, A_{i,j} \phi_j)$$

definiremos uma outra média,

$$\begin{aligned} \langle \dots \rangle &= \int \prod_l d\phi_l (\dots) e^{\frac{1}{2} \sum_{i,j} (\phi_i, A_{i,j} \phi_j)} \\ &= \left\langle (\dots) e^{\frac{1}{2} (\phi, A\phi)} \right\rangle_0, \end{aligned} \quad (6.14)$$

A é dada por (6.10). A média considerada é sobre um modelo livre na ausência dos oito vértices. Notamos que

$$\langle 1 \rangle = \text{Pf}(A) = \sqrt{\det(A)} = 1 \quad (6.15)$$

Ou seja, a média (6.14) está normalizada.

Com esta definição de média, temos

$$\text{Pf}(Q) = \left\langle e^{\frac{-1}{2} \sum_{i,j} (\phi_i, K^{-1}(\vec{x}) \phi_j)} \right\rangle \quad (6.16)$$

A rede definida pela matriz “ A ” é uma rede contendo somente as ligações externas, ligações horizontais (matriz X) e verticais (matriz Y). “ A ” está associada a um problema de cobertura da rede Λ por dímeros, havendo apenas uma única cobertura possível não nula. As ligações internas são adicionadas à rede através da matriz $K^{-1}(\vec{x})$, e o modelo torna-se não livre. Provaremos que a rede definida por “ A ” satisfaz a positividade por reflexão, em seguida, adicionaremos a matriz $K^{-1}(\vec{x})$ e calcularemos sua média. A reflexão adotada deverá manter inalterada a matriz $K^{-1}(\vec{x})$.

Seja F uma função das variáveis ϕ_k ’s com $k = 1, 2, \dots, n$ e $\theta(F)$ uma função das variáveis $\phi'_{\theta(k)}$ ’s. Isto é, se $F = F(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n)$, então $\theta(F) = F(\phi'_{\theta(1)}, \phi'_{\theta(2)}, \dots, \phi'_{\theta(n)})$.

Desejamos provar a positividade por reflexão para $\langle \dots \rangle$ definida em (6.14).

Definiremos o mapa de reflexão θ

$$\theta : \Lambda_{\pm} \rightarrow \Lambda_{\mp} . \quad (6.17)$$

Esta reflexão induzirá um mapa θ

$$\theta : \mathcal{U}_{\Lambda_+} \rightarrow \mathcal{U}_{\Lambda_-} , \quad (6.18)$$

tal que \mathcal{U}_{Λ_+} é gerada pelas variáveis pertencentes a Λ_+ .

Usaremos a reflexão θ da seguinte forma (veja figura (2))

$$\theta : \begin{cases} \theta H_{k,l} = -\overline{H}_{\theta(k,l)} , \\ \theta V_{k,l} = -\overline{V}_{\theta(k,l)} , \\ \theta \overline{H}_{k,l} = H_{\theta(k,l)} , \\ \theta \overline{V}_{k,l} = V_{\theta(k,l)} . \end{cases}$$

A reflexão θ em ϕ pode ser representada pela operação

$$\begin{aligned} \phi'_{\theta(k,l)} &= \theta \phi_{k,l} \rightarrow \\ \begin{bmatrix} -\overline{H}_{\theta(k,l)} \\ -\overline{V}_{\theta(k,l)} \\ H_{\theta(k,l)} \\ V_{\theta(k,l)} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{k,l} \\ V_{k,l} \\ \overline{H}_{k,l} \\ \overline{V}_{k,l} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (6.19)$$

θ é uma reflexão composta: reflexão de cada sítio (k, l) da rede através da mudança de seus índices $\theta(k, l)$; reflexão das variáveis de Grassmann com relação às direções horizontal e vertical.

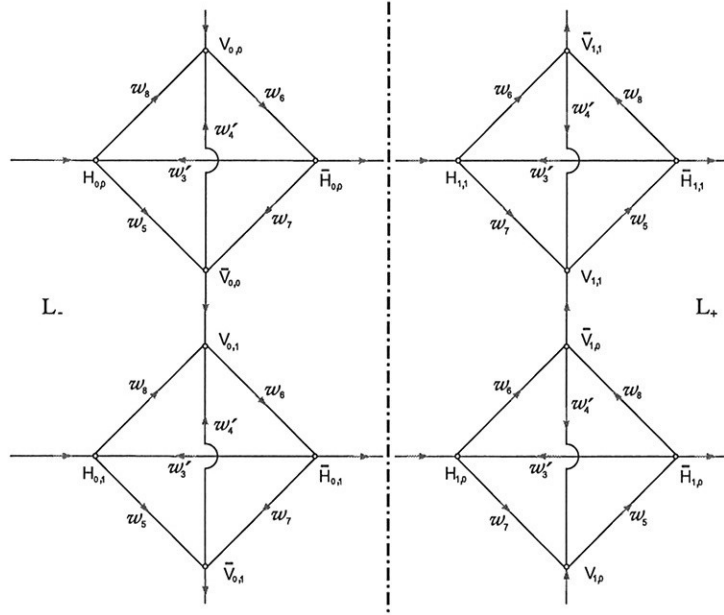


Figura 2: Reflexão de Λ_+ (lado direito) em Λ_- (lado esquerdo). A linha tracejada representa o plano θ de reflexão. Em Λ_+ , a ligação entre os sítios $H_{1,1}$ e $V_{1,1}$ possui peso w_7 , enquanto em $\theta\Lambda_+$, a ligação entre os sítios $H_{0,0}$ e $V_{0,0}$ possui peso igual a w_8 (no caso de $w_7 \neq w_8$ veja (3.4)). Portanto, θ preserva a rede Λ com seus pesos e ligações.

Reflexão nas variáveis:: A reflexão θ com relação às variáveis de Grassmann possui as propriedades:

- θ é uma matriz ortogonal, ou seja, $\theta^{-1} = \theta^t$. Assim, $\theta\theta^t = I_4$, tal que I_4 é a matriz identidade 4×4 ;
- $\det(\theta) = 1$;
- θ é uma matriz de rotação;
- $\theta^2 = -I_4$. Assim, $\theta^2\phi = -\phi$. Mas esta transformação não altera o $\text{Pf}(Q)$, pois todos os termos de $(\phi_i, Q\phi_j)$ apresentam-se como a soma de pares nas variáveis de Grassmann ;
- $\theta = \theta_x\theta_y = \theta_y\theta_x$. Logo, θ é composto por duas reflexões: θ_x (θ_y) é a reflexão em relação ao plano perpendicular à direção horizontal (vertical).

$$\theta_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \theta_y = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Reflexão nos índices:: A reflexão θ com relação aos índices da rede Λ possui as propriedades:

- A reflexão nos índices é realizada assim,

$$\begin{cases} \theta_x k = -k + 1, \\ \theta_y l = -l + 1. \end{cases}$$

Portanto, $\theta(k, l) = (\theta_x k, \theta_y l) = (-k + 1, -l + 1)$. Observe que, para reflexão nos índices, $\theta_x^t = \theta_x$ e $\theta_y^t = \theta_y$. Isto implica em $\theta_x^2 = \theta_y^2 = 1$;

Reflexão Geral:: A reflexão θ de um modo geral possui as propriedades:

- θ é um morfismo ou homomorfismo: $\theta(H_{k,l}V_{k,l}) = \theta(H_{k,l})\theta(V_{k,l})$ e $\theta(H_{k,l} + V_{k,l}) = \theta(H_{k,l}) + \theta(V_{k,l})$.

-

$$\phi_{k,l} = \theta^t \phi'_{\theta(k,l)} \rightarrow$$

$$\begin{bmatrix} H_{k,l} \\ V_{k,l} \\ \bar{H}_{k,l} \\ \bar{V}_{k,l} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\bar{H}_{\theta(k,l)} \\ -\bar{V}_{\theta(k,l)} \\ H_{\theta(k,l)} \\ V_{\theta(k,l)} \end{bmatrix} \quad (6.20)$$

Pois, por exemplo, $\theta^t(-\bar{H}_{\theta(k,l)}) = H_{(\theta^t[\theta(k,l)])} = H_{k,l}$.

- $\theta : \Lambda_{\pm} \rightarrow \Lambda_{\mp}$.
- $\theta(\phi_i \phi_j) = \theta(\phi_i)\theta(\phi_j) = \theta^t(\phi_i)\theta^t(\phi_j) = \theta^t(\phi_i \phi_j)$ para $\forall i, j = 1, 2, 3, 4$, tal que $\phi_1 = H$, $\phi_2 = V$, $\phi_3 = \bar{H}$, $\phi_4 = \bar{V}$. Assim, $\theta^t = \theta \rightarrow \theta^2 = 1$, sendo esta propriedade válida quando θ agir sobre um número par de variáveis de Grassmann. Neste caso específico, \mathcal{U}_{Λ_+} comuta com \mathcal{U}_{Λ_-} .
- $\theta^2 = I$. Esta propriedade segue do Teorema 6.7.

Assim,

$$\begin{array}{ll} H_{k,l} \xrightarrow{\theta} -\bar{H}_{\theta(k,l)}, & H_{k,l} \xrightarrow{\theta^t} \bar{H}_{\theta^t(k,l)}, \\ V_{k,l} \xrightarrow{\theta} -\bar{V}_{\theta(k,l)}, & V_{k,l} \xrightarrow{\theta^t} \bar{V}_{\theta^t(k,l)}, \\ \bar{H}_{k,l} \xrightarrow{\theta} H_{\theta(k,l)}, & \bar{H}_{k,l} \xrightarrow{\theta^t} -H_{\theta^t(k,l)}, \\ \bar{V}_{k,l} \xrightarrow{\theta} V_{\theta(k,l)}, & \bar{V}_{k,l} \xrightarrow{\theta^t} -V_{\theta^t(k,l)}. \end{array}$$

Observemos que nos índices $\theta^t(k, l) = \theta(k, l)$.

Notamos que

$$(\phi, Q(\vec{x})\phi) = \sum_{l=-m+1}^m \sum_{k=-n+1}^n Q_{k,l} \quad (6.21)$$

tal que

$$\begin{aligned} Q_{k,l} = & (\bar{H}_{k,l}H_{k+1,l} + \bar{H}_{k-1,l}H_{k,l}) + (\bar{V}_{k,l}V_{k,l+1} + \bar{V}_{k,l-1}V_{k,l}) + \\ & 2[w'_3(x_{k,l})\bar{H}_{k,l}H_{k,l} + w'_4(x_{k,l})\bar{V}_{k,l}V_{k,l} + w_5V_{k,l}\bar{H}_{k,l} + \\ & w_6H_{k,l}\bar{V}_{k,l} + w_7H_{k,l}V_{k,l} + w_8\bar{H}_{k,l}\bar{V}_{k,l}]. \end{aligned} \quad (6.22)$$

2. Aplicação da PRT ao Modelo de Oito Vértices

Usando as propriedades de θ e das variáveis de Grassmann, temos, por exemplo,

$$\begin{aligned}\theta^{-1}(w_5 V_{k,l} \overline{H}_{k,l}) &= w_5 \theta^{-1}(V_{k,l}) \theta^{-1}(\overline{H}_{k,l}) \\ &= w_5 (\overline{V}_{\theta^{-1}(k,l)}) (-H_{\theta^{-1}(k,l)}) \\ &= w_5 (\overline{V}_{(-k+1,-l+1)}) (-H_{(-k+1,-l+1)}) \\ &= w_5 H_{(-k+1,-l+1)} \overline{V}_{(-k+1,-l+1)} \\ &= \theta(w_5 V_{k,l} \overline{H}_{k,l}),\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\theta^{-1}(w_8 \overline{H}_{k,l} \overline{V}_{k,l}) &= w_8 \theta^{-1}(\overline{H}_{k,l}) \theta^{-1}(\overline{V}_{k,l}) \\ &= w_8 (-H_{\theta^{-1}(k,l)}) (-V_{\theta^{-1}(k,l)}) \\ &= w_8 H_{(-k+1,-l+1)} V_{(-k+1,-l+1)} \\ &= \theta(w_8 \overline{H}_{k,l} \overline{V}_{k,l}).\end{aligned}$$

Aplicando θ^{-1} na expressão (6.22), encontramos

$$\begin{aligned}\theta^{-1}(Q_{k,l}) &= \theta(Q_{k,l}) = \\ &= (\overline{H}_{-k,-l+1} H_{-k+1,-l+1} + \overline{H}_{-k+1,-l+1} H_{-k+2,-l+1}) + \\ &(\overline{V}_{-k+1,-l} V_{-k+1,-l+1} + \overline{V}_{-k+1,-l+1} V_{-k+1,-l+2}) + \\ &2 [w'_3(x_{k,l}) \overline{H}_{-k+1,-l+1} H_{-k+1,-l+1} + w'_4(x_{k,l}) \overline{V}_{-k+1,-l+1} V_{-k+1,-l+1} + \\ &w_6 V_{-k+1,-l+1} \overline{H}_{-k+1,-l+1} + w_5 H_{-k+1,-l+1} \overline{V}_{-k+1,-l+1} + \\ &w_8 H_{-k+1,-l+1} V_{-k+1,-l+1} + w_7 \overline{H}_{-k+1,-l+1} \overline{V}_{-k+1,-l+1}]\end{aligned}$$

$$= Q_{-k+1,-l+1}.$$

Por exemplo, $\theta^{-1}(Q_{-1,-1}) = Q_{2,2}$.

Podemos expressar (6.21) como

$$(\phi, Q\phi) = Q_{k>0} + Q_{k<0} + 2 \sum_{l=-m+1}^m (\overline{H}_{0,l} H_{1,l} + \overline{H}_{n,l} H_{-n+1,l}),$$

tal que

$$Q_{k>0} = \sum_{l=-m+1}^m \sum_{k=1}^n Q_{k,l}$$

e

$$Q_{k<0} = \sum_{l=-m+1}^m \sum_{k=-n+1}^0 Q_{k,l}.$$

Utilizando a reflexão θ , temos

$$\begin{aligned}(\phi, Q\phi) &= Q_{k>0} + \overbrace{\theta\theta^{-1}}^I Q_{k<0} + 2 \sum_{l=-m+1}^m \left(-H_{1,l} \overbrace{\theta\theta^{-1}}^I \overline{H}_{0,l} + \overline{H}_{n,l} \overbrace{\theta\theta^{-1}}^I H_{-n+1,l} \right) \\ &= Q_{k>0} + \theta(Q_{k>0}) + 2 \sum_{l=-m+1}^m (H_{1,l} \theta(H_{1,-l+1}) + \overline{H}_{n,l} \theta(\overline{H}_{n,-l+1})),\end{aligned}\tag{6.23}$$

tal que $\theta^{-1}(Q_{k<0}) = Q_{k>0}$, $\theta^{-1}(-\bar{H}_{0,l}) = H_{1,-l+1}$ e $\theta^{-1}(H_{-n+1,l}) = \bar{H}_{n,-l+1}$.

Notamos que (6.23) ainda não está na forma (6.4), pois

$$(\phi, Q\phi) = Q_{k>0} + \theta(Q_{k>0}) + 2 \sum_{l=-m+1}^m \sum_{i=1}^2 C_{i,l} \theta(\mathcal{D}_{i,l}), \quad (6.24)$$

tal que $C_{1,l} = H_{1,l}$, $C_{2,l} = \bar{H}_{n,l}$, $\mathcal{D}_{1,l} = H_{1,-l+1}$, $\mathcal{D}_{2,l} = \bar{H}_{n,-l+1}$.

Também notamos que a soma dos termos de fronteira entre os planos Λ_- e Λ_+ ,

$$\sum_{l=-m+1}^m H_{1,l} \theta(H_{1,-l+1}) = \sum_{l=-m+1}^m H_{1,-l+1} \theta(H_{1,l}),$$

é uma convolução no índice l . Assim, faremos uma transformação de Fourier que diagonaliza tal índice. Para obtermos uma expressão semelhante à (6.4), definiremos as novas variáveis de Grassmann,

$$\mathcal{H}_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-\frac{\pi}{4}i} H_{k,l} + e^{\frac{\pi}{4}i} H_{k,-l+1}), \quad (6.25)$$

$$\bar{\mathcal{H}}_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{\frac{\pi}{4}i} \bar{H}_{k,l} + e^{-\frac{\pi}{4}i} \bar{H}_{k,-l+1}),$$

$$\mathcal{V}_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{\frac{\pi}{4}i} V_{k,l} + e^{-\frac{\pi}{4}i} V_{k,-l+1}),$$

$$\bar{\mathcal{V}}_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-\frac{\pi}{4}i} \bar{V}_{k,l} + e^{\frac{\pi}{4}i} \bar{V}_{k,-l+1}). \quad (6.26)$$

As transformações inversas são,

$$H_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{\frac{\pi}{4}i} \mathcal{H}_{k,l} + e^{-\frac{\pi}{4}i} \mathcal{H}_{k,-l+1}),$$

$$\bar{H}_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-\frac{\pi}{4}i} \bar{\mathcal{H}}_{k,l} + e^{\frac{\pi}{4}i} \bar{\mathcal{H}}_{k,-l+1}),$$

$$V_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-\frac{\pi}{4}i} \mathcal{V}_{k,l} + e^{\frac{\pi}{4}i} \mathcal{V}_{k,-l+1}),$$

$$\bar{V}_{k,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{\frac{\pi}{4}i} \bar{\mathcal{V}}_{k,l} + e^{-\frac{\pi}{4}i} \bar{\mathcal{V}}_{k,-l+1}).$$

Observamos que $\mathcal{H}_{k,l}$ possui as propriedades das variáveis de Grassmann, pois $\mathcal{H}_{k,l} \mathcal{H}_{k,l} = \frac{1}{2} (H_{k,l} H_{k,-l+1} + H_{k,-l+1} H_{k,l}) = 0$ e assim para as outras novas variáveis.

Usando o fato de $e^{\frac{\pi}{2}i} = i$ e $e^{-\frac{\pi}{2}i} = -i$, obtemos

$$2\mathcal{H}_{1,l} \theta(\mathcal{H}_{1,l}) = -i H_{1,l} \theta(H_{1,l}) + i H_{1,-l+1} \theta(H_{1,-l+1}) +$$

$$H_{1,l} \theta(H_{1,-l+1}) + H_{1,-l+1} \theta(H_{1,l}).$$

Realizando a soma no índice l , encontramos

$$\sum_{l=-m+1}^m \mathcal{H}_{1,l} \theta(\mathcal{H}_{1,l}) = \sum_{l=-m+1}^m H_{1,l} \theta(H_{1,-l+1}).$$

E, para cada termo da expressão (6.22), temos, por exemplo,

$$\begin{aligned} \sum_{l=-m+1}^m \bar{H}_{k,l} H_{k+1,l} &= \frac{1}{2} \sum_{l=-m+1}^m (\bar{\mathcal{H}}_{k,l} \mathcal{H}_{k+1,l} + \bar{\mathcal{H}}_{k,-l+1} \mathcal{H}_{k+1,-l+1} + \\ &\quad -i \bar{\mathcal{H}}_{k,l} \mathcal{H}_{k+1,-l+1} + i \bar{\mathcal{H}}_{k,-l+1} \mathcal{H}_{k+1,l}) \\ &= \sum_{l=-m+1}^m \bar{\mathcal{H}}_{k,l} \mathcal{H}_{k+1,l} \end{aligned}$$

Assim, todos os termos de $\theta(Q_{k>0})$ são mapeados em $Q_{k<0}$ pela reflexão θ .

Finalmente, usando (6.25-6.26), reescrevemos (6.24) na forma da expressão (6.4),

$$\begin{aligned} (\phi, Q\phi) &= (\varphi, Q\varphi) \\ &= Q_{k>0} + \theta(Q_{k>0}) + 2 \sum_{l=-m+1}^m (\mathcal{H}_{1,l} \theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \bar{\mathcal{H}}_{n,l} \theta(\bar{\mathcal{H}}_{n,l})) , \end{aligned} \tag{6.27}$$

tal que $\varphi = (\varphi_1 \dots \varphi_N)^t$ e

$$\varphi_i = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_i \\ \mathcal{V}_i \\ \bar{\mathcal{H}}_i \\ \bar{\mathcal{V}}_i \end{pmatrix} , \tag{6.28}$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. Para os elementos de integração, temos

$$\prod_{k,l} d\phi_{k,l} = 4 \prod_{k,l} d\varphi_{k,l} .$$

Portanto, o Hamiltoniano representado pela matriz Q possui positividade por reflexão. Provaremos, a seguir, com todos os detalhes, esta afirmação.

Com as variáveis de Grassmann ϕ , necessitamos em $\theta(\Lambda_-)$ reordenar os índices da rede refletida para obtermos a rede Λ_+ (veja na figura (3) o que ocorre com Λ_- após a reflexão θ). O processo de reordenação será estabelecido no Teorema 6.7.

Se usarmos as novas variáveis de Grassmann φ definidas em (6.28) e (6.25-6.26), a rede $\theta(\Lambda_-)$ ficará pareada com Λ_+ (veja na expressão (6.27) os termos de fronteira que serão quebradas pela reflexão θ).

TEOREMA 6.5 (Média de um número ímpar de variáveis de Grassmann na rede Λ). *Seja Λ uma rede retangular. Para qualquer produto das variáveis de Grassmann, $C_1^{i_1} C_2^{i_2} \dots C_N^{i_N}$, tal que $C_j = H_j, \bar{H}_j, \bar{V}_j, V_j$, ou seja, C_j é uma das quatro variáveis de*

Grassmann da rede Λ com $j = 1, 2, 3, \dots, N$; $i_j = 0, 1$; $p = \sum_{j=1}^N i_j$ é o número de termos; teremos

$$\left\langle \underbrace{(C_1^{i_1} C_2^{i_2} \dots C_N^{i_N})}_{p \text{ termos}} e^{\frac{1}{2}(\phi, Q\phi)} \right\rangle_{\Lambda}^{\Lambda} = 0 ,$$

se p for ímpar.

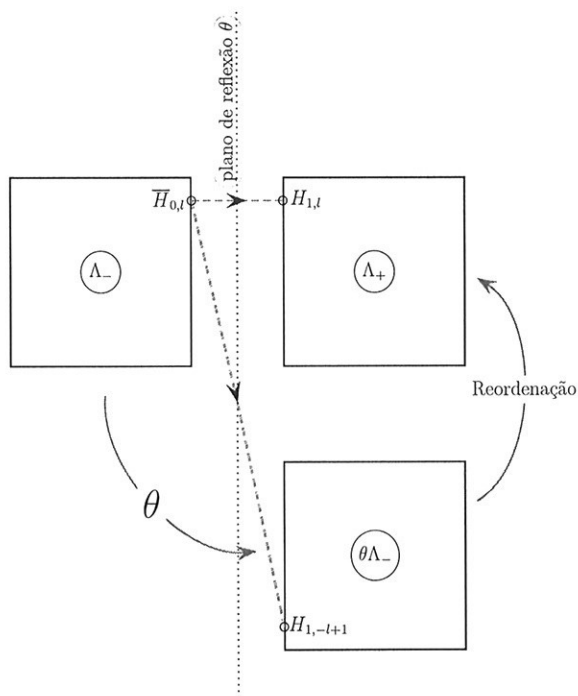


Figura 3: θ reflete a rede Λ_- em $\theta(\Lambda_-)$. A ligação $\overline{H}_{0,l}H_{1,l}$ é quebrada pelo plano θ de reflexão. Na reflexão, o ponto $\overline{H}_{0,l}$ é mapeado em $H_{1,-l+1}$ pela operação $\theta(\overline{H}_{0,l}) = H_{1,-l+1}$. E, após a reordenação, obtemos a rede Λ_+ .

