Universidade de São Paulo
Instituto de Física e Química de São Carlos

Invariância Conforme e modelos com expoentes críticos variáveis

Márcio José Martins

Tese apresentada ao Instituto de Física e Química de São Carlos, para obtenção do Título de Doutor em Ciências (Física Básica).

Orientador: Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

São Carlos - 1988

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE _____
Marcio José Martins **APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM** 27 **DE** janeiro **DE** 1989

Comissão Julgadora:

Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz (orientador)

Prof. Dr. José Roberto Drugowich de Felício

Prof. Dr. Roland Köberle

Prof. Dr. Marcelo Gomes

Prof. Dr. Valério Kurak

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. **Francisco C. Alcaraz** pela orientação segura e com quem nestes dois últimos anos muito aprendi.

À **Márcia** pelo incentivo e por ter me iniciado em mecânica estatística.

Aos Professores **E. C. Marino**, **R. Köberle**, **Luiz N. de Oliveira**, **N. Estudart**, **J. R. de Felicio**, **R. J. C. da Costa**, **Guilherme P. L. Ferreira**.

Aos meus Amigos **Abraham**, **Clistenis**, **Nagib**, **N. Caticha**, **Tomaz**.

Ao **Grupo de Otica** por ter facilitado o uso do terminal TTB7.

À **FAPESP** e à **UFSCar** pelo suporte financeiro.

À **Nêuri** pela datilografia rápida e eficiente.

À **Cecília** e à **Irene**.

Ao **Italo**, **Tilde** e **Sônia**.

À Márcia e à Vitória
pelo carinho e incentivo

Indice

Resumo

Neste tese estudamos as propriedades criticas dos modelos anisotrópicos (isotrópicos) de Heisenberg com spin s arbitrário. O espectro das Hamiltonianas, com condições periódicas de contorno, foram calculados para redes finitas, resolvendo-se as equações do Bethe ansatz associadas. Nossos resultados indicam que a anomalia conforme destes modelos tem o valor $c = 3s/(1+s)$, independente da anisotropia, e os expoentes críticos variam continuamente com a anisotropia assim como no modelo de 8-vértices. O conteúdo de operadores destes modelos indica que a teoria de campos que governa a criticalidade destes modelos de spin é descrita por operadores formados pelo produto de um operador Gaussiano por outro com simetria $Z(2s)$. Estudando estes modelos, com certas condições especiais de contorno, mostramos que eles são relacionados com uma nova classe de Teorias unitárias recentemente propostas.

Abstract

This thesis is concerned with the critical properties of anisotropic (isotropic) Heisenberg chain, with arbitrary spin-s. The eigenspectrum of these Hamiltoniana, with periodic boundaries, are calculated for finite chains by solving numerically their associated Bethe ansatz equations. The results indicate that the conformal anomaly has the value $c = 3s/1+s$, independently of the anisotropy, and the exponentes vary continuously with the anisotropy like in the 8-vertex model. The operator content of these models indicate that the underlying field theory governing these critical spin-s models are described by composite fields formed by the product of Gaussian and Z(2s) fields. Studying these models, with some special boundary conditions, we show that they are related with a large class of unitary conformal field theories recently introduced.

Capítulo I

Introdução

O interesse pelo estudo dos fenomenos criticos na mecanica estatistica teve um forte impulso na decada de 70 devido ao surgimento do método do Grupo de Renormalização introduzido por WILSON [1]. O Grupo de Renormalização explora a idéia de, no ponto critico (T_c), os modelos de mecânica estatistica serem invariantes por transformações de escala (dilatações). Nas proximidades do ponto critico das transições de fase continuas o comprimento de correlação torna-se muito grande, sendo infinito exatamente no ponto critico (T_c). Neste caso, a rede que suporta o modelo de mecânica estatistica, pode ser vista como a discretização do espaço-tempo de uma teoria de campos. Tal teoria de campos descreverá as flutuações do modelo estatistico, cujas excitações são massivas ao redor de T_c e exatamente sem massa em T_c. Como exemplo de tal conexão entre mecânica estatistica e teoria de campos mencionamos [2] que o modelo de 8-vértices [3] (não critico) e o modelo de 6 vértices (critico) relacionam-se com o modelo de Thirring massivo e sem massa [4], respectivamente.

Por outro lado no principio do século [5] foi observado que as equações de Maxwell no vácuo eram invariantes por um conjunto de transformações mais gerais que as transformações de escala. Tais transformações ficaram conhecidas pelo nome de transformações conformes (invariância conforme) [6] e desde então sucederam-se diversas tentativas para incorporar a invariância conforme num contexto mais geral de uma teoria quântica de campos [7].

A invariância conforme é, grosseiramente falando, uma generalização da transformação de escala, onde o comprimento da escala que estamos transformando depende continuamente da posição

(local). Mais precisamente acredita-se que um sistema e invariante conforme se satisfaz as seguintes hipóteses: interação de curto alcance, invariância frente a translações, rotações e dilatações.

A primeira pessoa a aplicar as idéias da invariância conforme no estudo dos fenômenos críticos foi POLYAKOV em 1970 [8]. Na época as novas informações advindas de tal invariância foram pouco animadoras, restringindo-se quase que somente à forma assintótica da função de correlação de três pontos, em qualquer dimensão. Isto decorre do fato do grupo conforme ser finito para um número arbitrário de dimensões ($d \neq 2$). No entanto, em duas dimensões a situação muda drasticamente. Neste caso, o grupo conforme é isomorfo ao grupo das funções analíticas e portanto infinito. A álgebra correspondente deste grupo foi estudada anteriormente no contexto das partículas elementares (teoria das cordas) e ficou conhecida como álgebra de VIRASORO [9], e suas representações foram subsequentemente estudados pelo matemático V. KAC e colaboradores [10].