DEMONSTRAÇÃO. Na integral $\left\langle \underbrace{(C_1^{i_1} C_2^{i_2} \dots C_N^{i_N})}_{p \text{ ímpar termos}} \underbrace{e^{\frac{1}{2}(\phi, Q\phi)}}_{\text{num. par termos}} \right\rangle_0^\Lambda$ temos p ímpar termos no produto $(C_1^{i_1} C_2^{i_2} \dots C_N^{i_N})$ das variáveis de Grassmann e sempre um número par $(0, 2, 4, 6, \dots)$ de termos em $e^{\frac{1}{2}(\phi, Q\phi)} = \prod_{i,j} e^{\frac{1}{2}(\phi_i, Q_{i,j}(\vec{x})\phi_j)}$ das variáveis de Grassmann. Logo, o produto de $(C_1^{i_1} C_2^{i_2} \dots C_N^{i_N})$ e $e^{\frac{1}{2}(\phi, Q\phi)}$ possui um número ímpar de variáveis de Grassmann. Notamos que a integração é realizada sobre 4^N variáveis de Grassmann (veja (6.13)). Portanto, a integral $\left\langle \underbrace{(C_1^{i_1} C_2^{i_2} \dots C_N^{i_N})}_{p \text{ termos}} e^{\frac{1}{2}(\phi, Q\phi)} \right\rangle_0^\Lambda$ é nula. ■

TEOREMA 6.6. Seja $F = \prod_{k=-n+1}^n \prod_{l=-m+1}^m e^{-(\phi_k, K^{-1}(x_{k,l})\phi_l)}$ uma função dada pela soma de termos com um número par de variáveis de Grassmann, então

$$\begin{aligned} \langle F\theta(F) \rangle &= \langle \theta(F)F \rangle \\ &= \langle F\theta^t(F) \rangle \\ &= \langle \theta^t(F)F \rangle . \end{aligned}$$

A média/integração $\langle (\cdot) \rangle$ é dada por (6.14).

DEMONSTRAÇÃO. Segue diretamente das propriedades de θ quando atua em termos com um número par nas variáveis de Grassmann. Neste caso, teremos $\theta^t = \theta \rightarrow \theta^2 = 1$.

■

Notamos que apesar de \mathcal{U}_{Λ_+} não comutar com \mathcal{U}_{Λ_-} , segue todas as propriedades de uma positividade por reflexão usual[FILS].

Agora analisaremos $\langle \theta(\Lambda_-) \rangle$. Antes, observamos que a reflexão θ nos índices gera

$$\theta \left(\sum_{l=-m+1}^m \right) = \sum_{l=m}^{-m+1} \xrightarrow[\text{Reordenação}]{l \leftrightarrow -l+1} \sum_{l=-m+1}^m, \quad (6.29)$$

$$\theta \left(\sum_{k=-n+1}^0 \right) = \sum_{k=n}^1 \xrightarrow[\text{Reordenação}]{} \sum_{k=1}^n,$$

ou seja, quando se aplica a reflexão θ em Λ_- a ordem da soma é alterada. Assim, teremos que reordenar os índices de $\langle \theta(\Lambda_-) \rangle$ para compararmos com $\langle \Lambda_+ \rangle$.

Vamos, através de três exemplos muito simples, visualizar e induzir o que ocorre com $\langle \theta(\Lambda_-) \rangle$:

Exemplo 1 - Variáveis Horizontais. Vejamos a integração

$$\int dH_{-1}dH_0dH_1dH_2 (H_2H_1H_0H_{-1}) = 1, \quad (6.30)$$

em uma rede $\tilde{\Lambda}$ com quatro sítios: 2, 1, 0, -1. Crio uma reflexão $\tilde{\theta}$ na direção horizontal,

$$2 \xleftrightarrow{\tilde{\theta}} -1,$$

$$1 \xleftrightarrow{\tilde{\theta}} 0.$$

A reflexão $\tilde{\theta}$ é dada por $k \leftrightarrow -k + 1$ para $k = 2, 1, 0, -1$. Em $\tilde{\Lambda}_+$ temos os sítios 1 e 2; em $\tilde{\Lambda}_-$ temos os sítios -1 e 0. Usando a reflexão $\tilde{\theta}$, (6.30) pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} 1 &= \underbrace{\int dH_1dH_2 (H_2H_1)}_{\in \tilde{\Lambda}_+} \underbrace{\int dH_{-1}dH_0 (H_0H_{-1})}_{\in \tilde{\Lambda}_-} \\ &= \underbrace{\langle H_2H_1 \rangle_0^{\tilde{\Lambda}_+}}_{=1} \underbrace{\langle H_0H_{-1} \rangle_0^{\tilde{\Lambda}_-}}_{=1} \\ &= \langle H_2H_1 \rangle_0^{\tilde{\Lambda}_+} \langle \tilde{\theta}(H_1H_2) \rangle_0^{\tilde{\Lambda}_-}, \end{aligned}$$

pois $\tilde{\theta}$ possui a propriedade de morfismo: $\tilde{\theta}(H_1H_2) = \tilde{\theta}(H_1)\tilde{\theta}(H_2) = H_0H_{-1}$.

Na equação acima, observamos que a ordem dos H 's em $\langle \overleftarrow{H_2H_1} \rangle_0^{\tilde{\Lambda}_+}$ e $\langle \tilde{\theta}(\overleftarrow{H_1H_2}) \rangle_0^{\tilde{\Lambda}_-}$ é diferente. A seta superior indica a ordem em cada média/integração. Portanto,

$$\langle \tilde{\theta}(\overleftarrow{H_1H_2}) \rangle_0^{\tilde{\Lambda}_-} = \langle \overleftarrow{H_2H_1} \rangle_0^{\tilde{\Lambda}_+}.$$

Exemplo 2 - Variáveis Verticais. Se em $\tilde{\Lambda}$ houver sítios verticais, que representaremos por V_2, V_1, V_0 e V_{-1} , notaremos que com a reflexão $\tilde{\theta}$ todas as quatro variáveis de Grassmann V_l passam (são refletidas) de um plano ao outro preservando a simetria pela transformação $l \leftrightarrow -l + 1$ para $l = -1, 0, 1, 2$. Assim,

$$\begin{aligned} 1 &= \int dV_{-1}dV_0dV_1dV_2 (V_2V_1V_0V_{-1}) \\ &= \langle V_2V_1V_0V_{-1} \rangle_0^{\tilde{\Lambda}^+} \\ &\xrightarrow{\tilde{\theta}} \int dV_2dV_1dV_0dV_{-1} (V_{-1}V_0V_1V_2) \\ &= \langle V_{-1}V_0V_1V_2 \rangle_0^{\tilde{\Lambda}^-} \\ &= \left\langle \tilde{\theta}(V_2V_1V_0V_{-1}) \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}^-} . \end{aligned}$$

Partindo de $\left\langle \tilde{\theta}(V_2V_1V_0V_{-1}) \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}^-} = \int dV_2dV_1dV_0dV_{-1} (V_{-1}V_0V_1V_2)$ obtemos a integração original $\langle V_2V_1V_0V_{-1} \rangle_0^{\tilde{\Lambda}^+} = \int dV_{-1}dV_0dV_1dV_2 (V_2V_1V_0V_{-1})$ através de uma *reordenação* de duas formas equivalentes:

a: Permutamos $dV_2dV_1dV_0dV_{-1}$ e $V_{-1}V_0V_1V_2$ para $(-1)^m dV_{-1}dV_0dV_1dV_2$ e $(-1)^m V_2V_1V_0V_{-1}$, respectivamente. Em cada permutação teremos $(-1)^m$ como sinal da anticomutação das variáveis de Grassmann, tal que m é número de variáveis dividido por dois. Neste caso, $m = 2$, pois temos quatro variáveis. Logo,

$$\begin{aligned} &\int dV_2dV_1dV_0dV_{-1} (V_{-1}V_0V_1V_2) \\ &= \int (-1)^m dV_{-1}dV_0dV_1dV_2 (-1)^m (V_2V_1V_0V_{-1}) \\ &= \int dV_{-1}dV_0dV_1dV_2 (V_2V_1V_0V_{-1}) , \end{aligned}$$

para $m \in \mathbb{N}$.

b: Reindexo as quatro variáveis, $\mathcal{R} : l \leftrightarrow -l + 1$. Obtemos, assim,

$$\int dV_2dV_1dV_0dV_{-1} (V_{-1}V_0V_1V_2) \xrightarrow{\mathcal{R}} \int dV_{-1}dV_0dV_1dV_2 (V_2V_1V_0V_{-1}) .$$

Logo, mostramos que a permutação é equivalente à reindexação \mathcal{R} na reordenação das variáveis de Grassmann V_l situadas verticalmente na rede $\tilde{\Lambda}$. Portanto,

$$\left\langle \tilde{\theta}(V_2V_1V_0V_{-1}) \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}^-} = \langle V_2V_1V_0V_{-1} \rangle_0^{\tilde{\Lambda}^+} ,$$

na direção vertical (veja (6.3)).

2. Aplicação da PRT ao Modelo de Oito Vértices

Exemplo 3 - Caso Geral. Vamos considerar uma rede $\tilde{\Lambda}_{4 \times 4}$ com $n = 2$ e $m = 2$, quatro variáveis horizontais e quatro verticais. Assim, $k, l = -1, 0, 1, 2$. Representaremos $\tilde{\Lambda}_{4 \times 4}$,

$$\begin{array}{cccccc}
 V_{-1,-1} & V_{0,-1} & \vdots & V_{1,-1} & V_{2,-1} & \\
 & H_{-1,-1} & H_{0,-1} & \vdots & H_{1,-1} & H_{2,-1} \\
 V_{-1,0} & V_{0,0} & \vdots & V_{1,0} & V_{2,0} & \\
 & H_{-1,0} & H_{0,0} & \vdots & H_{1,0} & H_{2,0} \\
 V_{-1,1} & V_{0,1} & \vdots & V_{1,1} & V_{2,1} & \\
 & H_{-1,1} & H_{0,1} & \vdots & H_{1,1} & H_{2,1} \\
 V_{-1,2} & V_{0,2} & \vdots & V_{1,2} & V_{2,2} & \\
 & H_{-1,2} & H_{0,2} & \vdots & H_{1,2} & H_{2,2}
 \end{array}$$

A integral da rede $\tilde{\Lambda}_{4 \times 4}$ é dado por

$$\begin{aligned}
 1 &= \\
 &= \int \left(\overrightarrow{\prod_{k,l=-1}^2 (dH_{k,l} dV_{k,l})} \right) \left(\overleftarrow{\prod_{k,l=2}^{-1} (H_{k,l} V_{k,l})} \right) \\
 &= \int \left(\overrightarrow{\prod_{k=1}^2 \prod_{l=-1}^2 (dH_{k,l} dV_{k,l})} \right) \left(\overleftarrow{\prod_{k=2}^1 \prod_{l=2}^{-1} (H_{k,l} V_{k,l})} \right) \times \\
 &\quad \underbrace{\int \left(\overrightarrow{\prod_{k=-1}^0 \prod_{l=-1}^2 (dH_{k,l} dV_{k,l})} \right) \left(\overleftarrow{\prod_{k=0}^{-1} \prod_{l=2}^{-1} (H_{k,l} V_{k,l})} \right)}_{\in \tilde{\Lambda}_+} \\
 &\quad \underbrace{\int \left(\overrightarrow{\prod_{k=-1}^0 \prod_{l=-1}^2 (dH_{k,l} dV_{k,l})} \right) \left(\overleftarrow{\prod_{k=0}^{-1} \prod_{l=2}^{-1} (H_{k,l} V_{k,l})} \right)}_{\in \tilde{\Lambda}_-}.
 \end{aligned}$$

Expressando em termos das médias, segue

$$\begin{aligned}
 1 &= \left\langle \overleftarrow{\prod_{k=2}^1 \prod_{l=2}^{-1} (H_{k,l} V_{k,l})} \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}_+} \left\langle \overleftarrow{\prod_{k=0}^{-1} \prod_{l=2}^{-1} (H_{k,l} V_{k,l})} \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}_-} \\
 &= \left\langle \overleftarrow{\prod_{k=2}^1 \prod_{l=2}^{-1} (H_{k,l} V_{k,l})} \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}_+} \left\langle \tilde{\theta} \left(\overrightarrow{\prod_{k=1}^2 \prod_{l=-1}^2 (H_{k,l} V_{k,l})} \right) \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}_-}.
 \end{aligned}$$

Portanto,

$$\left\langle \tilde{\theta} \left(\overrightarrow{\prod_{k=1}^2 \prod_{l=-1}^2 (H_{k,l} V_{k,l})} \right) \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}_-} = \left\langle \overleftarrow{\prod_{k=2}^1 \prod_{l=2}^{-1} (H_{k,l} V_{k,l})} \right\rangle_0^{\tilde{\Lambda}_+}.$$

Não há mudança de sinal pois cada plano $\tilde{\Lambda}_+$ e $\tilde{\Lambda}_-$ possui um número par de variáveis de Grassmann.

Destes exemplos, segue

TEOREMA 6.7 (Reordenação). *Seja θ a reflexão definida em (6.19) agindo sobre a rede Λ . Para qualquer produto das variáveis de Grassmann, temos*

$$\left\langle \theta \left(\overrightarrow{\prod_{k=1}^n \prod_{l=-m+1}^m (C_{k,l}^h C_{k,l}^v)} \right) \right\rangle_{\tilde{\Lambda}_-} = \left\langle \overleftarrow{\prod_{k=n}^1 \prod_{l=m}^{-m+1} (C_{k,l}^h C_{k,l}^v)} \right\rangle_{\tilde{\Lambda}_+}$$

tal que $C_{k,l}^h = H_{k,l}$ ou $\bar{H}_{k,l}$ e $C_{k,l}^v = V_{k,l}$ ou $\bar{V}_{k,l}$. $C_{k,l}^h$ e $C_{k,l}^v$ são variáveis horizontais e verticais, respectivamente.

A flexa superior \rightarrow (\leftarrow) indica ordenação crescente (decrescente) nos índices.

DEMONSTRAÇÃO. *Veja os três exemplos acima. Estes exemplos são válidos para qualquer $m, n = 1, 2, 3, \dots$ para uma rede retangular $\Lambda_{2n \times 2m}$.* ■

Como consequência do Teorema 6.7, notamos, de um modo geral (considerando as reflexões das variáveis e de seus índices), que a reflexão θ satisfaz $\theta^2 = I$ (veja 6.1) quando age em Λ_{\pm} . Assim,

$$\begin{aligned} \theta^2(\Lambda_+) &= \Lambda_+ , \\ \theta^2(\Lambda_-) &= \Lambda_- . \end{aligned} \tag{6.31}$$

TEOREMA 6.8 (Positividade por Reflexão da média (6.14)). *O produto interno definido pela reflexão θ , $\langle (\cdot) \theta(\cdot) \rangle = \langle \theta(\cdot) (\cdot) \rangle$, tal que $\langle (\cdot) \rangle \in \mathbb{R}$ é dado por (6.14) e θ é dado por (6.19), é POSITIVO se $\langle \theta(F) \rangle^{\Lambda_-} = \langle F \rangle^{\Lambda_+}$ para $\forall F \in \mathcal{U}_+$, ou seja,*

$$\langle F \theta(F) \rangle^{\Lambda} = \langle F \rangle^{\Lambda_+} \langle \theta(F) \rangle^{\Lambda_-} = \left\{ \langle F \rangle^{\Lambda_+} \right\}^2 \geq 0 . \tag{6.32}$$

DEMONSTRAÇÃO. *Introduziremos a linha ou o plano de Reflexão θ (veja figura 4).*

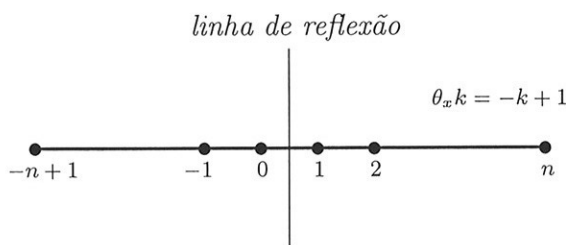


Figura 4: Reflexão θ_x no índice k de $H_{k,l}$.

Temos $Q_{i,j}$ com $i = 1, 2, 3, \dots, 2n$ e $j = 1, 2, 3, \dots, 2m$. Se defino $k = i - n$ e $l = j - m$ obtenho nova indexação centrada na rede retangular. Então $Q_{i,j} = Q_{k,l} = -K_{k,l}^{-1} + A_{k,l}$.

2. Aplicação da PRT ao Modelo de Oito Vértices

Desta forma, fica mais natural o plano de reflexão. No caso da rede retangular temos dois planos de reflexão, o plano vertical e o horizontal. Veja figura 5.

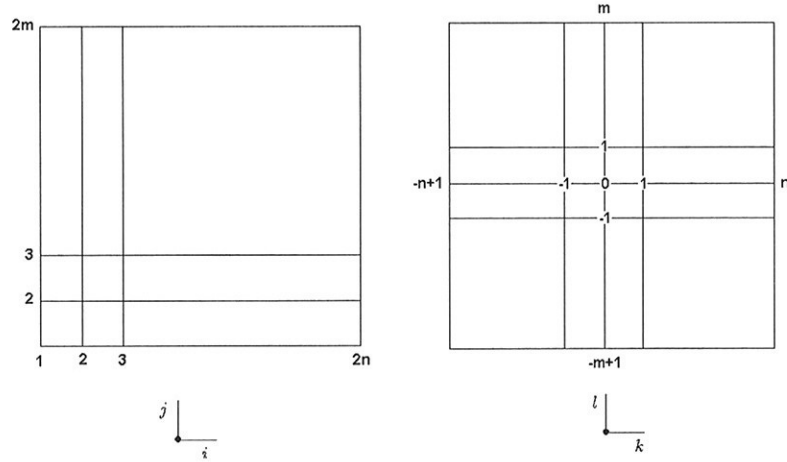


Figura 5: Nova indexação de $Q_{i,j}$ para $Q_{k,l}$. Planos de reflexão. O plano corta a rede Λ entre os pontos 0 e 1 na direção l da figura.

Analisaremos a propriedade da desigualdade por reflexão com respeito a $\langle \dots \rangle$ dada por (6.14). Seja $F = F(\phi_{k>0}) = F(H_k \bar{H}_k V_k \bar{V}_k)$ com $k = 1, 2, 3, \dots, n$. Então

$$\begin{aligned} \langle F\theta(F) \rangle &= \int \prod_{j=1}^N d\phi_j F\theta(F) e^{\frac{1}{2} \sum_{k,l} (\phi_k, A_{k,l} \phi_l)} \\ &= \left\langle F\theta(F) e^{\frac{1}{2} (\phi, A\phi)} \right\rangle_0, \end{aligned}$$

com a média $\langle \dots \rangle_0$ dada por (6.13).

Notamos que

$$\begin{aligned} &\sum_{k,l} (\phi_k, A_{k,l} \phi_l) \\ &= \sum_{k=-n+1}^n \sum_{l=-m+1}^m \{ (\phi_{k,l}, X\phi_{k+1,l}) - (\phi_{k,l}, X^t\phi_{k-1,l}) \\ &\quad + (\phi_{k,l}, Y\phi_{k,l+1}) - (\phi_{k,l}, Y^t\phi_{k,l-1}) \} \\ &= \sum_{k=-n+1}^n \sum_{l=-m+1}^m \{ \bar{H}_{k,l} H_{k+1,l} + \bar{H}_{k-1,l} H_{k,l} + \bar{V}_{k,l} V_{k,l+1} + \bar{V}_{k,l-1} V_{k,l} \} \\ &= 2 \sum_{k=-n+1}^n \sum_{l=-m+1}^m \{ \bar{H}_{k,l} H_{k+1,l} + \bar{V}_{k,l} V_{k,l+1} \} \end{aligned} \tag{6.33}$$

pois $(\phi_{k,l}, X\phi_{k+1,l}) = \bar{H}_{k,l} H_{k+1,l}$ e $(\phi_{k,l}, X^t\phi_{k-1,l}) = H_{k,l} \bar{H}_{k-1,l} = -\bar{H}_{k-1,l} H_{k,l}$.

Consideraremos as condições de fronteira:

- (1) Cíclica. Assim, $H_{n+1,l} = H_{-n+1,l}$, logo $\bar{H}_{n,l} H_{n+1,l} = \bar{H}_{n,l} H_{-n+1,l}$.
- (2) Helicoidal. Assim, $H_{n+1,l} = H_{-n+1,l+1}$, logo $\bar{H}_{n,l} H_{n+1,l} = \bar{H}_{n,l} H_{-n+1,l+1}$.

Para condição de fronteira cíclica, teremos $\sum_{k=-n+1}^n \sum_{l=-m+1}^m \bar{H}_{k-1,l} H_{k,l} = \sum_{k=-n+1}^n \sum_{l=-m+1}^m \bar{H}_{k,l} H_{k+1,l}$.
A soma no índice k será desmembrada em uma parte positiva e outra negativa:

$$\sum_{k=-n+1}^n = \sum_{k=-n+1}^{-1} + (k=0) + \sum_{k=1}^n + (k=n) ,$$

esta é uma divisão da rede com relação a um plano vertical. Nas ligações onde passa o plano, $k=0$ e $k=n$, ocorre a quebra das ligações $\sum_{l=-m+1}^m \bar{H}_{0,l} H_{1,l}$ e $\sum_{l=-m+1}^m \bar{H}_{n,l} H_{-n+1,l}$.

Definimos

$$A_{k,l} = \{ \bar{H}_{k,l} H_{k+1,l} + \bar{V}_{k,l} V_{k,l+1} \} ,$$

$$A_{k>0} = \sum_{k=1}^n \sum_{l=-m+1}^m A_{k,l}$$

e

$$A_{k<0} = \sum_{k=-n+1}^0 \sum_{l=-m+1}^m A_{k,l} .$$

Usando a reflexão θ , obtemos

$$\begin{aligned} \theta(A_{k,l}) &= \{ \theta(\bar{H}_{k,l} H_{k+1,l}) + \theta(\bar{V}_{k,l} V_{k,l+1}) \} \\ &= \{ \theta(\bar{H}_{k,l}) \theta(H_{k+1,l}) + \theta(\bar{V}_{k,l}) \theta(V_{k,l+1}) \} \\ &= \{ (H_{\theta(k,l)}) (-\bar{H}_{\theta(k+1,l)}) + (V_{\theta(k,l)}) (-\bar{V}_{\theta(k,l+1)}) \} \\ &= \{ \bar{H}_{-k,-l+1} H_{-k+1,-l+1} + \bar{V}_{-k+1,-l} V_{-k+1,-l+1} \} , \\ &= A_{-k+1,-l+1} , \end{aligned}$$

para $k = 1, 2, \dots, n$. Logo,

$$\begin{aligned} \theta(A_{k>0}) &= \sum_{k=1}^n \sum_{l=-m+1}^m \theta(A_{k,l}) \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{l=-m+1}^m A_{-k+1,-l+1} \\ &= \sum_{k=-n+1}^0 \sum_{l=-m+1}^m A_{k,l} \\ &= A_{k<0} . \end{aligned}$$

Veja a figura 4 e observe com atenção as reflexões. Observamos que $A_{k>0} \in \Lambda_+$ e $\theta(A_{k>0}) \in \Lambda_-$. Veja como obtemos a expressão (6.24).

Desta forma, a expressão (6.33) pode ser desmembrada como em (6.4) da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \sum_{k,l} (\phi_k, A_{k,l} \phi_l) &= A_{k>0} + A_{k<0} + \sum_{l=-m+1}^m \sum_{i=1}^2 C_{i,l} \theta \mathcal{D}_{i,l} \\
 &= A_{k>0} + \theta (\theta^{-1} A_{k<0}) + \sum_{l=-m+1}^m \sum_{i=1}^2 C_{i,l} \theta \mathcal{D}_{i,l} \\
 &= A_{k>0} + \theta (A_{k>0}) + \sum_{l=-m+1}^m \sum_{i=1}^2 C_{i,l} \theta \mathcal{D}_{i,l} ,
 \end{aligned}$$

tal que a reflexão θ é dada por (6.19)

Os termos de fronteira (veja figura 6) acoplam Λ_+ e Λ_-

$$C_{1,l} = H_{1,l} \text{ e } \theta D_{1,l} = -\bar{H}_{0,l} \implies C_{1,l} \theta \mathcal{D}_{1,l} = \bar{H}_{0,l} H_{1,l} ,$$

$$C_{2,l} = \bar{H}_{n,l} \text{ e } \theta D_{2,l} = H_{-n+1,l} \implies C_{2,l} \theta \mathcal{D}_{2,l} = \bar{H}_{n,l} H_{-n+1,l} .$$

Os $4m$ pontos de $\sum_{l=-m+1}^m \sum_{i=1}^2 C_{i,l} \theta \mathcal{D}_{i,l}$ referem-se às ligações em $k = 0$ e $k = n$ seccionadas/quebradas pelo plano de reflexão θ . Devemos observar que $C_{i,l}$ e $\mathcal{D}_{i,l} \in \Lambda_+$

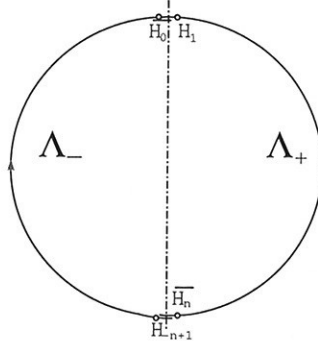


Figura 6: $C_{i,l} \theta \mathcal{D}_{i,l}$: acoplamento entre Λ_+ e Λ_- . Vista superior da rede Λ com condição de fronteira toroidal.

Com isto,

$$e^{\frac{1}{2} \sum_{k,l} (\phi_k, A_{k,l} \phi_l)} = e^{A_{k>0} + \theta(A_{k>0}) + \sum_{l=-m+1}^m \sum_{i=1}^2 C_{i,l} \theta \mathcal{D}_{i,l}}$$

e a média $\langle \dots \rangle$, dada por (6.14), pode ser expressa como

$$\langle \dots \rangle = \int \prod_j d\phi_j (\dots) e^{A_{k>0} + \theta(A_{k>0}) + \sum_{l=-m+1}^m \sum_{i=1}^2 C_{i,l} \theta \mathcal{D}_{i,l}} . \quad (6.34)$$

Usando as novas variáveis de Grassmann φ (6.28), obtemos para a expressão (6.34)

$$\langle \dots \rangle = \int \prod_j d\varphi_j (\dots) e^{A_{k>0} + \theta(A_{k>0}) + \sum_{l=-m+1}^m (\mathcal{H}_{1,l} \theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \bar{\mathcal{H}}_{n,l} \theta(\bar{\mathcal{H}}_{n,l}))}$$

A seguir, faremos uso das propriedades:

- $e^{A_{k>0} + \theta(A_{k>0}) + \sum_l (\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l}))} = e^{A_{k>0}} e^{\theta(A_{k>0})} e^{\sum_l (\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l}))}$, pois estes comutam entre si¹;
- Usando o fato de as variáveis de Grassmann anticomutarem, temos

$$\begin{aligned} & e^{(\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l}))} \\ &= e^{\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l})} e^{\overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l})} = (1 + \mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l})) (1 + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l})) \\ &= 1 + \mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}\overline{\mathcal{H}}_{n,l}) \\ &= \sum_{i_1, i_2=0}^1 \left[(\overline{\mathcal{H}}_{n,l})^{i_2} (\mathcal{H}_{1,l})^{i_1} \right] \theta \left[(\mathcal{H}_{1,l})^{i_1} (\overline{\mathcal{H}}_{n,l})^{i_2} \right]. \end{aligned}$$

De forma geral, temos

$$\begin{aligned} & e^{\sum_{l=-m+1}^m (\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l}))} \\ &= \prod_{l=-m+1}^m e^{(\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l}))} \\ &= \prod_{l=-m+1}^m \left[1 + \mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}\overline{\mathcal{H}}_{n,l}) \right] \\ &= \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_{4m}\}=0,1} \left[\overleftarrow{C_{i_{4m}}^{i_{4m}} \dots C_{i_1}^{i_1}} \theta \left(\overrightarrow{C_{i_{4m}}^{i_{4m}} \dots C_{i_1}^{i_1}} \right) \right], \end{aligned}$$

tal que $C_{i_1}^{i_1} = (\mathcal{H}_{1,-m+1})^{i_1}$, $C_{i_2}^{i_2} = (\overline{\mathcal{H}}_{n,-m+1})^{i_2}$, ..., $C_{i_{4m}}^{i_{4m}} = (\overline{\mathcal{H}}_{n,m})^{i_{4m}}$. A notação $\{i_1, i_2, \dots, i_{4m}\} = 0, 1$ indica $i_j = 0, 1$ com $j = 1, 2, \dots, 4m$. Note que ocorrerá no máximo $2 \times 2m = 4m$ termos ordenados. A flexa \rightarrow indica a ordem crescente dos índices e \leftarrow a ordem decrescente. Este ordenamento é tal como surge na própria rede definida em Λ . Mais claramente, teríamos a soma de termos da forma $[C_p \dots C_3 C_2 C_1] \theta [C_1 C_2 C_3 \dots C_p]$, com $0 \leq p \leq 4m$. Para qualquer p inteiro, este ordenamento gera sempre termos positivos na soma, mesmo para variáveis que anticomutam.

Pelo Teorema 6.5, observamos que a contribuição na integral dos termos com p ímpar é nula pois

$$\langle [C_1 C_2 C_3 \dots C_p (F e^{A_{k>0}})] \rangle_0^{\Lambda_+} = - \langle [C_1 C_2 C_3 \dots C_p (F e^{A_{k>0}})] \rangle_0^{\Lambda_+}. \quad (6.35)$$

Lembramos que $\theta^2 \mathcal{H}_{k,l} = \theta(-\overline{\mathcal{H}}_{-k+1,l}) = -\mathcal{H}_{k,l}$, pois $\theta^2 \varphi = -\varphi$. p ímpar corresponde à circuitos abertos.

- o fato de $A_{k>0} \in \Lambda_+$ comutar com os elementos de Λ_- , pois todos os termos de $A_{k>0}$ são pares nas variáveis de Grassmann.

¹Caso não comutassem, usaríamos a fórmula de Trotter.

Assim, a média de F fica

$$\begin{aligned}
 & \langle F\theta(F) \rangle \\
 &= \left\langle F\theta(F) e^{A_{k>0} + \theta(A_{k>0}) + \sum_{l=-m+1}^m (\mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l}) + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l}))} \right\rangle_0 \\
 &= \left\langle F\theta(F) e^{A_{k>0}} e^{\theta(A_{k>0})} \left[\prod_{l=-m+1}^m (1 + \mathcal{H}_{1,l}\theta(\mathcal{H}_{1,l})) (1 + \overline{\mathcal{H}}_{n,l}\theta(\overline{\mathcal{H}}_{n,l})) \right] \right\rangle_0 \\
 &= \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_{4m}\}=0,1} \left\langle F e^{A_{k>0}} \theta(F e^{A_{k>0}}) (C_{i_{4m}}^{i_{4m}} \dots C_{i_1}^{i_1} \theta C_{i_1}^{i_1} \dots C_{i_{4m}}^{i_{4m}}) \right\rangle_0 \quad (6.36) \\
 &= \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_{4m}\}=0,1} \left\langle (F e^{A_{k>0}} C_{i_{4m}}^{i_{4m}} \dots C_{i_1}^{i_1}) \theta (C_{i_1}^{i_1} \dots C_{i_{4m}}^{i_{4m}} F e^{A_{k>0}}) \right\rangle_0 \\
 &= \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_{4m}\}=0,1} \left\langle \overleftarrow{\left(\underbrace{C_{i_{4m}}^{i_{4m}} \dots C_{i_1}^{i_1}}_{n. \text{ par de termos}} F e^{A_{k>0}} \right)} \right\rangle_0^{\Lambda_+} \left\langle \theta \left(\overrightarrow{\left(\underbrace{C_{i_1}^{i_1} \dots C_{i_{4m}}^{i_{4m}}}_{n. \text{ par de termos}} F e^{A_{k>0}} \right)} \right) \right\rangle_0^{\Lambda_-},
 \end{aligned}$$

tal que $\sum_{k=1}^{4m} i_k$ é um número par de termos de fronteira. Esta igualdade é válida desde que F e e^A commute com os C_i 's, ou seja, desde que estas funções sejam a soma de termos pares nas variáveis de Grassmann.

No plano de reflexão θ , ocorre a quebra das ligações e a rede Λ parte-se em duas (veja figura 6): Λ_+ e Λ_- . Assim, as integrais dos elementos $(F e^{A_{k>0}} C_{i_{4m}}^{i_{4m}} \dots C_{i_1}^{i_1})$ e $\theta(C_{i_1}^{i_1} \dots C_{i_{4m}}^{i_{4m}} F e^{A_{k>0}})$ não possuem termos em comum, e estas podem ser resolvidas independentemente.

Temos ainda que provar que

$$\left\langle \theta \left(\overrightarrow{\left(C_{i_1}^{i_1} \dots C_{i_{4m}}^{i_{4m}} F e^{A_{k>0}} \right)} \right) \right\rangle_0^{\Lambda_-} = \left\langle \overleftarrow{\left(C_{i_{4m}}^{i_{4m}} \dots C_{i_1}^{i_1} F e^{A_{k>0}} \right)} \right\rangle_0^{\Lambda_+}. \quad (6.37)$$

Notamos que a igualdade (6.37) é verdadeira, de acordo com o Teorema 6.7. Para reordenarmos o lado esquerdo de (6.37) basta reordenarmos as variáveis \mathcal{H} 's.

Portanto,

$$\langle F\theta(F) \rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_{4m}\}=0,1} \left\{ \left\langle F e^{A_{k>0}} C_{i_{4m}}^{i_{4m}} \dots C_{i_1}^{i_1} \right\rangle_0^{\Lambda_+} \right\}^2 \geq 0.$$

■

Para $F = 1$, notamos que $\langle F\theta(F) \rangle = \langle 1 \rangle = 1$, conforme (6.15).

TEOREMA 6.9 (Positividade por Reflexão do Modelo de Oito Vértices). *Seja $F = \prod_{k=-n+1}^n \prod_{l=-m+1}^m e^{-(\phi_k, K^{-1}(x_{k,l})\phi_l)}$, então*

$$\langle F\theta(F) \rangle = \langle F \rangle^2 \geq 0.$$

DEMONSTRAÇÃO. Segue diretamente do Teorema 6.8, pois a condição $\langle \theta(F) \rangle^{\Lambda^-} = \langle F \rangle^{\Lambda^+}$ está satisfeita. ■

A expressão motivadora desta análise é a *desigualdade de Schwarz*,

$$|\langle f\theta g \rangle|^2 \leq \langle f\theta f \rangle \langle g\theta g \rangle, \quad (6.38)$$

tal que f e $g \in \Lambda_+$.

A média $\langle \cdot \rangle$ adotada precisa ser positiva (obtida por reflexão) para que a desigualdade de Schwarz seja válida.

Através da expressão (6.16), calculamos o Pf (Q) da seguinte forma

$$\text{Pf}(Q) = \langle F \rangle,$$

tal que

$$F = \prod_{k=-n+1}^n \prod_{l=-m+1}^m e^{-(\phi_k, K^{-1}(x_{k,l})\phi_l)},$$

e $\langle (\cdot) \rangle$ é dada por (6.14). F é o produto de termos com um número par nas variáveis de Grassmann. Observamos que esta função F pode ser dividida em duas partes com relação ao plano vertical que divide a rede.

$$\begin{aligned} F &= \prod_{k=-n+1}^n \prod_{l=-m+1}^m e^{-(\phi_k, K^{-1}(x_{k,l})\phi_l)} \\ &= \left[\prod_{k=1}^n \prod_{l=-m+1}^m e^{-(\phi_k, K^{-1}(x_{k,l})\phi_l)} \right] \left[\prod_{k=-n+1}^0 \prod_{l=-m+1}^m e^{-(\phi_k, K^{-1}(x_{k,l})\phi_l)} \right] \\ &= (F_+) (F_-). \end{aligned}$$

$$F_+ = \prod_{k=1}^n \prod_{l=-m+1}^m f(x_{k,l}) \text{ tal que}$$

$$\begin{aligned} f(x_{k,l}) &= \exp \left\{ -2 \left[w'_3(x_{k,l}) \overline{H}_{k,l} H_{k,l} + w'_4(x_{k,l}) \overline{V}_{k,l} V_{k,l} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. w_5 V_{k,l} \overline{H}_{k,l} + w_6 H_{k,l} \overline{V}_{k,l} + w_7 H_{k,l} V_{k,l} + w_8 \overline{H}_{k,l} \overline{V}_{k,l} \right] \right\}. \end{aligned}$$

Com esta escolha, temos

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \left\langle \overbrace{(F_+)}^f \overbrace{(F_-)}^{\theta g} \right\rangle \\ &\leq \left\langle \overbrace{F_+}^f \overbrace{\theta(F_+)}^{\theta f} \right\rangle^{1/2} \left\langle \overbrace{F_-}^g \overbrace{\theta(F_-)}^{\theta g} \right\rangle^{1/2}. \end{aligned}$$

3. Interpretação matricial da positividade pela reflexão θ

Desta forma, o lado Λ_- e o lado Λ_+ da rede estão “homogeneizados” pela reflexão θ . Podemos homogeneizar, através da reflexão θ , toda a rede Λ na direção horizontal por sucessivas aplicações de (6.38).

Em seguida, aplicamos a propriedade de positividade por reflexão também na direção vertical da rede retangular,

θ_v : reflexão vertical.

θ_v é obtido de maneira semelhante à θ . Usamos a estimativa do tabuleiro de xadrez para obtermos

$$\begin{aligned} \text{Pf}(Q) &= \left\langle \prod_x f_x(\phi_x) \right\rangle \leq \prod_x \left(\left\langle \prod_y f_x(\phi_y) \right\rangle \right)^{\frac{1}{N}} \\ &= \prod_{x=1}^N (\text{Pf}(Q_k \text{ hom}))^{\frac{1}{N}} . \end{aligned} \quad (6.39)$$

A prova da equação (6.39) envolve essencialmente aplicações repetidas da desigualdade de Schwarz (veja apêndice B).

3. Interpretação matricial da positividade pela reflexão θ

Esta seção corrobora a seção anterior e nos dá uma visão ampla da matriz Q relacionada com a função de partição do modelo de oito vértices.

A reflexão θ no espaço de variáveis que anticomutam define um produto interno positivo. Veremos que esta operação é equivalente a definir um produto interno sobre as matrizes de Q no corpo dos números complexos.

Com a escolha de θ (veja 6.19), notamos

$$\begin{aligned} (\phi', Q\phi') &= (\phi')^t Q\phi' = (\theta\phi)^t Q(\theta\phi) \\ &= \phi^t \theta^t Q\theta\phi \\ &= (\phi, [\theta^t Q\theta]\phi) , \end{aligned}$$

tal que

$$\theta^t Q\theta = - \oplus K_j^{-1} - \Pi \otimes X^t - \Pi^n \otimes Y^t + \Pi^{-1} \otimes X + \Pi^{-n} \otimes Y ,$$

pois

$$\begin{cases} \theta^t X\theta = -X^t \\ \theta^t X^t\theta = -X \end{cases} ; \begin{cases} \theta^t Y\theta = -Y^t \\ \theta^t Y^t\theta = -Y \end{cases} ; \quad (6.40)$$

e

$$\theta^t K_j^{-1}\theta = K_j^{-1} . \quad (6.41)$$

Está implícito que $\theta = \theta_{N \times N} = \oplus \theta_{4 \times 4}$ quando age em Q e $\theta = \theta_{4 \times 4}$ quando age nas matrizes 4×4 , tal que $\theta_{4 \times 4}$ é definido por (6.19).

Utilizaremos as propriedades de matrizes em bloco. Seja M dada por

$$M = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} ,$$

tal que A, B, C e D são matrizes em bloco. O $\det(M)$ pode ser calculado de duas formas:

$$\begin{aligned} \det \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} &= \det \left(\underbrace{A}_{\in \Lambda_-} \right) \det \left(\underbrace{D - CA^{-1}B}_{\in \Lambda_+} \right) \\ &= \det \left(\underbrace{D}_{\in \Lambda_+} \right) \det \left(\underbrace{A - BD^{-1}C}_{\in \Lambda_-} \right), \end{aligned} \quad (6.42)$$

pois

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & BD^{-1} \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & 0 \\ D^{-1}C & I \end{bmatrix}.$$

Notamos em (6.42) a quebra da rede Λ nas partes Λ_- e Λ_+ .

Agora, identificamos a matriz M com a matriz Q igualando

$$A = D = F \quad : \quad \text{matrizes antissimétricas} \quad \rightarrow \quad F = -F^t ;$$

$$C = -B \quad : \quad \text{matrizes simétricas} \quad \rightarrow \quad B = B^t .$$

Assim,

$$Q = \begin{bmatrix} F & B \\ -B & F \end{bmatrix}.$$

Substituindo na equação (6.42), segue

$$\det(Q) = \det(F) \det(F + BF^{-1}B). \quad (6.43)$$

A forma geral de F é

$$F = \begin{bmatrix} K_1 & X & & & Y & & \\ -X^t & K_2 & X & & & & Y \\ & -X^t & K_3 & X & & & \\ & & -X^t & K & X & & \\ -Y^t & & & -X^t & K & X & \\ & -Y^t & & & -X^t & K_N & \end{bmatrix}$$

e de B é

$$B = \begin{bmatrix} & & Y^t & & X^t \\ & & & Y^t & \\ Y & & & & Y^t \\ & Y & & & Y^t \\ & & Y & & \\ X & & & Y & \end{bmatrix}.$$

Q é modificado pela reflexão θ da seguinte forma

$$\theta^t Q \theta = \begin{bmatrix} \theta^t F \theta & \theta^t B \\ -B \theta & F \end{bmatrix}.$$

θ é aplicado em Λ_- (bloco superior esquerdo de Q).

3. Interpretação matricial da positividade pela reflexão θ

A forma geral de $F_1 = \theta^t F \theta$ é

$$F_1 = \begin{bmatrix} K_1 & -X^t & & & -Y^t & & \\ X & K_2 & -X^t & & & & -Y^t \\ & X & K_3 & -X^t & & & \\ & & X & K & -X^t & & \\ Y & & & X & K & -X^t & \\ & Y & & & X & K_N & \end{bmatrix}$$

e de $B_1 = \theta^t B \theta$ é

$$B_1 = \begin{bmatrix} & & -Y & & & -X \\ -Y^t & & & -Y & & \\ & -Y^t & & & -Y & \\ & & -Y^t & & & -Y \\ -X^t & & & -Y^t & & \end{bmatrix} .$$

Notamos que F_1 (B_1) é obtida de F (B) pelas substituições $X \leftrightarrow -X^t$ e $Y \leftrightarrow -Y^t$, de acordo com (6.40) e (6.41). Assim,

$$Q_1 = \begin{bmatrix} F_1 & B_1 \\ -B_1 & F_1 \end{bmatrix} .$$

Usaremos, nesta seção, as propriedades de θ :

$$\begin{aligned} \theta\theta^t &= \theta^t\theta = I , \\ \theta^2 &= (\theta^t)^2 = -I . \end{aligned} \tag{6.44}$$

Em seguida, definiremos as matrizes

$$\begin{aligned} F_+ &= \frac{1}{2}(F + F_1) , \\ B_+ &= \frac{1}{2}(B + B_1) , \end{aligned}$$

e

$$Q_+ = \begin{bmatrix} F_+ & B_+ \\ -B_+ & F_+ \end{bmatrix} .$$

Notamos que F_+ e B_+ são invariantes pela transformação θ , ou seja,

$$\theta^t F_+ \theta = F_+$$

e

$$\theta^t B_+ \theta = B_+ .$$

Também observamos que

$$F_+^{-1} = \theta^t F_+^{-1} \theta .$$

Usando (6.44), concluímos que $F_+\theta = \theta F_+$ e $B_+\theta = \theta B_+$. Assim, F_+ e B_+ comutam com θ ,

$$\begin{aligned} [F_+, \theta] &= 0, \\ [B_+, \theta] &= 0. \end{aligned} \tag{6.45}$$

O mesmo resultado é válido para θ^t .

As definições destas novas matrizes é essencial devido à propriedade

$$\det(Q_+) = \det(Q) = \det(Q_1).$$

Pela equação (6.42), temos

$$\begin{aligned} \det(Q_+) &= \det(\theta^t Q_+ \theta) \\ &= \det \left[\begin{pmatrix} \theta^t & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_+ & B_+ \\ -B_+ & F_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta \\ I \end{pmatrix} \right] \\ &= \det \begin{bmatrix} \theta^t F_+ \theta & \theta^t B_+ \\ -B_+ \theta & F_+ \end{bmatrix} \\ &= \det(F_+) \det [(\theta^t F_+ \theta) + (\theta^t B_+) F_+^{-1} (B_+ \theta)] \\ &= \det(F_+) \det \{ (\theta^t F_+ \theta) [I + (\theta^t F_+^{-1} \theta) (\theta^t B_+) F_+^{-1} (B_+ \theta)] \} \\ &= \det(F_+) \det \{ (\theta^t F_+ \theta) [I + \theta^t F_+^{-1} B_+ F_+^{-1} B_+ \theta] \}. \end{aligned} \tag{6.46}$$

Agora, vamos mostrar que θ e θ^t comutam com $F_+^{-1} B_+$, ou seja,

$$[\theta, F_+^{-1} B_+] = [\theta^t, F_+^{-1} B_+] = 0. \tag{6.47}$$

De acordo com (6.45) e (6.44), temos

$$\begin{aligned} F_+^{-1} B_+ \theta &= F_+^{-1} \theta B_+ \\ &= \theta (\theta^t F_+^{-1} \theta) B_+ \\ &= \theta F_+^{-1} B_+ \\ &= -\theta^t F_+^{-1} B_+. \end{aligned} \tag{6.48}$$

De modo análogo, $F_+^{-1} B_+ \theta^t = \theta^t F_+^{-1} B_+$.

Substituindo (6.48) em (6.46), podemos escrever

$$\begin{aligned} \det \left[I + \theta^t (F_+^{-1} B_+) \underbrace{\begin{pmatrix} F_+^{-1} B_+ \\ -\theta^t F_+^{-1} B_+ \end{pmatrix} \theta}_{-} \right] &= \det [I + (\theta^t F_+^{-1} B_+) (-\theta^t F_+^{-1} B_+)] \\ &= \det [(I + \theta^t F_+^{-1} B_+) (I - \theta^t F_+^{-1} B_+)] \\ &= \det [I + \theta^t F_+^{-1} B_+] \det [I - \theta^t F_+^{-1} B_+] \\ &= \det [I + F_+^{-1} B_+ \theta^t] \det [I + F_+^{-1} B_+ \theta]. \end{aligned} \tag{6.49}$$

4. Simetrias do modelo

Substituindo (6.49) em (6.46), obtemos

$$\begin{aligned}\det(Q) &= \det(Q_+) \\ &= \det(F_+) \det\{(\theta^t F_+ \theta) [I + F_+^{-1} B_+ \theta^t] [I + F_+^{-1} B_+ \theta]\} \\ &= \det\{[F_+ + \theta^t B_+] [F_+ + \theta B_+]\} .\end{aligned}$$

Seja M_{simet} uma matriz simétrica e $M_{antissimet}$ uma matriz antissimétrica, então $M_{simet}\theta = -(\theta M_{simet})^t$ e $M_{antissimet}\theta = (\theta M_{antissimet})^t$. Esta propriedade é válida também para θ^t . Como B_+ é uma matriz simétrica e comuta com θ , temos $\theta B_+ = B_+ \theta = -(\theta B_+)^t$, logo θB_+ é uma matriz antissimétrica.

Da equação (6.43), notamos

$$\begin{aligned}\det(Q) &= \det[(F)(F + BF^{-1}B)] \\ &= \det[(F^2)(I + F^{-1}BF^{-1}B)] \\ &= \det[(F^2)(I - iF^{-1}B)(I + iF^{-1}B)] \\ &= \det[(F - iB)(F + iB)] ,\end{aligned}$$

tal que $i = \sqrt{-1}$.

Logo, a operação realizada pela reflexão θ (veja (6.32)) em Λ pode ser vista como, ou, é equivalente à definição de um produto interno agindo sobre as matrizes que compõem Q no corpo dos números complexos. Esta equivalência é obtida através de

$$\begin{aligned}\theta &\leftrightarrow i ; \\ \theta^t &\leftrightarrow \bar{i} = -i .\end{aligned}\tag{6.50}$$

Notamos que $\theta\theta^t = i\bar{i} = 1$ e $\theta^2 = (\theta^t)^2 = (i)^2 = -1$, com a equivalência (6.50).

A reflexão θ divide a rede Λ de modo a obter um produto interno positivo. Esta é uma forma equivalente de interpretarmos a reflexão θ agindo sobre os blocos que compõem a matriz Q .

4. Simetrias do modelo

TEOREMA 6.10 (Simetria). *Dois modelos de oito vértices, indexados pela matriz bloco diagonal K^{-1} e S , estarão na mesma classe de equivalência se existir uma matriz inversível M tal que*

$$S = M^{-1}KM$$

e

$$A = M^{-1}AM .$$

DEMONSTRAÇÃO. De (3.26) temos $Z = \mathbb{E}_\mu \left(\sqrt{\det(Q)} \right)$, tal que $Q = -K^{-1} + A$ é dado por (3.24).

Seja $\varepsilon = \oplus M$ e $\varepsilon^{-1} = \oplus M^{-1}$, então

$$\begin{aligned} \varepsilon Q \varepsilon^{-1} &= \oplus M^{-1} K^{-1} M + M^{-1} A M \\ &= \oplus S + M^{-1} A M . \end{aligned}$$

Como $M^{-1} A M$ possui a mesma forma que A e $\det(\varepsilon Q \varepsilon^{-1}) = \det(Q)$, temos

$$Z_{K^{-1}} = Z_S .$$

■

5. Cota Superior de Z_{8v}

Notamos que $\text{Pf}(Q_k \text{ fixo e homogêneo})$, dado por (6.39), é a função de partição semelhante ao modelo XYh numa rede retangular $2n \times 2m$, veja a expressão (4.16). A única diferença está na substituição de w_3 e w_4 por $w'_3(x_k)$ e $w'_4(x_k)$, para um determinado k para toda a rede. Estes pesos, por sua vez, dependem de Δ . Basta, então, seguirmos as mesmas análises e notações feitas na seção 1.3.

Definimos

$$Z_0 = \text{Pf}(Q_k \text{ hom}) = \sqrt{\det(-K_{\text{hom}}^{-1} + A)} , \quad (6.51)$$

com $Q_k \text{ hom} = -K_{\text{hom}}^{-1} + A$ e $K_{\text{hom}}^{-1} = \text{diag}(K_l^{-1}, K_l^{-1}, \dots, K_l^{-1})$ sendo $K_l^{-1} = K^{-1}(x_l)$.

Usando K^{-1} dado por (6.9), temos que a forma de Q diagonalizada é (veja (4.18))

$$F Q F^{-1} = \sum_{k=1}^N [I \otimes I \otimes \dots \otimes Q_k \otimes \dots \otimes I] , \quad (6.52)$$

tal que

$$Q_k \text{ hom} = \frac{1}{\sqrt{w_2}} \begin{bmatrix} 0 & -w_7 & w'_3(x_l) + w_2 \lambda_j^{-1} & -w_6 \\ w_7 & 0 & -w_5 & w'_4(x_l) + w_2 \lambda_j^{-m} \\ -w'_3(x_l) - w_2 \lambda_j & w_5 & 0 & -w_8 \\ w_6 & -w'_4(x_l) - w_2 \lambda_j^m & w_8 & 0 \end{bmatrix} ,$$

I a matriz identidade, F a matriz de Fourier (4.17) e $\lambda_j = e^{(2j-1)\frac{\pi}{N}i}$.

Resolvendo este determinante, encontramos

$$\begin{aligned} \det(Q_k \text{ hom}) &= \prod_{j=1}^N \{a + b(\lambda + \lambda^{-1}) + c(\lambda^m + \lambda^{-m}) + \\ &\quad d(\lambda^{m+1} + \lambda^{-m-1}) + e(\lambda^{m-1} + \lambda^{-m+1})\} , \end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned} a &= \frac{\delta_l^2}{w_2^2} + w_2^2 + (w'_3)^2 + (w'_4)^2 , \\ b &= w_2 w'_3 - \frac{\delta_l}{w_2} w'_4 , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c &= w_2 w'_4 - \frac{\delta_l}{w_2} w'_3, \\ d &= w'_3 w'_4 - w_5 w_6, \\ e &= w'_3 w'_4 - w_7 w_8. \end{aligned}$$

Sendo $\Delta = w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8$, $w'_3 = w_3 - \sqrt{\Delta} x_l$ e $w'_4 = w_4 + \sqrt{\Delta} x_l$ temos,

$$\begin{aligned} \delta_l = \delta(x_l) &= -w'_3 w'_4 + w_5 w_6 + w_7 w_8 \\ &= \Delta (x_l^2 - 1) - x_l \sqrt{\Delta} (w_3 - w_4) + w_1 w_2. \end{aligned}$$

No caso particular $\Delta = 0$, temos $\delta = w_1 w_2$ e recuperaremos o resultado do apêndice (C.6).

Substituindo estes resultados em (6.51), obtemos

$$Z_0 = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x_l)\}^{\frac{1}{2}},$$

tal que

$$R(\theta_i, \phi_j) = [a + 2b \cos \theta_i + 2c \cos \phi_j + 2d \cos(\theta_i + \phi_j) + 2e \cos(\theta_i - \phi_j)], \quad (6.53)$$

com $\theta_i = \frac{\pi}{m}(2i - 1)$ e $\phi_j = \frac{\pi}{n}(2j - 1)$.

Usando (6.39), temos

$$Z_1 = \text{Pf}(Q) = \left\langle \prod_x f_x(\phi_x) \right\rangle \leq \prod_x \left(\left\langle \prod_y f_x(\phi_y) \right\rangle \right)^{\frac{1}{N}}.$$

Portanto,

$$\begin{aligned} Z_1 &\leq \prod_l \{Z_0(K_{\text{hom}}(x_l))\}^{1/N} \\ &= \prod_{l=1}^N \left\{ \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x_l)\}^{\frac{1}{2}} \right\}^{1/N}. \end{aligned}$$

A equação acima é semelhante à expressão (2.3) de Kunz e Zumbach[**KZ**], dada por

$$\ln Z(\{\Lambda_\mu(x)\}) \leq \frac{1}{Nd} \sum_{\mu, x} \ln Z(\Lambda_\mu(x)),$$

ou seja,

$$Z(\{\Lambda_\mu(x)\}) \leq \prod_{\mu, x} [Z(\Lambda_\mu(x))]^{\frac{1}{Nd}}.$$

sendo d a dimensão da rede e $\Lambda_\mu(x)$ os acoplamentos no ponto x na direção μ .

Neste artigo, as constantes de acoplamento são não-homogêneas, dependem do ponto x da rede. Utiliza-se a desigualdade de Dunford e Schwarz e a técnica da matriz de transferência para se obter uma cota superior.

Em nosso caso, os acoplamentos horizontais X e verticais Y são constantes unitárias enquanto que as células do modelo de vértices são dependentes do ponto j da rede, ou seja, são não-homogêneas, refletidos na notação da matriz $K^{-1} = K^{-1}(j)$.

Como $Z = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{l=1}^N d\mu(x_l) \right) Z_1$ tal que $d\mu(x_l) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x_l^2} dx_l$, temos

TEOREMA 6.11.

$$Z_{8v} \leq \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x)\}^{\frac{1}{2}} \right]^{1/N} d\mu(x) \right\}^N. \quad (6.54)$$

DEMONSTRAÇÃO.

$$\begin{aligned} Z_{8v} &\leq \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{l=1}^N d\mu(x_l) \right) \prod_{l=1}^N \left\{ \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x_l)\}^{\frac{1}{2}} \right\}^{1/N} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{l=1}^N \left\{ \left[\prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x_l)\}^{\frac{1}{2}} \right]^{1/N} d\mu(x_l) \right\} \\ &= \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x)\}^{\frac{1}{2}} \right]^{1/N} d\mu(x) \right\}^N \end{aligned}$$

Para $J^z = 0$, R torna-se uma função independente de x . Assim, a cota superior dada pela desigualdade acima é o próprio Z e a desigualdade torna-se uma igualdade. ■

Agora,

$$\frac{1}{N} \ln Z_{8v} \leq \ln \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x)\}^{\frac{1}{2}} \right]^{1/N} d\mu(x) \right\}$$

Temos

$$\begin{aligned} \lim_{n,m \rightarrow \infty} \left[\prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x)\}^{\frac{1}{2}} \right]^{1/N} &= \lim_{n,m \rightarrow \infty} \exp \left\{ \frac{1}{2N} \ln \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{R(\theta_i, \phi_j, x)\} \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi^2} \int \int \ln R(\theta, \phi, x) d\theta d\phi \right\}. \end{aligned}$$

Analisaremos, em seguida, a função $R(\theta_i, \phi_j, x)$. Para isto, introduziremos uma função real

$$G := \frac{1}{2} (a + 2c \cos(\phi))$$

e uma função complexa

$$H := b + de^{i\phi} + ee^{-i\phi},$$

como feito em [MR].

Assim,

$$\begin{aligned} R(\theta_i, \phi_j) &= 2G + He^{i\theta} + \bar{H}e^{-i\theta} = \frac{H}{e^{i\theta}} \left(e^{2i\theta} + \frac{2G}{H} e^{i\theta} + \frac{\bar{H}}{H} \right) \\ &= \frac{H}{e^{i\theta}} (e^{i\theta} - \rho^+) (e^{i\theta} - \rho^-) \end{aligned} \quad (6.55)$$

com $\rho^\pm = \frac{-G \pm \Omega}{H}$ e

$$\begin{aligned}\Omega^2(z) &= G^2 - H\bar{H} \\ &= \left[\frac{a^2}{4} - b^2 + \frac{c^2}{2} - d^2 - e^2 \right] + \left[\frac{ac}{2} - b(d+e) \right] (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) + \\ &\quad \left[\frac{c^2}{4} - de \right] (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}) .\end{aligned}$$

Com isto, eliminamos a dependência de $\theta = \theta(m)$ em R através da realização do produto em m ,

$$\prod_{j=1}^m (\rho - e^{i\theta_j}) = \rho^m + 1 , \quad (6.56)$$

tal que $e^{i\theta_j}$, $\theta_j = \frac{\pi}{m}(2j-1)$, são as m raízes de (-1) .

Usando (6.56) em (6.55) e $\prod_{j=1}^m (-e^{i\theta_j}) = 1$, encontramos

$$\begin{aligned}\prod_{j=1}^m R(\theta_j, \phi_j) &= \prod_{j=1}^m \frac{H}{e^{i\theta}} (\rho^+ - e^{i\theta}) (\rho^- - e^{i\theta}) \\ &= (-H)^m \{[(\rho^+)^m + 1][(\rho^-)^m + 1]\} \\ &= \{(-H)^m + (-\bar{H})^m + (G + \Omega)^m + (G - \Omega)^m\} .\end{aligned} \quad (6.57)$$

Para $J^z = 0$ temos que Ω é da ordem de q/m (q fator que independe de m) enquanto que G contribui com $1 + q'/m^2$. Desta forma, $\lim_{m \rightarrow \infty} (G + \Omega)^m \rightarrow e^q$. Veremos na próxima seção como tratar o caso de J^z qualquer aplicando este resultado ao modelo de Heisenberg.

6. Aplicação ao modelo de Heisenberg

Os oito vértices do modelo de Heisenberg são:

$$w_1 = e^{\beta J^z/m} \left(\cosh \frac{\beta \zeta}{m} + \frac{h}{\zeta} \sinh \frac{\beta \zeta}{m} \right)$$

$$w_2 = e^{\beta J^z/m} \left(\cosh \frac{\beta \zeta}{m} - \frac{h}{\zeta} \sinh \frac{\beta \zeta}{m} \right)$$

$$w_3 = w_4 = e^{-\beta J^z/m} \sinh \frac{\beta \kappa}{m}$$

$$w_5 = w_6 = e^{-\beta J^z/m} \cosh \frac{\beta \kappa}{m}$$

$$w_7 = w_8 = e^{-\beta J^z/m} \frac{\eta}{\zeta} \sinh \frac{\beta \zeta}{m}$$

com $\eta = (J^x - J^y)$, $\kappa = (J^x + J^y)$ e $\zeta = \sqrt{\eta^2 + h^2}$. m é o índice oriundo da fórmula de Trotter. É importante notar que $N = nm$ será o tamanho, ou número total de vértices, da nova rede obtida. De acordo com (C.5), temos

$$\begin{aligned} \Delta &= w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8 \\ &= 2 \left(1 + \frac{\eta^2}{\zeta^2} \sinh^2 \frac{\beta \zeta}{m} \right) \sinh \left(\frac{2\beta J^z}{m} \right) \\ &= \frac{4\beta J^z}{m} + O\left(\frac{1}{m}\right)^3 \end{aligned} \quad (6.58)$$

6.1. Modelo XXZ com $h = 0$. Nesta seção, demonstraremos a

PROPOSIÇÃO 6.12. *A função de partição do modelo XXZ obedece a desigualdade*

$$Z_{XXZ} \leq \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{\beta J^z}{m} [2x^2 - 1]} \left[\prod_{i=1}^n [f_4] \right]^{\frac{1}{2N}} d\mu(x) \right\}^N$$

com f_4 dada por (6.60).

DEMONSTRAÇÃO. *Siga as expressões até a equação (6.65).* ■

Para o modelo XXZ temos $J^x = J^y$ e $h = 0$, assim $\eta = (J^x - J^y) = 0$, $\kappa = 2J^x$, $\zeta = \sqrt{\eta^2 + h^2} = 0$ e

$$\begin{aligned} w_1 = w_2 &= e^{\beta J^z/m} = 1 + \frac{\beta J^z}{m} + O\left(\frac{1}{m^2}\right) \\ w_3 = w_4 &= e^{-\beta J^z/m} \sinh \frac{2\beta J^x}{m} = \frac{2\beta J^x}{m} + O\left(\frac{1}{m^2}\right) \\ w_5 = w_6 &= e^{-\beta J^z/m} \cosh \frac{2\beta J^x}{m} = 1 - \frac{\beta J^z}{m} + O\left(\frac{1}{m^2}\right) \\ w_7 = w_8 &= 0. \end{aligned}$$

Usando estes pesos até ordem de $1/m^2$, encontramos

$$\begin{aligned} a &= 2 + \frac{4\beta J^z}{m} (4x^2 - 1) + O\left(\frac{1}{m^2}\right) \\ b = -c &= 4x \sqrt{\frac{\beta J^z}{m}} + 4x(2x^2 - 1) \left(\frac{\beta J^z}{m}\right)^{3/2} + O\left(\frac{1}{m^2}\right) \\ d &= -1 - \frac{2\beta J^z}{m} (2x^2 - 1) - 2 \left(\frac{\beta J^z}{m}\right)^2 + O\left(\frac{1}{m^3}\right) \\ e &= -4x^2 \frac{\beta J^z}{m} + \left(\frac{2\beta J^x}{m}\right)^2 + O\left(\frac{1}{m^3}\right) \end{aligned}$$

Utilizando os valores acima, encontramos

$$\Omega = \frac{4\beta}{m} |J^x \cos \phi + J^z (x^2 - 1)| + O(m^{-3/2})$$

$$G = 1 + 4x \cos \phi \sqrt{\frac{\beta J^z}{m}} + \frac{2\beta J^z}{m} (4x^2 - 1) + O(m^{-3/2})$$

e

$$H = -e^{i\phi} + 4x \sqrt{\frac{\beta J^z}{m}} - \frac{2\beta J^z}{m} [4x^2 \cos \phi - e^{i\phi}] + O(m^{-3/2})$$

Usando

$$m \ln[e^{i\phi} + \frac{x}{\sqrt{m}}] = mi\phi + xe^{-i\phi} \sqrt{m} - \frac{1}{2} e^{-2i\phi} x^2 + O\left(\frac{1}{\sqrt{m}}\right)$$

e

$$m \ln[1 + \frac{x}{\sqrt{m}} + \frac{y}{m} + \frac{z}{m^{3/2}}] = x\sqrt{m} - \frac{1}{2} x^2 + y + O\left(\frac{1}{\sqrt{m}}\right),$$

obtemos,

$$\begin{aligned} (-H)^m &= e^{m \ln(-H)} \\ &= e^{mi\phi + 4xe^{-i\phi} \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta J^z [2x^2(1 - e^{-2i\phi}) - 1]} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} (G \pm \Omega)^m &= e^{m \ln(G \pm \Omega)} \\ &= e^{4x \cos \phi \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta (J^z [4x^2(\sin \phi)^2 - 1] \pm 2 |J^x \cos \phi + J^z(x^2 - 1)|)} \end{aligned}$$

Desta forma, a equação (6.57) fica

$$\begin{aligned} \prod_{j=1}^m R(\theta_i, \phi_j) &= \left\{ e^{mi\phi + 4xe^{-i\phi} \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta J^z [2x^2(1 - e^{-2i\phi}) - 1]} + \right. \\ &\quad e^{-mi\phi + 4xe^{i\phi} \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta J^z [2x^2(1 - e^{2i\phi}) - 1]} + \\ &\quad e^{4x \cos \phi \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta (J^z [4x^2(\sin \phi)^2 - 1] + 2 |J^x \cos \phi + J^z(x^2 - 1)|)} + \\ &\quad \left. e^{4x \cos \phi \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta (J^z [4x^2(\sin \phi)^2 - 1] - 2 |J^x \cos \phi + J^z(x^2 - 1)|)} \right\} \end{aligned}$$

Usando $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$ na equação acima, obtemos

$$\prod_{j=1}^m R(\theta_i, \phi_j) = e^{f_1} f_4 \quad (6.59)$$

com

$$\begin{aligned} f_1 &= 4x \cos \phi_i \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta J^z [4x^2 (\sin \phi_i)^2 - 1], \\ f_4 &= 2 \cos(f_2) + e^{2f_3} + e^{-2f_3}, \end{aligned} \quad (6.60)$$

tal que

$$f_2 = m\phi_i - 4x \sin \phi_i \sqrt{\beta J^z m} + 4\beta J^z x^2 \sin(2\phi_i)$$

e

$$f_3 = 2\beta |J^x \cos \phi_i + J^z (x^2 - 1)|.$$

Lembremo-nos de que $\phi_i = \frac{\pi}{n} (2i - 1)$. Para $J^z = 0$, $\cos(f_2) = \cos(m \frac{\pi}{n} (2i - 1)) = 1$ pois $m = kn + 1$.

Substituindo (6.59) em

$$Z_{XXZ} \leq \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{i=1}^n \left(\prod_{j=1}^m R(\theta_i, \phi_j) \right) \right]^{\frac{1}{2N}} d\mu(x) \right\}^N \quad (6.61)$$

segue

$$\begin{aligned} Z_{XXZ} &\leq \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[\prod_{i=1}^n (e^{f_1} f_4) \right]^{\frac{1}{2N}} d\mu(x) \right\}^N \\ &= \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} e^{2x \sqrt{\frac{\beta J z}{m}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos \phi_i + \frac{\beta J z}{m} \left[4x^2 \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\sin \phi)^2 - 1 \right]} \left[\prod_{i=1}^n [f_4] \right]^{\frac{1}{2N}} d\mu(x) \right\}^N \\ &= \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{\beta J z}{m} [2x^2 - 1]} \left[\prod_{i=1}^n [f_4] \right]^{\frac{1}{2N}} d\mu(x) \right\}^N \end{aligned} \quad (6.62)$$

em que usamos

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos \phi_i = 0$$

e

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\sin \phi_i)^2 = \frac{1}{2}.$$

Como $-1 \leq \cos(f_2) \leq 1$ para qualquer m , temos

$$f_4 \leq 2 + e^{2f_3} + e^{-2f_3} = (e^{f_3} + e^{-f_3})^2 = [2 \cosh(f_3)]^2. \quad (6.63)$$

Reescrevendo na forma exponencial, obtemos

$$f_4 = e^{\ln f_4} \leq e^{2 \ln[2 \cosh(f_3)]},$$

com isto,

$$\left[\prod_{i=1}^n f_4 \right]^{\frac{1}{2N}} \leq \left[e^{\sum_{i=1}^n 2 \ln[2 \cosh(f_3)]} \right]^{\frac{1}{2N}} = e^{\frac{1}{2N} \frac{n}{2\pi} 2 \int_0^{2\pi} \ln[2 \cosh(f_3)] d\phi}.$$

Substituindo a expressão acima em (6.62), segue

$$Z_{XXZ} \leq \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{\beta J z}{m} [2x^2 - 1] + \frac{1}{2\pi m} \int_0^{2\pi} \ln[2 \cosh(f_3)] d\phi} d\mu(x) \right\}^N, \quad (6.64)$$

tal que $N = nm$.

6. Aplicação ao modelo de Heisenberg

Usando a expansão $e^{\frac{c}{m}} = 1 + \frac{c}{m} + O\left(\frac{1}{m^2}\right)$ na equação acima e integrando os termos da expansão em série, encontramos

$$\begin{aligned}
 & Z_{XXZ} \\
 & \leq \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \left[1 + \frac{1}{m} \left(\beta J^z [2x^2 - 1] + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right) + O\left(\frac{1}{m^2}\right) \right] d\mu(x) \right\}^{mn} \\
 & = \left\{ \left[1 + \frac{1}{m} \left(\beta J^z + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right) d\mu(x) \right) + O\left(\frac{1}{m^2}\right) \right] \right\}^{mn} \\
 & = e^{n\beta J^z + \frac{n}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right) d\mu(x)} \\
 & = \exp \left\{ n\beta J^z + \frac{n}{2\pi} \mathbb{E}_{\mu} \left(\int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right) \right\}
 \end{aligned} \tag{6.65}$$

com $\mathbb{E}_{\mu}(\cdot) = \int_{-\infty}^{\infty} (\cdot) d\mu(x)$ denotando a média gaussiana.

Usando a expressão

$$\cosh(z) = \prod_{j=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z^2}{\pi^2 (j - 1/2)^2} \right)$$

e

$$\ln(1+x) \leq x \text{ (para } x > -1)$$

encontramos

$$\begin{aligned}
 \ln [2 \cosh (z)] &= \ln (2) + \sum_{j=1}^{\infty} \ln \left(1 + \frac{z^2}{\pi^2 (j-1/2)^2} \right) \\
 &\leq \sum_{j=1}^{\infty} \ln \left(1 + \frac{z^2}{\pi^2 (j-1/2)^2} \right) \\
 &\leq \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{z^2}{\pi^2 (j-1/2)^2} \right) \\
 &= \frac{z^2}{\pi^2} \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{1}{j-1/2} \right)^2 \\
 &= \frac{z^2}{2}
 \end{aligned}$$

pois $\sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{1}{j-1/2} \right)^2 = \pi^2/2$.

Assim,

$$\begin{aligned}
 & \frac{n}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right) \\
 & \leq \frac{n}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_0^{2\pi} \left[\frac{f_3}{2} \right]^2 d\phi \right) \\
 & = \frac{n\beta^2}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_0^{2\pi} [J^x \cos \phi_i + J^z (x^2 - 1)]^2 d\phi \right) \\
 & = \frac{n\beta^2}{2} \mathbb{E}_\mu \left([J^x]^2 + 2 [J^z]^2 (1 - 2x^2 + x^4) \right) \\
 & = \frac{n\beta^2}{2} [(J^x)^2 + 4 (J^z)^2]
 \end{aligned} \tag{6.66}$$

Usando (6.66) em (6.65), encontramos

$$Z_{XXZ} \leq \exp \left\{ n\beta J^z + \frac{n\beta^2}{2} [(J^x)^2 + 4 (J^z)^2] \right\}$$

Devemos notar que

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a + bx + cx^2 + dx^4) d\mu(x) = a + c + 3d$$

e

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2} d\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{1-2a}} \text{ para } a < 1/2.$$

Para $J^z = 0$, f_3 independe de x . Assim, de (6.65), para o modelo XX temos

$$Z_{XX} \leq e^{\frac{n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (2\beta |J^x \cos \phi|)] d\phi}.$$

É importante notar que a expressão acima é o resultado exato para Z_{XX} .

Prosseguindo de (6.65), temos que resultado principal desta seção pode ser resumido no seguinte

TEOREMA 6.13 (Energia Livre do modelo XXZ - cota superior). *A energia livre do modelo XXZ apresenta a cota superior*

$$\begin{aligned}
 E_{Livre} & = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta n} \ln Z_{XXZ} \\
 & \leq J^z + \frac{1}{2\pi\beta} \mathbb{E}_\mu \left(\int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right)
 \end{aligned}$$

com

$$f_3 = 2\beta |J^x \cos \phi_i + J^z (x^2 - 1)|.$$

Com a análise acima, obtemos uma cota superior para a função de partição Z_{XXZ} . Devemos tomar muito cuidado com estas expansões e não desprezar termos relevantes que, à primeira vista, podem nos passar despercebidos. Este cuidado foi adotado para os termos $O\left(\frac{1}{m}\right)$ de H e G , pois contribuem para a expressão da função de partição.

Para o limite de altas temperaturas, $\beta \rightarrow 0$, temos

$$\ln [2 \cosh (f_3)] = \ln [2] + \frac{(f_3)^2}{2} - \frac{(f_3)^4}{12} + O((f_3)^6).$$

Usando esta expansão, a energia livre em altas temperaturas é

$$E_{\text{Livre}}(\beta \rightarrow 0) = J^z + \beta (4(J^z)^2 + (J^x)^2) - \beta^3 \left(80(J^z)^4 + \frac{1}{2}(J^x)^4 + 8(J^z J^x)^2 \right) + (\beta^4)$$

6.2. Modelo XYZ com campo h . Nesta seção, demonstraremos a

TEOREMA 6.14. *A função de partição do modelo XYZh obedece a desigualdade*

$$Z_{XYZh} \leq \exp \left\{ n\beta J^z + \frac{n}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right) \right\},$$

com f_3 dada por (6.67).

DEMONSTRAÇÃO. *Siga as expressões até a equação (6.68).* ■

Realizando o mesmo procedimento da seção anterior, obtemos

$$\Omega = \frac{2\beta}{m} \sqrt{V}$$

com

$$V = [h + 2J^z (1 - x^2) - (J^x + J^y) \cos \phi_i]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi_i$$

e

$$m \ln (G \pm \Omega) = 4x \cos \phi_i \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta \left\{ J^z [4x^2 (\sin \phi)^2 - 1] \pm \sqrt{V} \right\} + O \left(\frac{1}{\sqrt{m}} \right)$$

$$m \ln (-H) = mi\phi + 4xe^{-i\phi} \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta J^z [2x^2 (1 - e^{-2i\phi}) - 1]$$

Substituindo estas expressões, temos

$$\prod_{j=1}^m R(\theta_i, \phi_j) = e^{f_1} f_4$$

com

$$f_1 = -4x \cos \phi_i \sqrt{\beta J^z m} + 2\beta J^z [4x^2 (\sin \phi)^2 - 1]$$

e

$$f_4 = 2 \cos (f_2) + e^{2f_3} + e^{-2f_3},$$

tal que

$$f_2 = m\phi_i + 4x \sin \phi_i \sqrt{\beta J^z m} + 4\beta J^z x^2 \sin (2\phi_i)$$

e

$$f_3 = \beta \sqrt{[2J^z (x^2 - 1) + (J^x + J^y) \cos \phi_i - h]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi_i}. \quad (6.67)$$

Realizando as mesmas aproximações e desigualdades da seção anterior, torna-se, também aqui, válida a equação (6.65)

$$Z_{XYZh} \leq \exp \left\{ n\beta J^z + \frac{n}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right) \right\}, \quad (6.68)$$

Desta forma, temos uma cota superior para o modelo XYZh.

Poderemos comparar esta cota superior com o modelo XYh cuja função de partição é

$$Z_{XYh} = e^{\frac{2\pi}{\beta} \int_0^{2\pi} \ln[2 \cosh(\delta)] d\varphi}$$

com

$$\delta(\varphi) = \beta [h^2 + (J^x)^2 + (J^y)^2 + 2h(J^x - J^y) \cos(\varphi) + 2J^x J^y \cos(2\varphi)]^{\frac{1}{2}} \quad (6.69)$$

Para isto, basta tomarmos $J^z = 0$. Assim,

$$\begin{aligned} f_3(J^z = 0) &= \beta \sqrt{[(J^x + J^y) \cos \phi_i - h]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi_i} \\ &= \beta [h^2 + (J^x)^2 + (J^y)^2 - 2h(J^x + J^y) \cos(\varphi) + 2J^x J^y \cos(2\varphi)]^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

Notamos que a cota superior para o modelo $XYZh$ (6.68) é excelente, haja vista que o resultado do modelo XYh é retomado fazendo $J^z = 0$. O que nos dá maior garantia de seu rigor e precisão.

Esta retomada já era esperada antes de tomar o limite, pois a desigualdade (6.54) torna-se uma igualdade para $J^z = 0$. Mostramos acima que o limite preserva esta propriedade.

Analisaremos, em seguida, uma cota inferior para esta função de partição.

CAPÍTULO 7

Cota Inferior para o Modelo de Oito Vértices

O objetivo deste capítulo é demonstrar o seguinte

TEOREMA 7.1 (Cota inferior - modelo de oito vértices). *Seja Z a função de partição do modelo de oito vértices, uma cota inferior, \underline{Z} , é dada por:*

$$\begin{aligned} Z &\geq \underline{Z} \\ &= \exp \left(\frac{n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \{ (-H)^m + (-\bar{H})^m + (G + \Omega)^m + (G - \Omega)^m \}^{1/2} d\varphi \right). \end{aligned}$$

tal que H é dado por (7.7), G por (7.6) e Ω por (7.8).

Aplicaremos, em seguida, o Teorema acima ao modelo de Heisenberg.

Nesta seção, obteremos a cota inferior através da expansão do Pfaffiano da matriz Q , $Pf(Q)$. Logo em seguida, será realizada a média gaussiana de cada termo da expansão. Assim, observa-se a forma geral dos termos de Z e com esta análise, surge de forma natural um \underline{Z} como cota inferior para Z . A validade desta cota inferior pode ser verificada notando que \underline{Z} difere de Z somente pela variável $w_2 - \frac{\Delta}{w_1}$ e w_2 .

A desigualdade depende da positividade de cada termo na expansão do $Pf(Q)$. Esta positividade é obtida pelo mapeamento da função de partição em uma rede planar de dímeros com uma dada orientação. Para isto, substituiremos cada vértice da rede retangular por uma célula representando os possíveis oito vértices do modelo dado por Z . Assim, teremos uma relação unívoca entre os oito vértices e a célula coberta por dímeros. Esta representação é devido a Fan e Wu e representada pela figura

A partir desta representação, a matriz K_j (6X6) fica expressa por

$$K_j(6X6) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{w_8}{w_2} & 0 & \frac{w_4-w_6}{w_2} & 0 & w_4 \\ -\frac{w_8}{w_2} & 0 & 0 & 0 & \frac{w_3-w_5}{w_2} & w_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & w_2 \\ \frac{w_6-w_4}{w_2} & 0 & -1 & 0 & -\frac{w_7}{w_2} & 0 \\ 0 & \frac{w_5-w_3}{w_2} & -1 & \frac{w_7}{w_2} & 0 & 0 \\ -w_4 & -w_3 & -w_2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

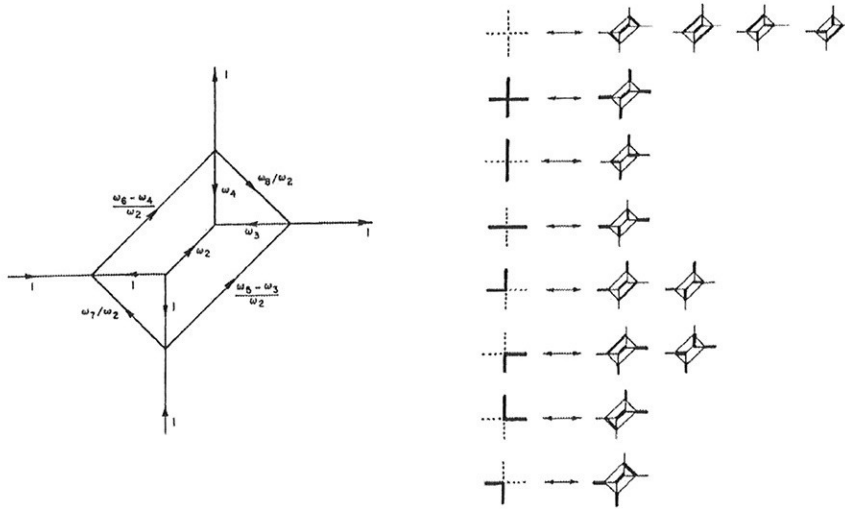


Figura 1: Célula de dímeros para oito vértices.

Após algumas manipulações algébricas, soma e subtração de linhas e colunas, podemos reduzir a matriz acima à matriz K_j (4×4)

$$K_j(4 \times 4) = \frac{1}{w_1} \begin{bmatrix} 0 & -w_8 & -w'_4(x_l) & -w_5 \\ w_8 & 0 & -w_6 & -w'_3(x_l) \\ w'_4(x_l) & w_6 & 0 & -w_7 \\ w_5 & w'_3(x_l) & w_7 & 0 \end{bmatrix}$$

Podemos verificar que, $\text{Det}(K_j(6 \times 6)) = \text{Det}(K_j(4 \times 4))$.

A função de partição é dada pela média gaussiana

$$\begin{aligned} Z_{8v} &= w_1^N \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{l=1}^N d\mu(x_l) \right) Z_1 \\ &= w_1^N \mathbb{E}_\mu(Z_1) . \end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned} Z_1 &= \sqrt{\det(1 - KA)} \\ &= \sqrt{\det(K)} \sqrt{\det(Q)} \\ &= \left(\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1^2} \right) Pf(Q) , \end{aligned} \tag{7.1}$$

tal que $Q = K^{-1} - A$ é uma matriz antissimétrica $Q_{jk} = -Q_{kj}$ e $\sqrt{\det(K)} = \prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1^2}$ com

$$\begin{aligned} \delta_j &= -w'_3(x_j)w'_4(x_j) + w_5w_6 + w_7w_8 \\ &= \Delta(x_j^2 - 1) - x_j\sqrt{\Delta}(w_3 - w_4) + w_1w_2 . \end{aligned}$$

Veja no apêndice C um modo alternativo de obter a função de partição do modelo de oito vértices.

Utilizando as variáveis de Grassmann, notamos que

$$\sqrt{\det(Q)} = Pf(Q) = \int \prod_j d\Psi_j e^{\frac{1}{2}(\Psi, Q\Psi)}$$

Assim, podemos expressar o Pfaffiano como

$$\begin{aligned} Pf(Q) &= \int \prod_j d\Psi_j e^{\frac{1}{2}(\Psi, Q\Psi)} \\ &= \int_N \prod_{j < k}^{4N} [1 + Q_{jk} \Psi_j \Psi_k] \\ &= \int_N \sum_p' (-1)^{|p|} Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \end{aligned} \quad (7.2)$$

sendo p uma partição dos índices de Q com as seguintes restrições

$$p : \begin{cases} p_{2m-1} < p_{2m} \\ p_{2m-1} < p_{2m+1} \end{cases}$$

Observando a expressão (7.2), notamos que apenas as entradas Q_{jk} com $j < k$ serão consideradas. Assim, para um mesmo K_j^{-1} somente, no máximo, dois termos contribuirão para $Pf(Q)$.

Substituindo (7.2) em (7.1), poderemos expressar Z_{8v} como

$$\begin{aligned} Z_{8v} &= w_1^N \mathbb{E}_\mu(Z_1) \\ &= w_1^N \mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1^2} \right] Pf(Q) \right) \\ &= \mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1^2} \right] \int_N \sum_p' (-1)^{|p|} Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \right) \\ &= \int_N \sum_p' (-1)^{|p|} \mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j(x_j)}{w_1^2} \right] Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \right) \end{aligned} \quad (7.3)$$

Considerando a matriz $K^{-1} = \text{diag}(K_1^{-1}, K_2^{-1}, \dots, K_N^{-1})$, notamos que em $Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}}$ surgem no máximo dois w 's ($w_3'(x_j)$ e $w_4'(x_j)$) no numerador como funções dependentes de x_j . Isto pode ser visualizado na forma geral de Q na figura 2. Assim, para concluirmos sobre a forma final de (7.3) basta considerarmos alguns casos:

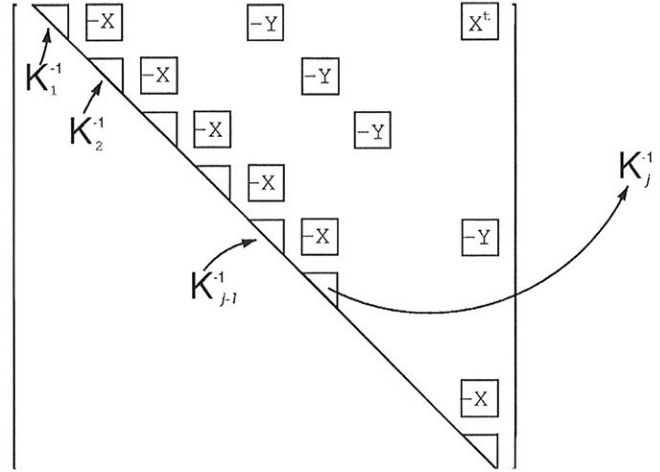


Figura 2: Forma geral da matriz Q . Representamos apenas $Q_{i,j}$ com $i \leq j$. K_j^{-1} é dado por (3.23).

- 1) Em $Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}}$ não há nenhum w_i , elemento de K_j^{-1} , todos os termos são de A . Assim,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1} \right] Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \right) &= Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1} \right] \right) \\ &= (w_2)^N Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \end{aligned}$$

pois

$$\mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1} \right] \right) = \prod_{j=1}^N \frac{1}{w_1} \mathbb{E}_\mu (\delta_j) = (w_2)^N .$$

Usamos o resultado $\mathbb{E}_\mu (\delta_j) = w_1 w_2$ sob a média gaussiana .

- 2) Em $Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}}$ há exatamente um $w_i(x_j)$, elemento de K_j^{-1} .

Assim, $\mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1} \right] Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \right)$ é da forma

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta(x_j)}{w_1} \right] \left(\frac{w_1}{\delta(x_k)} w_i \right) \right) &= (w_2)^{N-1} \mathbb{E}_\mu (w_i(x_k)) \\ &= (w_2)^{N-1} w_i \end{aligned} \tag{7.4}$$

pois

$$\mathbb{E}_\mu (w_i(x_k)) = w_i ,$$

para $i = 3, 4, \dots, 8$. Depois de realizada a média gaussiana, a dependência em x é eliminada.

- 3) Em $Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}}$ há dois $w_i(x_j)$, elementos de K_j^{-1} .
 - a) Dois w_i 's de K_j^{-1} distintos.

Assim, $\mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1} \right] Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \right)$ é da forma

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta(x_j)}{w_1} \right] \left(\frac{w_1}{\delta(x_k)} w_i \right) \left(\frac{w_1}{\delta(x_{k'})} w_{i'} \right) \right) &= (w_2)^{N-2} \mathbb{E}_\mu (w_i(x_k) w_{i'}(x_{k'})) \\ &= (w_2)^{N-2} \mathbb{E}_\mu (w_i(x_k)) \mathbb{E}_\mu (w_{i'}(x_{k'})) \\ &= (w_2)^{N-2} w_i w_{i'} , \end{aligned}$$

para $i, i' = 3, 4, \dots, 8$.

- b) Dois w_i 's do mesmo K_j^{-1} , o que no máximo pode ocorrer.

Assim, $\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1} \right] Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}}$ é da forma

$$\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta(x_j)}{w_1} \right] \left(\frac{w_1}{\delta(x_k)} w_i \right) \left(\frac{w_1}{\delta(x_k)} w_{i'} \right) = \left[\prod_{j=1; j \neq k}^N \frac{\delta(x_j)}{w_1} \right] \left(\frac{w_1}{\delta(x_k)} w_i w_{i'} \right)$$

A soma das contribuições $\left(\frac{w_1}{\delta(x_k)} w_i w_{i'} \right)$, levando em conta o sinal das permutações na definição do Pfaffiano, resulta

$$\frac{w_1}{\delta(x_k)} (-w'_3 w'_4 + w_5 w_6 + w_7 w_8) = w_1 ,$$

antes de passar pela média gaussiana.

Sob a média gaussiana, temos como contribuição para este caso

$$(w_2)^{N-1} w_1 .$$

A análise dos demais casos pode ser induzida ou inferida a partir destes 3 casos, pois a média gaussiana $\mathbb{E}_\mu (\cdot) = \prod_{l=1}^N (\cdot) d\mu(x_l)$ é independente termo a termo com relação a x_j e portanto fatorável. Assim, para o caso de haver, para cada j , dois w_i 's do mesmo K_j^{-1} em $Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}}$, temos

$$\mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1} \right] Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \right) = \prod_{j=1}^N \mathbb{E}_\mu \left(\left[\frac{\delta_j}{w_1} \right] Q Q' \right)_j .$$

Devemos notar ainda que todos os termos da somatória do Pfaffiano possuem o mesmo sinal.

Notamos que as dependências de x_j em $\mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\delta_j}{w_1} \right] Q_{p_1 p_2} Q_{p_3 p_4} \dots Q_{p_{4N-1} p_{4N}} \right)$, a partir destas considerações, desaparecem.

Com os resultados obtidos nas expansões acima (caso 1, 2 e 3), sugerimos uma outra função de partição \underline{Z} com os mesmos resultados apenas diferindo quanto a $\frac{\delta_j}{w_1}$ que é substituído por $\frac{\bar{\delta}_j}{w_1}$. Isto pode ser verificado expandindo esta nova função de partição e comparando com a anterior termo a termo. Assim, observando a forma da expressão (7.3), surge de maneira natural a função de partição \underline{Z} que limita inferiormente a função Z_{8v} . Tal função é dada por

$$\begin{aligned}\underline{Z} &= (w_1)^N \left\{ \left[\prod_{j=1}^N \frac{\bar{\delta}_j}{w_1} \right] Pf(B - A) \right\} \\ &= \left(\frac{\bar{\delta}_j}{w_1} \right)^N Pf(B - A)\end{aligned}\tag{7.5}$$

sendo $B = \text{diag}(b_1, b_2, \dots, b_N)$,

$$\begin{aligned}b_j &= \mathbb{E}_\mu \left(\frac{\delta(x_j)}{\delta_j} K^{-1}(x_j) \right) \\ &= \frac{w_1}{\delta} \begin{bmatrix} 0 & w_7 & -w_3 & w_6 \\ -w_7 & 0 & w_5 & -w_4 \\ w_3 & -w_5 & 0 & w_8 \\ -w_6 & w_4 & -w_8 & 0 \end{bmatrix}\end{aligned}$$

com $\bar{\delta}_j = -w_3w_4 + w_5w_6 + w_7w_8 = w_1w_2 - \Delta$.

É importante saber o sinal de $\frac{\Delta}{w_1}$ em função de J^z para compararmos com w_2 . Para $J^z > 0$, temos $\frac{\bar{\delta}_j}{w_1} = w_2 - \frac{\Delta}{w_1} < w_2$ e assim

$$\underline{Z} < Z_{8v}.$$

Se a condição de fermions livres for satisfeita, $\Delta = 0$, teremos a igualdade $\underline{Z}(\Delta \equiv 0) = Z(\Delta \equiv 0)$. Note que $\Delta = 0$ se $J^z = 0$.

Na função de partição \underline{Z} , todos os termos são idênticos aos termos de Z_{8v} , exceto quanto a w_2 . Assim, para obtermos \underline{Z} a partir de Z_{8v} basta substituímos w_2 por $\left(w_2 - \frac{\Delta}{w_1}\right)$. Verifique, por exemplo, que no caso 2 referente a \underline{Z} teríamos

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_\mu \left(\left[\prod_{j=1}^N \frac{\bar{\delta}(x_j)}{w_1} \right] \left(\frac{w_1}{\delta(x_k)} w_i \right) \right) &= \left(\frac{\bar{\delta}}{w_1} \right)^{N-1} w_i \\ &= \left(w_2 - \frac{\Delta}{w_1} \right)^{N-1} w_i,\end{aligned}$$

compare com a equação (7.4).

A função de partição \underline{Z} possui os oito vértices $w_1, \left(w_2 - \frac{\Delta}{w_1}\right), w_3, \dots, w_8$, que satisfaz

$$w_1 \left(w_2 - \frac{\Delta}{w_1} \right) + w_3w_4 - w_5w_6 - w_7w_8 = 0$$

pois $\Delta = w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8$. Desta forma, em \underline{Z} temos obedecida a condição de fermions livres para os seus vértices, e isto ocorreu graças à uma absorção em w_2 da parte espúria $\frac{\Delta}{w_1}$.

A solução de \underline{Z} segue da mesma forma que em (6.51), veja página 87.

$$\begin{aligned} \text{Pf}(B - A) &= \sqrt{\det[F(B - A)F^{-1}]} \\ &= \left\{ \prod_{j=1}^N \det \begin{bmatrix} 0 & \gamma w_7 & -\gamma w_3 - \lambda_j^{-1} & \gamma w_6 \\ -\gamma w_7 & 0 & \gamma w_5 & -\gamma w_4 - \lambda_j^{-m} \\ \gamma w_3 + \lambda_j & -\gamma w_5 & 0 & \gamma w_8 \\ -\gamma w_6 & \gamma w_4 + \lambda_j^m & -\gamma w_8 & 0 \end{bmatrix} \right\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

com $\gamma = \frac{w_1}{\bar{\delta}}$, $\lambda_j = e^{(2j-1)\frac{\pi}{N}i}$ e F a matriz que diagonaliza A .

Resolvendo o determinante acima, encontramos

$$\begin{aligned} Pf(B - A) &= \left(\frac{w_1}{\bar{\delta}_j}\right)^N \prod_{j=1}^N \{a + b(\lambda + \lambda^{-1}) + c(\lambda^m + \lambda^{-m}) \\ &\quad + d(\lambda^{m+1} + \lambda^{-m-1}) + e(\lambda^{m-1} + \lambda^{-m+1})\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

com

$$a = \frac{\bar{\delta}^2}{w_1^2} + w_1^2 + (w_3)^2 + (w_4)^2$$

$$b = \frac{\bar{\delta}}{w_1} w_3 - w_1 w_4$$

$$c = \frac{\bar{\delta}}{w_1} w_4 - w_1 w_3$$

$$d = w_3 w_4 - w_5 w_6$$

$$e = w_3 w_4 - w_7 w_8$$

e

$$\frac{\bar{\delta}_j}{w_1} = w_2 - \frac{\Delta}{w_1}.$$

Substituindo $Pf(B - A)$ em (7.5), obtemos

$$\underline{Z} = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^m \{w_1^2 R(\theta_i, \phi_j, x_l)\}^{\frac{1}{2}}$$

tal que

$$R(\theta_i, \phi_j) = \frac{1}{w_1^2} [a + 2b \cos \theta_i + 2c \cos \phi_j + 2d \cos(\theta_i + \phi_j) + 2e \cos(\theta_i - \phi_j)]$$

com $\theta_i = \frac{\pi}{m}(2i - 1)$ e $\phi_j = \frac{\pi}{n}(2j - 1)$.

Usando as mesmas técnicas e definições da página (90) temos

$$\prod_{j=1}^m w_1^2 R(\theta_i, \phi_j) = \{(-H)^m + (-\bar{H})^m + (G + \Omega)^m + (G - \Omega)^m\}$$

tal que

$$G := \frac{1}{2} (a + 2c \cos(\phi)) , \quad (7.6)$$

$$H := b + de^{i\phi} + ee^{-i\phi} e \quad (7.7)$$

$$\Omega^2(z) = G^2 - H\bar{H} . \quad (7.8)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \underline{Z} &= \prod_{i=1}^n \{(-H)^m + (-\bar{H})^m + (G + \Omega)^m + (G - \Omega)^m\}^{1/2} \\ &= \exp\left(\frac{n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \{(-H)^m + (-\bar{H})^m + (G + \Omega)^m + (G - \Omega)^m\}^{1/2} d\varphi\right) . \end{aligned} \quad (7.9)$$

Basta agora substituímos os pesos dos w 's correspondentes ao modelo de Heisenberg.

1. Modelo de Heisenberg-Cota Inferior

Utilizando os pesos do modelo de Heisenberg XYZ com campo h (veja seção 6) temos

$$\Omega = \frac{2\beta}{m} \sqrt{V}$$

com

$$V = [h + 2J^z - (J^x + J^y) \cos \phi_i]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi_i$$

e

$$m \ln(G \pm \Omega) = 2\beta \left\{ -J^z \pm \sqrt{V} \right\} + O\left(\frac{1}{\sqrt{m}}\right)$$

$$m \ln(-H) = mi\phi - 2\beta J^z + O\left(\frac{1}{m}\right)$$

Usando a mesma notação da seção 6, temos

$$\prod_{j=1}^m w_1^2 R(\theta_i, \phi_j) = e^{f_1} f_4$$

com

$$f_1 = -2\beta J^z$$

$$f_2 = m\phi_i$$

$$f_3 = \beta \sqrt{[-2J^z + (J^x + J^y) \cos \phi_i - h]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi_i}$$

e

$$f_4 = 2 \cos(f_2) + e^{2f_3} + e^{-2f_3} .$$

Substituindo as expressões acima, encontramos a cota inferior para o modelo $XYZh$

$$\underline{Z}_{XYZh} = \exp \left\{ n\beta J^z + \frac{n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln [2 \cosh (f_3)] d\phi \right\}. \quad (7.10)$$

Esta expressão para a cota inferior é a igual à cota superior(veja 6.68) tomando $x = 0$.

A caracterização da cota depende da relação

$$\left(\frac{\bar{\delta}_j}{w_1} \right) / w_2 = 1 - 4\beta \frac{J^z}{m} + 8 \left(\beta \frac{J^z}{m} \right)^2 + O \left(\frac{1}{m^3} \right).$$

Assim, notamos que \underline{Z}_{XYZh} é uma perturbação em torno de J^z de Z_{XYh} . Para $J^z > 0$, \underline{Z}_{XYZh} é uma cota inferior e para $J^z < 0$, \underline{Z}_{XYZh} passa a ser uma cota superior.

OBSERVAÇÃO. • 1. Para que $\left(\frac{\bar{\delta}_j}{w_1} \right) / w_2$ seja menor que 1, temos que J^z necessariamente deve ser positivo.

- 2. Se J^z for negativo, \underline{Z}_{XYZh} passa a ser uma cota superior mostrando-se mais simples que a equação (6.68) que depende da média gaussiana. No entanto, a cota superior (6.68) mostra-se melhor, além de não depender do sinal de J^z .

Análise das Cotas - Modelo de Heisenberg

Observaremos na análise desenvolvida neste capítulo que a cota inferior apresenta o mesmo comportamento do modelo XYh diferindo apenas por uma translação de valor J^z no ponto crítico da susceptibilidade magnética. Adotamos a tática de analisar a cota superior com a interação J^z próximo a zero, ou seja, como uma perturbação do modelo XYh . Os dois limites igualam-se ao valor exato da função de partição sob a condição de fermions livres, $\Delta = 0$, obtida quando $J^z = 0$. É justamente esta propriedade que permite comparar os expoentes críticos com os dos modelos exatamente solúveis e estabelecer classes de universalidade. Seremos capazes de analisar as possíveis alterações nos pontos críticos do modelo a partir dos limites obtidos para sua função de partição.

Nossas estimativas preliminares ainda não são suficientes para determinar expoentes críticos com precisão. Os cálculos realizados no modelo de Heisenberg $XYZh$ incluem a energia livre e derivadas até segunda ordem com respeito ao campo magnético. Uma comparação destes resultados com os valores críticos exatos ainda não é possível devido a falta de controle das superfícies críticas.

1. Análise das Cotas

Nesta seção analisaremos as cotas inferior e superior obtidas nos capítulos anteriores. Veja as expressões (7.10) e (6.68).

A função de partição do modelo de Heisenberg Z_{XYZh} obedece as desigualdades

$$\underline{Z}_{XYZh} \leq Z_{XYZh} \leq \overline{Z}_{XYZh} \quad (8.1)$$

tal que a cota inferior é

$$\underline{Z}_{XYZh} = \exp \left\{ n\beta J^z + \frac{n}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \ln \left[2 \cosh \left(\beta \sqrt{\varsigma(\phi, x=0)} \right) \right] d\phi \right\}$$

e a cota superior

$$\overline{Z}_{XYZh} = \exp \left\{ n\beta J^z + \frac{n}{2\pi} \mathbb{E}_{\mu} \left(\int_{-\pi}^{\pi} \ln \left[2 \cosh \left(\beta \sqrt{\varsigma(\phi, x)} \right) \right] d\phi \right) \right\},$$

com a média gaussiana

$$\mathbb{E}_{\mu}((\cdot)) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\cdot) \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dx$$

e

$$\varsigma(\phi, x) = [2J^z(x^2 - 1) - (J^x + J^y) \cos \phi - h]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi. \quad (8.2)$$

A cota inferior é válida somente para $J^z > 0$. Quando $J^z < 0$, \underline{Z}_{XYZh} torna-se uma outra cota superior. Para $J^z = 0$, as duas cotas coligem na expressão exata Z_{XYh} do modelo XY com campo transverso. Desta forma, quanto mais próximo J^z estiver de zero mais próximo entre si estarão as cotas \underline{Z}_{XYZh} e \overline{Z}_{XYZh} , inclusive seus pontos de transição de fase e seus respectivos expoentes críticos.

Segundo a hipótese da independência dos expoentes críticos com relação às interações J^z , J^x , J^y do Hamiltoniano, e pelo processo limite descrito acima de perturbação de J^z , tanto a cota inferior quanto a cota superior apresentam os mesmos expoentes críticos.

A energia livre pelo número de sítios n é definida por

$$f = -\frac{1}{\beta n} \ln Z . \quad (8.3)$$

Pela definição acima, usando a desigualdade (8.1), temos

$$-\frac{1}{\beta n} \ln \overline{Z}_{XYZh} \leq f \leq -\frac{1}{\beta n} \ln \underline{Z}_{XYZh} .$$

Note que a cota inferior da energia livre é obtida através da cota superior de Z_{XYZh} e vice-versa.

Segue abaixo o gráfico das duas cotas da energia livre.

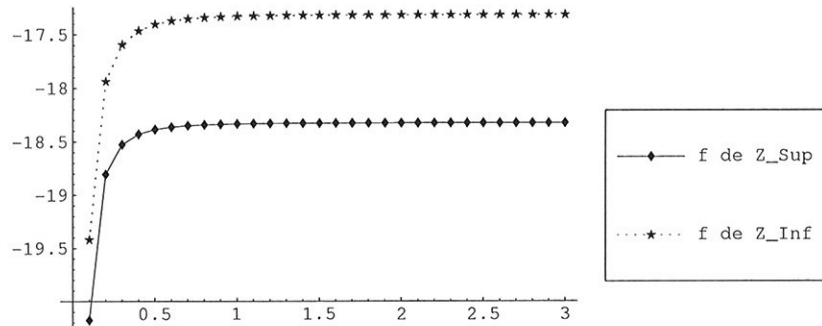


Figura 1: Energia livre $f(\beta)$ - cotas. Caso em que $J^z = 5$, $J^x = 8$, $J^y = 7$ e $h = 1$.

A entropia S , a capacidade térmica C , a magnetização M e a susceptibilidade magnética χ são grandezas derivadas a partir de f e são dadas por

$$S = -\frac{\partial f}{\partial T} \quad ; \quad C = T \frac{\partial S}{\partial T} \quad (8.4)$$

$$M = -\frac{\partial f}{\partial h} \quad ; \quad \chi = \frac{\partial M}{\partial h} .$$

f é expressa em função de β e não diretamente em função de T . Assim, temos que fazer as transformações. Como

$$\beta = \frac{1}{kT},$$

temos

$$\frac{\partial}{\partial T} = -k\beta^2 \frac{\partial}{\partial \beta}.$$

Utilizando as definições acima e as cotas de Z , a capacidade térmica C obtida da cota superior resulta na expressão

$$C = \frac{k\beta^2}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_{-\pi}^{\pi} \left(\sec h \left[\beta \sqrt{\varsigma(\phi, x)} \right] \right)^2 \varsigma(\phi, x) d\phi \right)$$

tal que $\varsigma(\phi, x)$ é dado por (8.2). Para obtermos C da cota inferior, basta tomarmos $x = 0$ na expressão de $\varsigma(\phi, x)$.

Como era esperado, veja o gráfico na figura 2, a capacidade térmica para este modelo quântico unidimensional não apresenta transição de fase. Já no modelo de Ising bidimensional clássico, esta transição ocorre.

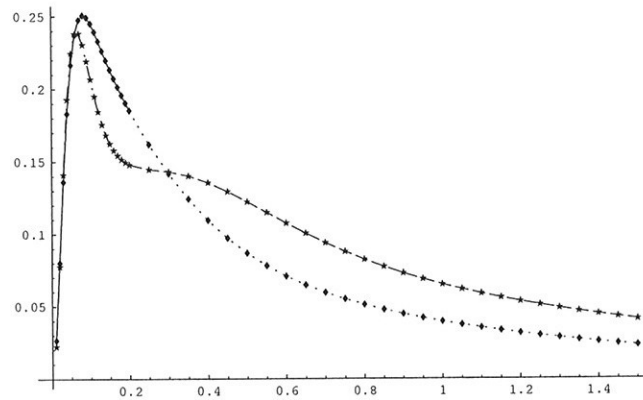


Figura 2: Cotas superior e inferior - capacidade térmica $C(\beta)/K$. Caso em que $J^z = 5$, $J^x = 8$, $J^y = 7$ e $h = 1$.

2. Estado fundamental

Para modelos quânticos unidimensionais, a transição de fase ocorre apenas em $T = 0$. Basta, então, analisarmos a expressão da energia do estado fundamental pelo número de sítios da rede. O estado fundamental, ε_0 , é obtido pelo processo limite $\beta \rightarrow \infty$ na expressão da energia livre.

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} f, \\ &= -J^z - \frac{1}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_{-\pi}^{\pi} E(\phi, x) d\phi \right) \\ &= -J^z - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathbb{E}_\mu(E(\phi, x)) d\phi \end{aligned} \tag{8.5}$$

f é energia livre (8.3) e

$$\begin{aligned} E(\phi, x) &= \sqrt{\varsigma(\phi, x)} \\ &= \sqrt{(h')^2 + (J^x - J^y)^2 + 2h'(J^x + J^y) \cos \phi + 4J^x J^y \cos^2 \phi}, \end{aligned}$$

tal que

$$h'(x) = h - 2J^z(x^2 - 1),$$

pois os resultados em função de h estarão sempre deslocados pelo fator $2J^z(x^2 - 1)$. Notemos que a ordem de integração foi alterada na expressão (8.5).

Utilizaremos a mesma análise feita na seção 1.4.

O “gap” da energia fundamental ocorrerá em ϕ_0 e este será obtido pela expressão

$$\left. \frac{\partial}{\partial \phi} \mathbb{E}_\mu(E(\phi, x)) \right|_{\phi=\phi_0} = 0 \rightarrow \quad (8.6)$$

$$\sin(\phi_0) \left\{ (J^x + J^y) \mathbb{E}_\mu \left(\frac{h'(x)}{E(\phi_0, x)} \right) + 4J^x J^y \cos(\phi_0) \mathbb{E}_\mu \left(\frac{1}{E(\phi_0, x)} \right) \right\} = 0.$$

2.1. Cota Inferior. Para a cota inferior $E(\phi = \phi_0, x = 0) = E(\phi = \phi_0)$ e $h'(x = 0) = h + 2J^z$. Assim, (8.6) implica em

$$\frac{\sin(\phi_0)}{E} \{h'(J^x + J^y) + 4J^x J^y \cos(\phi_0)\} = 0. \quad (8.7)$$

Observando a seção 1.4, notamos que a única diferença na análise reside no fato de h estar deslocado por um fator. Tendo considerado isto, temos

$$\alpha = -\frac{(J^x + J^y)}{4J^x J^y} h'$$

e

$$h'_0 = \pm 2\sqrt{J^x J^y}. \quad (8.8)$$

Também expressamos ε_0 em função de $E(\phi_0)$,

$$\varepsilon_0(E(\phi_0)) - \varepsilon_0(0) = \frac{E(\phi_0)^2}{4\pi\nu_0} \left(1 - 2 \ln \left[\frac{E(\phi_0)}{2\nu_0\phi_c} \right] \right) \quad (8.9)$$

tal que

$$E(\phi_0) = \left[(h')^2 + (J^x - J^y)^2 + 2h'(J^x + J^y) \cos \phi_0 + 4J^x J^y \cos^2 \phi_0 \right]^{1/2}, \quad (8.10)$$

$$\nu_0 = \left[4J^x J^y - h'(J^x + J^y) \cos \phi_0 - 8J^x J^y \cos^2 \phi_0 \right]^{1/2},$$

e ϕ_c um ângulo de corte. Sendo

$$E(\phi)^2 = E(\phi_0)^2 + \nu_0^2(\phi - \phi_0)^2 + O(\phi^4), \quad (8.11)$$

Notamos que a singularidade da energia fundamental é logarítmica para a cota inferior.

2.2. Magnetização e Susceptibilidade. A magnetização e a susceptibilidade estão relacionadas com a derivada de (8.9) com relação a h . Assim, apresentamos as derivadas

$$\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial h} = -\frac{1}{\pi \nu_0} [h' + (J^x + J^y) \cos \phi_0] \ln \left[\frac{E(\phi_0)}{2\nu_0 \phi_c} \right] \quad (8.12)$$

e

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_0}{\partial h^2} = -\frac{1}{\pi \nu_0} \ln \left[\frac{E(\phi_0)}{2\nu_0 \phi_c} \right] - \frac{1}{\pi \nu_0} \frac{(h' + (J^x + J^y) \cos \phi_0)^2}{E(\phi_0)^2}. \quad (8.13)$$

Para chegarmos à susceptibilidade, primeiro precisamos da expressão para a magnetização. A expressão para magnetização em $T = 0$, utilizando a cota superior \bar{Z}_{XYZh} , é dada por

$$\begin{aligned} M_0(h) &= -\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial h} \left\{ \mathbb{E}_\mu \left(\int_{-\pi}^{\pi} E(\phi, x) d\phi \right) \right\} \\ &= -\frac{1}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\partial}{\partial h} \{E(\phi, x)\} d\phi \right) \end{aligned} \quad (8.14)$$

sendo $M_0(h) \equiv M(T=0, h)$. Para obtermos a magnetização através da cota inferior basta tomarmos $x = 0$ na expressão acima.

Partindo o intervalo de integração entre $[0, \pi]$ em três partes

$$\int_0^\pi E(\phi, x) d\phi = \left\{ \int_0^{\phi_o - \phi_c} + \int_{\phi_o - \phi_c}^{\phi_o + \phi_c} + \int_{\phi_o + \phi_c}^\pi \right\} E(\phi, x) d\phi$$

cercamos o intervalo que contem ϕ_o . Neste intervalo, $\int_{\phi_o - \phi_c}^{\phi_o + \phi_c}$, temos a maior contribuição para a susceptibilidade devido a localização da singularidade em ϕ_o e h'_0 . Para a magnetização, a contribuição deste intervalo,

$$-\mathbb{E}_\mu \left(\frac{1}{\pi \nu_0} [h' + (J^x + J^y) \cos \phi_0] \ln \left[\frac{E(\phi_0)}{2\nu_0 \phi_c} \right] \right),$$

tende a zero quando $|\phi_o - \phi_c| \rightarrow 0$.

Veja na figura (3) o gráfico dos dois limites para magnetização em $T = 0$.

A expressão para a susceptibilidade magnética (veja (8.4)) em $T = 0$ é dada por

$$\chi(h, T=0) = -\frac{1}{2\pi} \mathbb{E}_\mu \left(\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \{E(\phi, x)\} d\phi \right)$$

Veja na figura 4 o gráfico da susceptibilidade magnética em $T = 0$. A transição de fase só ocorre quando fazemos a temperatura T tender a zero ou β para infinito. O ponto de não analiticidade de χ é dado pela expressão (8.8). A susceptibilidade fica centrada em $-2J^z$. Notamos que ocorre uma translação de um limite com relação a outro. Os pontos de transição da susceptibilidade calculada a partir da cota superior estão a valores maiores de h quando comparado com a susceptibilidade da cota inferior.

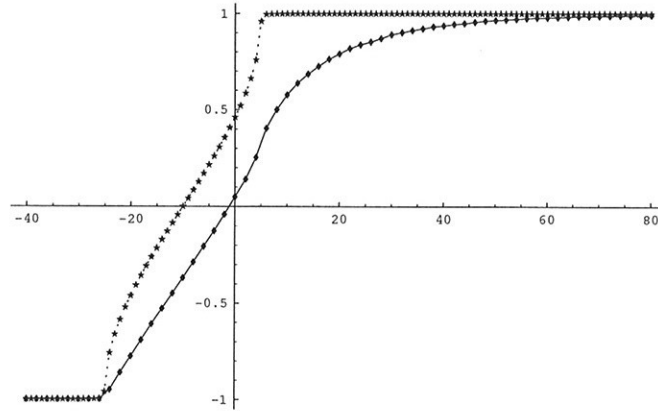


Figura 3: Magnetização em função do campo h . Os pontos em estrela foram obtidos através da cota inferior \underline{Z}_{XYZh} .

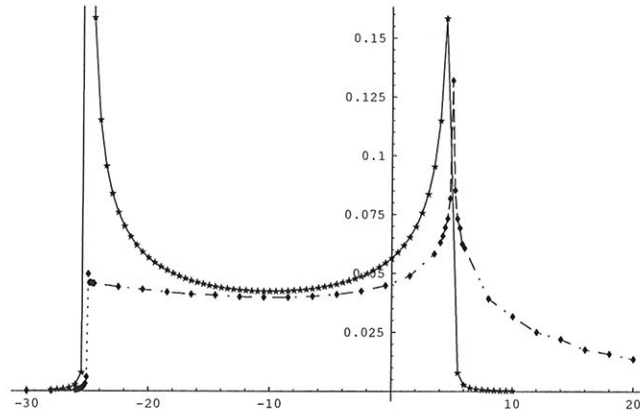


Figura 4: Susceptibilidade magnética em função do campo h . Caso em que $J^z = 5$, $J^x = 8$, $J^y = 7$. Nesta integração numérica foi utilizado o método de Monte Carlo. Os pontos em estrela referem-se à susceptibilidade calculada a partir de \underline{Z}_{XYZh} .

Observamos pela expressão (8.14) e pela figura 3 que a magnetização não apresenta divergência. Isto ocorre graças ao limite

$$\lim_{E(\phi_0) \rightarrow 0} [h' + (J^x + J^y) \cos \phi_0] \ln [E(\phi_0)] = 0$$

que representa a contribuição da integral próximo a ϕ_0 . Quando $E(\phi_0) \rightarrow 0$, $\alpha \rightarrow 1$ na expressão (8.10). Usando $\lim_{x \rightarrow 0} x^x = 1$ e $E(\phi_0) \sim [h' + (J^x + J^y) \cos \phi_0] \sim 0$ obtemos o resultado acima. Vemos que este cancelamento não ocorre com a susceptibilidade magnética devido a forma da expressão (8.13) para a segunda derivada de $\varepsilon_0(h)$. O segundo termo do lado direito da igualdade de (8.13) tende a um para

$E(\phi_0) \sim [h' + (J^x + J^y) \cos \phi_0] \sim 0$ restando somente o primeiro termo que diverge logaritmicamente quando $E(\phi_0) \rightarrow 0$. Assim, notamos, através da expressão (8.13), que a susceptibilidade apresenta um divergência logarítmica.

3. Estado Fundamental - J^z próximo a zero

O modelo $XYZh$ (modelo de Heisenberg) pode ser analisado como uma perturbação do modelo XYh para J^z próximo a zero.

O estado fundamental do modelo de $XYZh$ é dado pela expressão (8.5). Esta expressão pode ser reescrita na forma,

$$\varepsilon_0 = -J^z - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathbb{E}_{\mu}(P(\phi, x)) d\phi, \quad (8.15)$$

tal que

$$P(\phi, x) = \sqrt{R(\phi, x)} + \frac{2(x^2-1)[(J^x+J^y)\cos\phi+h]^2}{(R(\phi, x))^{1/2}} J^z +$$

$$\frac{2(x^2-1)^2[(J^x-J^y)^2\sin^2\phi]}{(R(\phi, x))^{3/2}} (J^z)^2 + O[J^z]^3$$

e

$$R(\phi, x) = [(J^x + J^y) \cos \phi + h]^2 + (J^x - J^y)^2 \sin^2 \phi .$$

Para análise do estado fundamental realizado com a cota inferior, basta tomarmos $x = 0$ na expressão (8.15). Para análise do estado fundamental realizado com a cota superior, notamos que o termo de ordem J^z dá uma contribuição nula.

A ordem zero em J^z na expansão (8.15) possui os mesmos expoentes críticos do modelo XYh . Devemos analisar se os termos de contribuição de primeira e segunda ordem em J^z alteram os expoentes críticos do modelo $XYZh$ e qual esta alteração. Este tema será assunto de investigação futura.

APÊNDICE A

Variáveis de Grassmann

Nesta seção, seguiremos quase integralmente o início do capítulo 2 de Itzykson e Drouffe[**ID**]. Apresentaremos apenas as expressões utilizadas na tese.

Considere um conjunto com N símbolos η_i combinado linearmente com coeficientes $f_i \in \mathbb{C}$. η_i satisfaz a regra (associativa) de multiplicação

$$\eta_i \eta_j + \eta_j \eta_i = 0,$$

isto é, eles anticomutam, o que implica particularmente em $\eta_i^2 = 0$. Mais geralmente, $(\sum f^i \eta_i^2) = 0$.

A álgebra de Grassmann gerado por estes símbolos possui a forma mais geral dada por

$$\begin{aligned} f(\eta) &= f^0 + \sum_i f^i \eta_i + \sum_{i < j} f^{ij} \eta_i \eta_j + \sum_{i < j < k} f^{ijk} \eta_i \eta_j \eta_k + \dots \\ &= \sum_{0 \leq k \leq N} \frac{1}{k!} \sum f^{i_1 \dots i_k} \eta_{i_1} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_k}. \end{aligned}$$

Estendemos os coeficientes a um tensor antissimétrico com k índices, cada um variando de 1 a N .

Na definição de uma álgebra devemos ter um produto associativo

$$\begin{aligned} f(\eta) g(\eta) &= f^0 g^0 + \sum_i (f^0 g^i + f^i g^0) \eta_i \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{i,j} (f^{ij} g^0 + f^i g^j - f^j g^i + f^0 g^{ij}) \eta_i \eta_j + \dots \end{aligned}$$

Em geral, fg não é igual a $\pm gf$. Contudo, uma subálgebra contendo termos com número par das variáveis η comuta com qualquer f .

Seja Q uma matriz antissimétrica, $Q_{i,j} + Q_{j,i} = 0$, de tamanho $2n$. O Pfaffiano de Q é dado por

$$\begin{aligned} \text{Pf}(Q) &= \int d\eta_{2n} \dots d\eta_1 \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i,j} \eta_i Q_{i,j} \eta_j \right\} \\ &= \int d\eta_{2n} \dots d\eta_1 \prod_{i < j} (1 + Q_{i,j} \eta_i \eta_j) \\ &= \frac{1}{2^n n!} \sum_{\sigma} (-1)^{\sigma} Q_{\sigma_1, \sigma_2} \dots Q_{\sigma_{2n-1}, \sigma_{2n}}. \end{aligned}$$

A soma \sum_{σ} ocorre sobre todas as permutações dos índices $1, 2, \dots, 2n$.

APÊNDICE B

Exemplo-Positividade por Reflexão

O objetivo deste apêndice é demonstrar a desigualdade do tabuleiro de xadrez e apresentar uma aplicação simples da positividade por reflexão.

Inicialmente introduziremos um exemplo baseado nas notas de aula do Prof. Dr. Walter F. Wreszinski do Instituto de Física da USP. Este exemplo é útil para exibir as principais idéias para uma posterior prova geral da desigualdade do tabuleiro de xadrez.

Seja π o plano que divide a rede Λ ao meio na partes Λ_+ e Λ_- . Seja \mathcal{A} a família de todas as funções limitadas das variáveis σ_j . Definimos

$$\mathcal{A}_{\pm} = \bigotimes_{j \in \Lambda_{\pm}} \mathcal{A}_j ,$$

e

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_+ \otimes \mathcal{A}_- .$$

Usaremos a notação:

$$\langle\langle \cdot \rangle\rangle \equiv Tr(\cdot) \equiv \frac{1}{2^{2N}} \sum_{\{\sigma_i\} \pm 1} (\cdot) .$$

Consideraremos $F \in \mathcal{A}_+$, conseqüentemente $\theta F \in \mathcal{A}_-$. Assim,

$$\begin{aligned} \langle\langle \theta F F \rangle\rangle_0 &= Tr_-(F) Tr_+(F) \\ &= (Tr_+(F))^2 \geq 0 \end{aligned} \tag{B.1}$$

Se

$$-H = A + \theta A + \sum_{i=1}^N C_i \theta C_i,$$

então

$$\begin{aligned} \langle\langle \theta F F \rangle\rangle &= \langle\langle \theta F F e^{-H} \rangle\rangle_0 \\ &= \left\langle F e^{A\theta} (F e^A) e^{\sum_i C_i \theta C_i} \right\rangle_0 \\ &= \sum_{i,n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle\langle F e^{A C_i^n \theta} (F e^{A C_i^n}) \rangle\rangle_0 \geq 0 . \end{aligned} \tag{B.2}$$

Consideremos um sistema contendo quatro spins (veja figura) cuja interação seja dada por

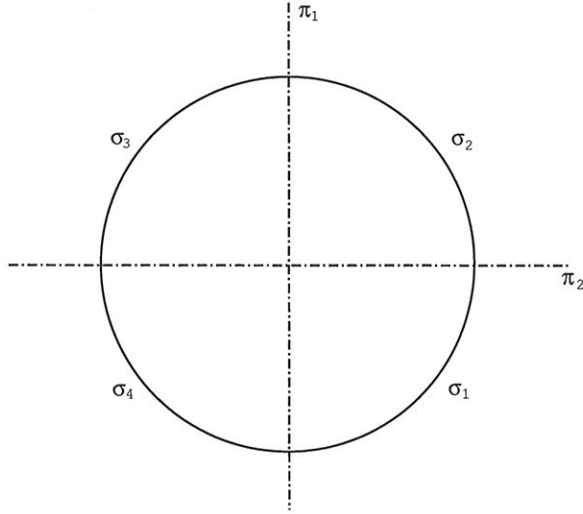


Figura 1: π_1 e π_2 :planos de reflexão em uma cadeia de spins com fronteira cíclica.

$$-H = \beta (\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1) .$$

Sejam f_1, \dots, f_4 funções a valores reais em ± 1 .

$$f_i : (\pm 1) \rightarrow \mathbb{R} .$$

Seja F e $G \in \mathcal{A}$, então estes elementos podem ser escritos como $F = F_a \otimes F_b = (F_a \otimes 1) + (1 \otimes F_b)$ e $G = G_a \otimes G_b$, com $F_a \in \mathcal{A}_+$, $F_b \in \mathcal{A}_-$, $G_a \in \mathcal{A}_+$ e $G_b \in \mathcal{A}_-$. Como $\langle \theta F_a F_a \rangle = \langle F_a \theta F_a \rangle \geq 0$, isto define um produto escalar positivo e portanto, para dois elementos quaisquer F e G de \mathcal{A} , vale a desigualdade de Schwarz

$$|\langle F\theta G \rangle|^2 \leq \langle F\theta F \rangle \langle G\theta G \rangle . \quad (\text{B.3})$$

OBSERVAÇÃO. $\langle F\theta G \rangle = \langle [(F_a + G_b + F_a G_b) \otimes 1] \theta [(F_b + G_a + F_b G_a) \otimes 1] \rangle$. Desta forma, notamos que os elementos $(F_a + G_b + F_a G_b)$ e $(F_b + G_a + F_b G_a)$ pertencem a \mathcal{A}_+ e portanto vale (B.1) e (B.2), conseqüentemente vale a desigualdade de Schwarz para quaisquer elementos F e G de \mathcal{A} .

Inicialmente, identificaremos $F\theta G = \prod_{i=1}^4 f_i(\sigma_i)$.

Na primeira etapa, escolhemos as funções F , G e o plano de reflexão π_1 :

$$\begin{aligned} F(\sigma_1, \sigma_2) &= f_1(\sigma_1) f_2(\sigma_2) \rightarrow \theta_{\pi_1} F = f_1(\sigma_4) f_2(\sigma_3), \\ G(\sigma_1, \sigma_2) &= f_3(\sigma_2) f_4(\sigma_1) \rightarrow \theta_{\pi_1} G = f_3(\sigma_3) f_4(\sigma_4), \\ \theta_{\pi_1} \sigma_1 &= \sigma_4 ; \theta_{\pi_1} \sigma_2 = \sigma_3 . \end{aligned}$$

Assim, refletindo em π_1 e usando a desigualdade de Schwarz (B.3) para esta reflexão, temos

$$\begin{aligned}
 \left\langle \prod_{i=1}^4 f_i(\sigma_i) \right\rangle &= \left\langle \overbrace{f_1(\sigma_1) f_2(\sigma_2)}^F \overbrace{f_3(\sigma_3) f_4(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_1} G} \right\rangle \\
 &\leq \left\langle \overbrace{f_1(\sigma_1) f_2(\sigma_2)}^F \overbrace{f_1(\sigma_4) f_2(\sigma_3)}^{\theta_{\pi_1} F} \right\rangle^{\frac{1}{2}} \times \\
 &\quad \left\langle \overbrace{f_3(\sigma_2) f_4(\sigma_1)}^G \overbrace{f_3(\sigma_3) f_4(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_1} G} \right\rangle^{\frac{1}{2}} .
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

Aplicando a positividade novamente em relação a π_2 , temos a reflexão

$$\begin{aligned}
 F_1(\sigma_2, \sigma_3) &= f_2(\sigma_2) f_2(\sigma_3) \rightarrow \theta_{\pi_2} F_1 = f_2(\sigma_1) f_2(\sigma_4), \\
 G_1(\sigma_2, \sigma_3) &= f_1(\sigma_2) f_1(\sigma_3) \rightarrow \theta_{\pi_2} G_1 = f_1(\sigma_1) f_1(\sigma_4), \\
 \theta_{\pi_2} \sigma_1 &= \sigma_2 ; \theta_{\pi_2} \sigma_3 = \sigma_4 .
 \end{aligned}$$

Assim, usando novamente (B.3), segue do primeiro termo do lado direito da desigualdade de (B.4)

$$\begin{aligned}
 \left\langle \overbrace{f_1(\sigma_1) f_2(\sigma_2)}^F \overbrace{f_1(\sigma_4) f_2(\sigma_3)}^{\theta_{\pi_1} F} \right\rangle &= \left\langle \overbrace{f_2(\sigma_2) f_2(\sigma_3)}^{F_1} \overbrace{f_1(\sigma_1) f_1(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_2} G_1} \right\rangle \\
 &\leq \left\langle \overbrace{f_2(\sigma_2) f_2(\sigma_3)}^{F_1} \overbrace{f_2(\sigma_1) f_2(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_2} F_1} \right\rangle^{\frac{1}{2}} \times \\
 &\quad \left\langle \overbrace{f_1(\sigma_2) f_1(\sigma_3)}^{G_1} \overbrace{f_1(\sigma_1) f_1(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_2} G_1} \right\rangle^{\frac{1}{2}} .
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Do segundo termo do lado direito da desigualdade de (B.4) usamos

$$\begin{aligned}
 F_2(\sigma_2, \sigma_3) &= f_3(\sigma_2) f_3(\sigma_3) \rightarrow \theta_{\pi_2} F_2 = f_3(\sigma_1) f_3(\sigma_4), \\
 G_2(\sigma_2, \sigma_3) &= f_4(\sigma_2) f_4(\sigma_3) \rightarrow \theta_{\pi_2} G_2 = f_4(\sigma_1) f_4(\sigma_4), \\
 \theta_{\pi_2} \sigma_1 &= \sigma_2 ; \theta_{\pi_2} \sigma_3 = \sigma_4 .
 \end{aligned}$$

para obtermos a expressão

$$\begin{aligned}
 \left\langle \overbrace{f_3(\sigma_2) f_4(\sigma_1)}^G \overbrace{f_3(\sigma_3) f_4(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_1} G} \right\rangle &= \left\langle \overbrace{f_3(\sigma_2) f_3(\sigma_3)}^{F_2} \overbrace{f_4(\sigma_1) f_4(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_2} G_2} \right\rangle \\
 &\leq \left\langle \overbrace{f_3(\sigma_2) f_3(\sigma_3)}^{F_2} \overbrace{f_3(\sigma_1) f_3(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_2} F_2} \right\rangle^{\frac{1}{2}} \times \quad (B.6) \\
 &\quad \left\langle \overbrace{f_4(\sigma_2) f_4(\sigma_3)}^{G_2} \overbrace{f_4(\sigma_1) f_4(\sigma_4)}^{\theta_{\pi_2} G_2} \right\rangle^{\frac{1}{2}} .
 \end{aligned}$$

Substituindo (B.5) e (B.6) em (B.4), obtemos finalmente

$$\begin{aligned}
 \left\langle \prod_{i=1}^4 f_i(\sigma_i) \right\rangle &= \langle f_1(\sigma_1) f_2(\sigma_2) f_3(\sigma_3) f_4(\sigma_4) \rangle \\
 &\leq \prod_{i=1}^4 \langle f_i(\sigma_1) f_i(\sigma_2) f_i(\sigma_3) f_i(\sigma_4) \rangle^{\frac{1}{4}} \\
 &= \prod_{i=1}^4 \left\langle \prod_{j=1}^4 f_i(\sigma_j) \right\rangle^{\frac{1}{4}} .
 \end{aligned}$$

A partir deste exemplo, segue a

PROPOSIÇÃO B.1 (Estimativa do tabuleiro de xadrez).

$$\left\langle \prod_{\alpha \in \Lambda} f_\alpha(\sigma_\alpha) \right\rangle \leq \prod_{\alpha \in \Lambda} \left\langle \prod_{\beta \in \Lambda} f_\alpha(\sigma_\beta) \right\rangle^{\frac{1}{|\Lambda|}} .$$

DEMONSTRAÇÃO. Fazendo $G = 1$ em (B.3), obtemos (veja [Nu])

$$|\langle F \rangle|^2 \leq \langle F \theta_\pi F \rangle . \quad (B.7)$$

Podemos repetir este procedimento n vezes em uma linha da rede para obtermos

$$|\langle F \rangle|^{2^n} \leq \langle F (\theta_{\pi_1} F (\theta_{\pi_2} F (\dots \theta_{\pi_n} F \dots))) \rangle .$$

Denotando $|\Lambda|$ o tamanho do sistema, temos equação anterior que

$$\langle \text{local } F \rangle \leq \langle \text{refletido } F \rangle^{\frac{1}{|\Lambda|}} , \quad (B.8)$$

tal que "local F " denota uma função local F e "refletido F " denota uma função F gerada por consecutivas reflexões de F em diferentes planos, até a completa cobertura da rede. Temos

$$\langle \text{refletido } F \rangle = \frac{Z_{\text{refletido } F}}{Z}$$

tal que $Z_{\text{refletido } F}$ é a soma de todos os pesos de Boltzmann correspondendo a configuração refletido F que gera toda a rede, e Z é a função de partição original.

Em seguida, estenderemos a desigualdade acima. Suponha que F_i denota certa configuração local com relação ao ponto x_i . Pela desigualdade de Schwarz (B.3) temos

$$\begin{aligned} \langle F_1 F_2 \rangle^2 &= \langle F_1 \theta_\pi \bar{F}_2 \rangle^2 \\ &\leq \langle F_1 \theta_\pi F_1 \rangle \langle F_2 \theta_\pi F_2 \rangle , \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

tal que $\bar{F} \equiv \theta_\pi F$. Agora, aplicaremos a equação (B.7) ao lado direito de (B.9) para obter

$$\langle F_1 F_2 \rangle^2 \leq \langle \text{refletido } F_1 \rangle^{\frac{1}{|\Lambda|}} \langle \text{refletido } F_2 \rangle^{\frac{1}{|\Lambda|}} , \quad (\text{B.10})$$

que pode ser verificada pela inserção de (B.8).

Para a média de três funções locais notamos que

$$\begin{aligned} \langle F_1 F_2 F_3 \rangle^3 &= \langle (F_1 F_2) \theta_\pi \bar{F}_3 \rangle \times \langle (F_1 F_3) \theta_\pi \bar{F}_2 \rangle \times \\ &\quad \langle (F_2 F_3) \theta_\pi \bar{F}_1 \rangle , \end{aligned}$$

isto é, um produto de termos da forma $\langle F \theta_\pi G \rangle$. Podemos aplicar a desigualdade de Schwarz, como foi feito em (B.9), e utilizar (B.8) para obter a extensão da equação (B.10).

Finalmente, por indução, obtemos para a média de l funções locais

$$\left\langle \prod_{i=1}^l F_i \right\rangle \leq \prod_{i=1}^l \langle \text{refletido } F_i \rangle^{\frac{1}{|\Lambda|}} . \quad (\text{B.11})$$

■

Através da equação (B.11), funções locais (lado esquerdo da equação) podem ser eficientemente limitadas por funções globais (lado direito da equação).

APÊNDICE C

Interação Quártica

Mostraremos, neste apêndice, um outro método de obtenção da expressão (3.26) da função de partição do modelo de oito vértices.

1. Introdução

Como objetivo inicial, procuramos calcular a função geratriz da cobertura de uma rede retangular bi-dimensional por 8 vértices distintos de pesos arbitrários, sendo então uma busca por resultados mais gerais que o desenvolvido em [MR], o qual estava restrito às condições de fermions livres. Este problema é reescrito em função do cálculo da função de partição com o auxílio dos operadores de fermions. Nesta reformulação surge, de maneira natural, interações quárticas entre os fermions, ficando, desta forma, associada à arbitrariedade da escolha dos oito vértices que, por sua vez, está associada à solução geral do modelo de Heisenberg quântico. Cabe ressaltar também a associação, quase que direta, entre interações quárticas de fermions e o modelo de Hubbard. Notamos, com isto, que estes problemas estão intrinsicamente associados e resultados obtidos em um deles beneficiará, de modo direto, na solução e compreensão dos outros.

Assim, neste capítulo, estudamos as interações quárticas e analisamos estas interações expressando-as, com o auxílio de uma integral gaussiana, como duas interações duplas (veja C.7), perdendo, com isto, a homogeneidade das interações na rede. Em virtude desta transformação, obteremos, no resultado final, um problema de matrizes aleatórias, já que o cálculo da função de partição com suas devidas interações na rede retangular esta associado ao Pfaffiano de uma matriz, ou seja, à raiz quadrada de uma matriz, neste caso, aleatória. Agora, cabe pesquisar e desenvolver resultados de modo a obter alguma saída para este problema.

Seguiremos as notações e convenções descritas no capítulo 4 do livro Order-Disorder Phenomena [GH] e também os artigos de Hurst [Hu] e Fan e Wu [FW2], para obtermos a função de partição Z , como média sobre o vácuo, definida numa rede retangular bidimensional.

2. Condição de fermions livres

Dada uma rede Z^2 e um ponto j da rede com seus 4 primeiros vizinhos, podemos conectar o ponto j aos 4 vizinhos através de ligações com pesos correspondentes, neste caso, x (peso horizontal) e y (peso vertical).

2. Condição de fermions livres

Desejamos obter a função geratriz

$$Z_G = \sum_{P=1}^N \sum_{Q=1}^N g(P, Q) x^P y^Q \quad (C.1)$$

da cobertura de Z^2 por polígonos pares.

O operador $a_j^{(h)*}$ simbolizará a emissão de uma ligação do ponto j da rede ao ponto $(j+1)$, e $a_j^{(h)}$ simbolizará a absorção da mesma ligação no ponto $(j+1)$ da rede.

Veja figura 1.

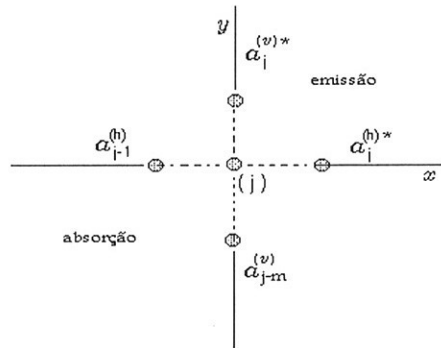


Figura 1: $a_j^{(h)} = -a_{j+N}^{(h)*}$ para $1-m \leq j \leq 0$

Uma dada configuração de polígonos na rede é obtida da seguinte forma:

Começando com o primeiro ponto ($j=1$), se houver qualquer ligação do grafo G conectando este ponto a outro ponto da rede, aplicamos o operador $a_j^{(h)*}$ correspondente ao estado Φ_0 , na ordem anti-horária. Procedemos analogamente com respeito ao segundo ponto ($j=2$). Se houver qualquer ligação do grafo conectando este ponto aos pontos posteriores da rede, aplicamos o correspondente operador de emissão na ordem anti-horária, e se houver uma ligação já emitida pelo primeiro ponto da rede conectando a este, aplicamos o operador de absorção apropriado.

Através deste processo de aplicar os operadores de emissão para ligações aos pontos posteriores e operadores de absorção para ligações já emitidas por pontos anteriores da rede, obtemos todas as configurações da rede.

Veja na figura 2 um exemplo típico.

Representaremos por Φ_0 o estado da rede sem nenhuma ligação.

Supomos ainda $(\Phi_0, \Phi_0) = 1$ (normalizado).

a) Então $(\Phi_0, \Phi_G) = (-1)^{\Lambda_G}$ onde Λ_G é a paridade do grafo.

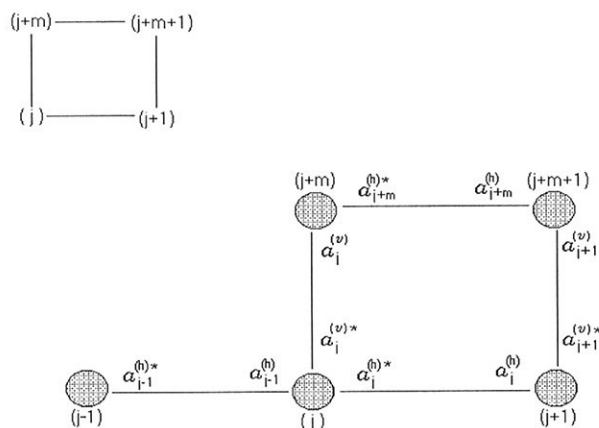


Figura 2: $\Phi_G = (a_{j+1}^{(v)} a_{j+m}^{(h)})(a_j^{(v)} a_{j+m}^{(h)*})(a_j^{(h)} a_{j+1}^{(v)*})(a_j^{(v)*} a_j^{(h)*})\Phi_0$

b) Mostraremos que

$$\begin{aligned} Z_1 &= \sum_G (\Phi_0, \Phi_G) x_h^P x_v^Q \\ &= \sum_G (-1)^{\Lambda_G} x_h^P x_v^Q \end{aligned}$$

é reduzida a função de partição (C.1) desde que Λ_G seja sempre par.

Devido à relação de anti-comutação satisfeita pelos férmions

$$\begin{aligned} \{a_j^{(h)}, a_k^{(i)*}\} &= \delta_{hi} \delta_{jk} \\ \{a_j^{(i)}, a_k^{(i)}\} &= \{a_j^{(i)*}, a_k^{(i)*}\} = 0 \end{aligned} \quad (C.2)$$

a) Φ_0 satisfaz

$$a_j^{(h)} \Phi_0 = 0$$

onde $a_j^{(h)}$ e $a_j^{(h)*}$ são hermitiano conjugados um do outro, de modo que, se Φ for um vetor qualquer,

$$(\Phi_0, a_j^{(h)*} \Phi) = (a_j^{(h)} \Phi_0, \Phi) = 0$$

Denotando por Π como o produto de $a_j^{(h)}$'s e $a_i^{(h)*}$'s aplicado a alguma configuração (ou a algum grafo), temos três possibilidades

2. Condição de fermions livres

i) Π contem um fator $a_j^{(h)}$ sem o correspondente fator $a_j^{(h)*}$, ou vice-versa. Neste caso

$$(\Phi_0, \Pi\Phi_0) = 0$$

ii) cada $a_j^{(h)}$ possui em Π seu correspondente fator $a_j^{(h)*}$, o qual está a sua direita. Assim, (usando $a_j a_j^* = \{a_j, a_j^*\} - a_j^* a_j$)

$$\begin{aligned} (\Phi_0, \Pi_1 a_j^{(h)} \Pi_2 a_j^{(h)*} \Phi_0) &= \pm (\Phi_0, \Pi_1 \Pi_2 a_j^{(h)} a_j^{(h)*} \Phi_0) = \\ &\pm (\Phi_0, \Pi_1 \Pi_2 \{a_j^{(h)}, a_j^{(h)*}\} \Phi_0) = \pm (\Phi_0, \Pi_1 \Pi_2 \Phi_0) = \\ &= \dots = \pm (\Phi_0, \Phi_0) = \pm 1 \end{aligned}$$

Sendo Φ_G da forma $\Pi\Phi_0$ temos

$$(\Phi_0, \Phi_G) = (-1)^{\Lambda_G}$$

b) No modelo de Ising ocorre apenas polígonos fechados e estes sempre apresentam um número par de ligações, então Λ_G é par.

Assim, para o modelo de Ising temos

$$\begin{aligned} Z &= (\Phi_0, \prod_{j=1}^N [(1 + a_{j-m}^{(2)} a_{j-1}^{(1)}) (1 + x y a_j^{(2)*} a_j^{(1)*}) \\ &\quad - (a_{j-m}^{(2)} + a_{j-1}^{(1)}) (y a_j^{(2)*} + x a_j^{(1)*})] \Phi_0) \end{aligned}$$

onde o sentido do produtório acima é ordenado da direita ($j = 1$) para a esquerda ($j = N$).

O termo do produtório acima pode ser escrito como (veja a figura 1)

$$\begin{aligned} &1 + x y a_{j-m}^{(2)} a_{j-1}^{(1)} a_j^{(2)*} a_j^{(1)*} + a_{j-m}^{(2)} a_{j-1}^{(1)} + x y a_j^{(2)*} a_j^{(1)*} \\ &- y a_{j-m}^{(2)} a_j^{(2)*} - x a_{j-m}^{(2)} a_j^{(1)*} - y a_{j-1}^{(1)} a_j^{(2)*} - x a_{j-1}^{(1)} a_j^{(1)*} . \end{aligned}$$

Notemos que o sinal negativo desaparece quando todos os produtos são postos na ordem normal (operadores de criação ficam a esquerda).

Considerando o problema de oito vértices arbitrários w_1, w_2, \dots, w_8 e traçando um paralelo com o modelo de Ising, temos

$$\begin{aligned} Z_{8v} &= (\Phi_0, \prod_{j=1}^N [w_1 + w_2 a_j^{(2)*} a_j^{(1)*} a_{j-m}^{(2)} a_{j-1}^{(1)} + w_3 a_j^{(2)*} a_{j-m}^{(2)} + w_4 a_j^{(1)*} a_{j-1}^{(1)} \\ &\quad + w_5 a_j^{(2)*} a_{j-1}^{(1)} + w_6 a_j^{(1)*} a_{j-m}^{(2)} + w_7 a_j^{(2)*} a_j^{(1)*} + w_8 a_{j-m}^{(2)} a_{j-1}^{(1)}] \Phi_0) \end{aligned}$$

com $a_j^{(1)} = -a_{j+N}^{(1)*}$ ($1-m \leq j \leq 0$). Aqui, 1(2) representa a direção horizontal(vertical).

Veja a figura 3 na página 129.

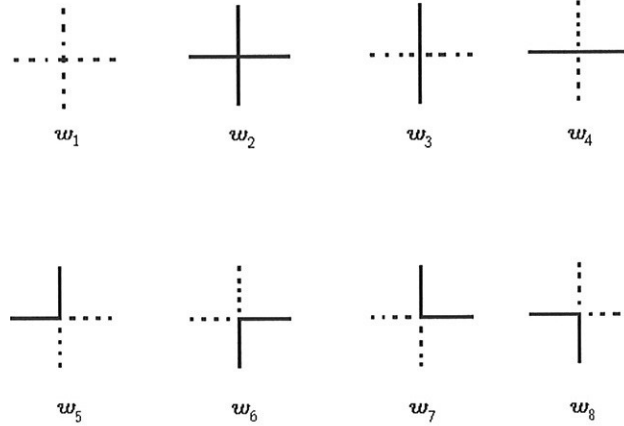


Figura 3: Oito vértices

Usando a relação de anti-comutação dos operadores de fermions, escrevemos Z_{8v} como

$$Z_{8v} = w_1^N (\Phi_0, T \exp \sum_{j=1}^N [H_0(j) + H_1(j)] \Phi_0)$$

sendo

$$H_0(j) = \frac{w_3}{w_1} a_j^{(2)*} a_{j-m}^{(2)} + \frac{w_4}{w_1} a_j^{(1)*} a_{j-1}^{(1)} + \frac{w_5}{w_1} a_j^{(2)*} a_{j-1}^{(1)} + \quad (C.3)$$

$$\frac{w_6}{w_1} a_j^{(1)*} a_{j-m}^{(2)} + \frac{w_7}{w_1} a_j^{(2)*} a_j^{(1)*} + \frac{w_8}{w_1} a_{j-m}^{(2)} a_{j-1}^{(1)}$$

e

$$H_1(j) = \frac{\Delta}{w_1^2} a_j^{(2)*} a_j^{(1)*} a_{j-m}^{(2)} a_{j-1}^{(1)} \quad (C.4)$$

com

$$\Delta = w_1 w_2 + w_3 w_4 - w_5 w_6 - w_7 w_8 \quad (C.5)$$

e T o operador de ordenamento dos índices de $j = 1$ a $j = N$.

Vemos que $\Delta = 0$ corresponde à condição de fermions livres em que a interação quártica (C.4) é anulada.

3. Função de partição

Se $\Delta = 0$, a função de partição do modelo de oito vértices é dada por [LSM]

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_{8v} = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \ln[\alpha + 2\beta \cos \theta + \quad (C.6)$$

$$2\gamma \cos \phi + 2\delta \cos(\theta - \phi) + 2\varepsilon \cos(\theta + \phi)]$$

com

$$\alpha = w_1^2 + w_2^2 + w_3^2 + w_4^2$$

3. Função de partição

$$\beta = w_1 w_3 - w_2 w_4$$

$$\gamma = w_1 w_4 - w_2 w_3$$

$$\delta = w_3 w_4 - w_7 w_8$$

$$\varepsilon = w_3 w_4 - w_5 w_6$$

Retornando ao caso geral de Δ , dado por (C.5), e simplificando a notação, representaremos a função de partição por

$$Z_{8v} = w_1^N \langle 0 | \prod_{j=1}^N e^{H_0 + H_1} | 0 \rangle$$

com

$$H_0 = \frac{w_3}{w_1} b + \frac{w_4}{w_1} a + \frac{w_5}{w_1} c + \frac{w_6}{w_1} d + \frac{w_7}{w_1} e + \frac{w_8}{w_1} f$$

e

$$H_1 = -\alpha ab,$$

tal que

$$b = a_j^{(2)\dagger} a_{j-m}^{(2)},$$

$$a = a_j^{(1)\dagger} a_{j-1}^{(1)},$$

$$c = a_j^{(2)\dagger} a_{j-1}^{(1)},$$

$$d = a_j^{(1)\dagger} a_{j-m}^{(2)},$$

$$e = a_j^{(2)\dagger} a_j^{(1)\dagger},$$

$$f = a_{j-m}^{(2)} a_{j-1}^{(1)},$$

sendo $\alpha = \Delta/w_1^2$.

Usando

$$\alpha^2 = b^2 = 0; [a, b] = ab - ba = 0$$

e

$$e^{-\alpha ab} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2 + \sqrt{\alpha}(a-b)x} dx \quad (C.7)$$

temos

$$e^{H_0 + H_1} = \frac{e^{H_0}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2 + \sqrt{\alpha}(a-b)x} dx. \quad (C.8)$$

Substituindo H_0 na equação (C.8), encontramos

$$e^{H_0 + H_1} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2} e^{\frac{w_3'}{w_1} b + \frac{w_4'}{w_1} a + \frac{w_5}{w_1} c + \frac{w_6}{w_1} d + \frac{w_7}{w_1} e + \frac{w_8}{w_1} f} dx \quad (C.9)$$

sendo

$$\begin{cases} w_3' = w_3 - \sqrt{\Delta}x \\ w_4' = w_4 + \sqrt{\Delta}x \end{cases} \quad (C.10)$$

Notamos, com isto, que os vértices 3 e 4 perdem a característica de homogêneos e passam a depender dos sítios da rede. Os outros vértices permanecem da mesma forma.

Substituindo (C.9) em Z_{8v} , temos:

$$Z_{8v} = w_1^N \langle 0 | \prod_{j=1}^N \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}x_j^2 + H_0(x_j)} dx_j \right\} | 0 \rangle$$

tal que $H_0(x_j) = \frac{w_3'(x_j)}{w_1} b + \frac{w_4'(x_j)}{w_1} a + \frac{w_5}{w_1} c + \frac{w_6}{w_1} d + \frac{w_7}{w_1} e + \frac{w_8}{w_1} f$. Desta forma,

$$\begin{aligned} Z_{8v} &= w_1^N \int_{-\infty}^{\infty} \left(\prod_{j=1}^N d\mu(x_j) \right) Z_1 \\ &= w_1^N \mathbb{E}_\mu(Z_1) \end{aligned} \tag{C.11}$$

em que $d\mu(x_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x_j^2} dx_j$ é uma medida gaussiana e $Z_1 = \langle 0 | \prod_{j=1}^N e^{H_0(x_j)} | 0 \rangle$. Se $\Delta = 0$ na expressão (C.11), retornaremos ao caso abordado por Hurst em que há somente interações duplas dos fermions. Neste artigo, Hurst expande o produtório em Z_1 e expressa-o como o exponencial de uma soma. Para isto, usa o operador T que ordena os fermions em ordem normal contraindo-os graças a utilização das relações de anti-comutação (C.2) e, usando o fato de Z_1 estar sendo calculado com relação à média no vácuo.

Em seguida, evolviremos Z_1 , expressando-a como

$$Z_1 = \langle 0 | T \exp \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{p=1}^4 \sum_{q=1}^4 K_{pq} A^p(j) A^q(j) \right\} | 0 \rangle$$

onde T é o operador que ordena os termos da expressão da exponencial em ordem crescente de j da direita para a esquerda, $[K_{pq}]$ é uma matriz anti-simétrica dada por

$$K(j) = [K_{pq}]_j = \frac{1}{w_1} \begin{bmatrix} 0 & -w_8 & -w_4'(x_j) & -w_5 \\ w_8 & 0 & -w_6 & -w_3'(x_j) \\ w_4'(x_j) & w_6 & 0 & -w_7 \\ w_5 & w_3'(x_j) & w_7 & 0 \end{bmatrix} \tag{C.12}$$

e

$$\begin{cases} A^1(j) = a_{j-1}^{(1)}, & A^2(j) = a_{j-m}^{(2)}, \\ A^3(j) = a_j^{(1)\dagger} & \text{e } A^4(j) = a_j^{(2)\dagger}. \end{cases}$$

Se denotarmos $A(j, j')$ a matriz contraída por ordenação temporal, temos

$$A(j, j') = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \delta_{j-1, j'} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \delta_{j-m, j'} \\ -\delta_{j+1, j'} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\delta_{j+m, j'} & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Estes são os termos que sobrevivem da expansão da exponencial quando tentamos ordenar os operadores de criação sempre do lado direito e os de aniquilação do lado

esquerdo e em igual número, além do sinal negativo quando reordenamos os operadores de fermions envolvendo um número ímpar de permutação. Assim, por exemplo

$$\begin{aligned} T(A^1(j), A^3(j')) &= \theta(j - j') a_{j-1}^{(1)} a_{j'}^{(1)\dagger} - \theta(j' - j) a_{j'}^{(1)\dagger} a_{j-1}^{(1)} \\ &= -a_{j'}^{(1)\dagger} a_{j-1}^{(1)} + \theta(j - j') \delta_{j', j-1} \end{aligned}$$

e, portanto

$$A^1(j) A^3(j') = \delta_{j', j-1}$$

com

$$\begin{aligned} \theta(j) &= 1 \text{ se } j \geq 0 \\ &= 0 \text{ se } j < 0. \end{aligned}$$

Definindo

$$X = -A(j, j+1) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

e

$$Y = -A(j, j+m) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

podemos escrever

$$A = -\Pi \otimes X + \Pi^{-1} \otimes X^t - \Pi^m \otimes Y + \Pi^{-m} \otimes Y^t. \quad (\text{C.13})$$

Esta expressão é análoga à expressão que encontramos em (5.5) de [MR].

Seguindo os mesmos procedimentos do artigo de Hurst[**Hu**], encontramos

$$Z_1 = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{l=1}^{\infty} L^{(l)} \right)$$

tal que $L^{(l)} = \frac{1}{l} \text{Tr} [(KA)^l]$, sendo $K = \text{diag}(K_1, K_2, \dots, K_N)$ e $\text{Tr} [B]$ o traço de uma matriz B . Usando $\log(1-x) = -x - \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{3}x^3 - \dots = -\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} x^j$, temos

$$Z_1 = \exp \left(\frac{1}{2} \text{Tr} [\ln(1 - KA)] \right). \quad (\text{C.14})$$

Utilizando a expressão válida para qualquer matriz D quadrada com determinante $\det(D)$ não nulo,

$$\text{Tr} [\ln D] = \ln[\det(D)]$$

obtemos

$$\begin{aligned} Z_1 &= \exp \left(\frac{1}{2} \ln[\det(1 - KA)] \right) \\ &= \sqrt{\det(1 - KA)}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Sendo $\det(1 - KA) = \det(K) \det(K^{-1} - A) = \left(\prod_{j=1}^N \det(K_j) \right) \det(K^{-1} - A)$.

Substituindo (C.15) em (C.11), encontramos a expressão para a função de partição do modelo de oito vértices,

$$Z_{8v} = w_1^N \mathbb{E}_\mu \left(\sqrt{\det(1 - KA)} \right) .$$

Portanto, mostramos, neste apêndice, um outro método de obtenção da expressão (3.26).

Bibliografia

- [BaMc] E. Barouch e B. M. McCoy, *Phys. Rev. A* **3**, 786 (1971).
- [BS] Barry Simon, "The Statistical Mechanics of Lattice Gases", Vol. I, Princeton University Press, Princeton, N.J., (1993).
- [Ba] R.J. Baxter, "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics", Academic Press, London (1982).
- [Ba2] R. J. Baxter, *Phys. Rev. Letters* **26**, 832 (1971).
- [Bi] Marek Biskup, "On Three Techniques For Rigorous Proofs of First-Order Phase Transitions", Junho de 1999, MediaGroep KUN/AZN. Veja o site <http://www.math.ucla.edu/~biskup/PDFs/thesis.pdf>.
- [BuMc] J. E. Bunder, R. H. McKenzie, *cond-mat/9812430* (1998). Veja também *Phys. Rev. B* **60**, 344 (1999).
- [Ca] H. B. Callen, *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, John Wiley, New York (1985).
- [Co] Colin J. Thompson, *Classical Equilibrium Statistical Mechanics* (Clarendon Press, 1988).
- [Da] Philip J. Davis, "Circulant Matrices", John Wiley & Sons, New York (1979).
- [MR] D. H. U. Marchetti e C. F. S. Rodrigues: Combinatorial Solution of one-dimensional Quantum Systems. Veja *cond-mat/0309593* em http://arxiv.org/PS_cache/cond-mat/pdf/0309/0309593.pdf.
- [Wiki] Enciclopédia livre - www.wikipedia.org/wiki
- [FW] C. Fan e F. Y. Wu, *Phys. Rev. B*. Vol. **2**, 723(1970).
- [FW2] C. Fan e F. Y. Wu: Ising Model with Second-Neighbor Interaction. I. Some Exact Results and an Approximate Solution, *Physical Review*, **179**, 560(1969).
- [FILS] J. Fröhlich, R. Israel, E.H. Lieb e B. Simon, *Commun. Math. Phys.* **62**, 1 (1978); *Journal of Statistical Physics* **22**, 297 (1980).
- [FL] J. Fröhlich, E.H. Lieb, Phase transitions in anisotropic lattice spin systems, *Commun. Math. Phys.* **60**, 233-267(1978).
- [Ga] Christof Gatteringer: A formula for the hopping expansion of 8-vertex models coupled to an external field, *cond-mat/9811139*
- [GH] H. S. Green e C. A. Hurst: *Order-Disorder Phenomena*, Interscience Publishers - 1964, Vol. 5.
- [Hu] C. A. Hurst: New Approach to the Ising Problem, *J. M. Physics* **7**, 305(1966).
- [Is] E. Ising, *Z. Physik* **31**, 253 (1925).
- [ID] Claude Itzykson e Jean-Michel Drouffe: *Statistical Field Theory*, Vol. I, Cambridge University Press.
- [Ka] P. W. Kasteleyn, Dimer Statistics and phase transitions, *J. Math. Phys.* **4**, 287 (1963)/ *Exactly Solvable Lattice Models*, Instituut-Lorentz, Netherlands(1974).
- [Kau] B. Kaufmann, Crystal Statistical. II. Partition function evaluated by spinor analysis, *Phys. Rev.* **76**, 1232 (1949).
- [KL] T. Kennedy e H. Lieb: An Itinerant Electron Model with Crystalline or Magnetic Long Range Order, *Physica A* **138**, 320-358(1986).

-
- [KZ] H. Kunz e G. Zumbach: "Phase transition in a nematic n-vector model: the large n limit ", Journ.Phys. A **25**, 6155-6162(1992).
- [LB] D. A. Lavis e G. M. Bell, "Statistical Mechanics of Lattice Systems", Vol. I e II, Springer-Verlag, 1999. Estes livros podem ser encontrados em <http://www.mth.kcl.ac.uk/~dlavis/books/>.
- [Led] W. Ledermann: Asymptotic formulae relating to physical theory of crystals
- [Lem] P. Lemberger: J. Phys. A **25** (1992) p. 715.
- [LSM] E. Lieb, T. Shultz e D. Mattis, Ann. Phys. **16**, 406 (1961).
- [M] Shang-Keng Ma, "Modern Theory of Critical Phenomena", Addison-Wesley Publishing Co., 5ª impressão (1982)
- [MW] B. M. McCoy e T. T. Wu, "The Two-dimensional Ising Model", Harvard University Press, 1973.
- [Ni] M. den Nijs, Phase transitions and critical phenomena, editado por C. Domb e J. L. Lebowitz (Academic, London, 1988), vol. **12**, p. 264.
- [Nu] Zohar Nussinov, "The π Flux Phase, Magnetic Field Riddled (or Frustrated) XY Models, Reflection Positivity, and All of That", cond-mat/0107339 (2003).
- [On] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [Or] Order Parameter and Correlation Length. [www.physics.gatech.edu /academics/Classes/spring2002/6107/Resources.htm](http://www.physics.gatech.edu/academics/Classes/spring2002/6107/Resources.htm).
- [OS] Osterwalder, K., Schrader, R. : Axioms for Euclidean Green's Functions 2. Commun. Math. Phys. **42**, 281-305 (1975) .
- [Pl] V. N. Plechko, "Fermionic Integrals and Analytic Solutions for Two-Dimensional Ising Models", cond-mat/9812434 (1998).
- [PS] Haru Pinson e Thomas Spencer: Universality in 2D Critical Ising Model. Preprint 2000.
- [Ru] D. Ruelle, "Statistical Mechanics". Benjamin, New York, U.S.A (1969).
- [Sh] S. B. Shlosman. "The method of reflection positivity in the mathematical theory of first-order phase transitions", Russ. Math. Surveys, 41, 1986.
- [SS] Stuart Samuel, J. Math. Phys. **21** (1980)2806.
- [SML] T. Schultz, D. Mattis, E. Lieb, "Two-dimensional Ising model as a soluble problem of many Fermions", Rev. Mod. Phys. **36** (1964) 856.
- [Se] E. Seiler, "Gauge Theories as a problem of Constructive Quantum Field Theory and Statistical Mechanics", Troisieme Cycle de la Physique, 1980.
- [Sp] Thomas Spencer, "A mathematical approach to universality in two dimensions", Physica A **279**, 250-259 (2000).
- [ViSh] Yvon Vignaud, S. B. Shlosman, "Reflexion positivity and phase transitions". Trabalho sob revisão que pode ser encontrado no site: <http://www.ens-lyon.fr/~yvignaud/maths/Shlosman/RPshort/> .
- [Wu] F. W. Wu, The Ising model with four interaction, Phys. Rev. B **4**, 2312 (1971).
- [WH] M. C. Wu e C. K. Hu, "Exact partition functions of the Ising model on $M \times N$ planar lattices with periodic-aperiodic boundary conditions", cond-mat/0204217 (2002)."
- [YL] C.N. Yang e T.D. Lee: Statistical theory of equations of state and phase transitions. I Theory of condensation. Phys. Rev. **87**, 404 (1952).

Índice

- ação, 26
- condição de fermions livres, 27
- correlação, 11
 - comprimento de correlação, 12
 - função de correlação, 12
- covariância, 11
- desigualdade de Schwarz, 60, 81
- desigualdade do tabuleiro de xadrez, 61, 82
- determinante, 23
- distribuição de Boltzmann, 6
- energia livre de Gibbs, 8
- ensemble, 5
- expoente crítico, 16
- fase ferromagnética, 10
- fase paramagnética, 10
- gap, 45
- grupo de renormalização, 1
- hipótese ergódica, 5
- limite termodinâmico, 7
- magnetização, 10
- magnetização espontânea, 11
- modelo de 16-vértices, 19
- modelo de Heisenberg, 9, 48
- modelo de Ising, 8
- modelo de Ising, expoentes críticos, 55
- modelo de Ising, função de partição, 53
- modelo de oito vértices, campo nulo, 20
- modelo de oito vértices, cota inferior, 99
- modelo de oito vértices, cota superior, 57
- modelo de oito vértices, função de partição, 19
- modelo ferroelétrico geral, 19
- modelo XXZ, cota superior, 95
- modelo XYh, 33
- modelo XYh, expoentes críticos, 48
- modelo XYZh, 9, 48
- modelo XYZh, cota inferior e superior, 109
- modelo XYZh, cota superior, 96
- modelos exatamente solúveis, 1
- ordem de longo alcance, 13
- parâmetro de ordem, 11
- Pfaffiano, 24
- plano de reflexão, 65
- positividade por reflexão, 58, 59
- positividade por reflexão torcida, 57, 61
- produto interno, 59
- quebra de simetria, 13
- susceptibilidade, 11
- temperatura crítica, 11, 15
- teoria de escala, 16
- transição anisotrópica, 44
- transição de fase, 14
- transição de fase de primeira ordem
 - Classificação de Ehrenfest, 15
 - Classificação moderna, 15
- transição de fase de segunda ordem
 - Classificação de Ehrenfest, 15
 - Classificação moderna, 16
- transição de Ising, 44
- universalidade, 1, 13
 - classe de universalidade, 16
- variáveis de Grassmann, 22
- variância, 11