Contudo, mais recentemente, BELAVIN, POLYAKOV e ZAMOLODCHIKOV [11] mostraram que cada operador (operadores primários) da teoria de campos associada a um dado modelo de mecânica estatística bidimensional, no seu ponto crítico, está relacionado em uma representação da álgebra de VIRASORO. A álgebra de VIRASORO é caracterizada por um parâmetro c denominado carga central ou anomalia conforme, cujo geradores L_m ($m \in Z$) satisfazem:

$$\left[L_m, L_n\right] = (m-n)\, L_{m+n} + \frac{1}{12}\, c\, m\left(n^2 - 1\right)\delta_{m,-n} \qquad \textbf{(I.1)}$$

Em particular FREIDAN, QIU e SHENKER [12] mostraram que quando a carga central, e a teoria é unitária, (o que se traduz em

mecânica estatística numa matriz de transferência hermitiana) as possíveis classes de universalidade são quantizadas pela série

$$c = 1 - \frac{6}{(m+1)m}, \quad m = 3, 4 \ldots \qquad \textbf{(I.2)}$$

que é denominada de série minimal. As dimensões dos operadores primários da teoria são relacionadas com as representações irredutíveis da álgebra de Virasoro, obtidas pela fórmula de KAC:

$$\Delta_{p,q} = \frac{[p(m+1) - qm]^2 - 1}{4m(m+1)}, \quad 1 \leqslant q < p \leqslant m-1 \qquad \textbf{(I.3)}$$

Os primeiros elementos da série minimal (I.2) correspondem aos modelos de ISING ($m = 3$), Ising tricrítico ($m = 4$), Potts-3 (três estados) ($m = 5$), etc. No limite $m \to \infty$ temos $c = 1$, a álgebra não é mais finita e estas teorias conforme descrevem modelos com expoentes críticos variáveis como os modelos de ASHKIN-TELLER [3], 6-vértices [3], XXZ [3]. e ising tripleto [13]. Quando $c \geqslant 1$, o número de operadores primários é infinito e apenas a unitariedade não é suficiente para determinar relações entre c e $\Delta_{p,q}$ como nas equações (I.2) (I.3). Para que isto ocorra é necessário que os operadores da teoria satisfaçam uma álgebra maior que a de VIRASORO, em que um número infinito de operadores primários das álgebras de VIRASORO se agrupem formando um novo operador primário de uma álgebra maior. Como exemplo de tais teorias citamos o caso dos modelos supersimétricos [14] onde

$$c = \frac{3}{2}\left(1 - \frac{8}{m(m+2)}\right); \quad m = 3, 4 \ldots \qquad \textbf{(I.4)}$$

modelos satisfazendo a álgebra parafermiônica Z(N)-FATEEV-ZAMOLODCHIKOV [15] onde

$$c = \frac{2(N-1)}{N+2} \quad , N = 2, 3 \ldots \tag{I.5}$$

ou a álgebra de KAC-MODY [16] onde c depende da carga Topológica K e do grupo semi-simples de simetria (g) associado. Neste caso os geradores são indicados por $L_n^{\hat{g}}$ e para o grupo SU(2)

$$c = \frac{3k}{k+2} \quad , k = 1, 2 \ldots \tag{I.6}$$

No entanto, recentemente [17] mostrou-se que é possível construir um conjunto de teorias unitárias mais gerais usando a construção de GODDARD, KENT e OLIVER (GKO) [18]. Dado uma álgebra $\hat{g}$ e uma subálgebra $\hat{h}$ GKO mostraram que os operadores $k_n = L_n^{\hat{g}} - L_n^{\hat{h}}$ geram uma nova álgebra de VIRASORO com carga central $k = C^{\hat{g}} - C^{\hat{h}}$. Quando $g = SU(2)_k \otimes SU(2)_{m-2}$ (onde $SU(2)_\ell$ é o nível ℓ da representação da álgebra SU(2)) e $\hat{h}$ é subálgebra diagonal $SU(2)_{k+m-2}$ a carga central [17] é dado por:

$$c = \frac{3k}{k+2}\left(1 - \frac{2(k+2)}{m(m+k)}\right), \; m = 3, 4; \; k = 1, 2 \ldots \tag{I.7}$$

e as dimensões dos operadores [17] são dadas por:

$$\Delta_{p,q} = \frac{[p(m+k) - qm]^2 - k^2}{4km(m+k)}, \; 1 \leq p \leq m-1 \; ; \; 1 \leq q \leq m+k-1 \tag{I.8}$$

Para $k = 1$ e $k = 2$ obtemos as séries mínimais e supersimétricas, enquanto que para $k > 2$ temos uma série mais geral, todas acumulando quando $m \to \infty$, na carga central de uma álgebra KAC-MODY SU(2) com $c = \frac{3k}{k+2}$.

Além das relações anteriores a invariância conforme do modelo de mecânica estatística, no seu ponto crítico, fornece relações bastante importantes entre as dimensões dos operadores e as amplitudes das lacunas de massa da matriz de transferência ou Hamiltoniana do sistema na geometria de tiras finitas de tamanho L. Mais precisamente para cada operador primário ϕ, com dimensão X_ϕ e spin s_ϕ, corresponde no ponto crítico do modelo estatístico (na geometria de tiras de tamanho L, com condições de contorno periódicas) a um conjunto de auto-estados da Hamiltoniana quântica associada. As energias e os momentos de tais estados são dados por [6,19]

$$E_{m,m'} - E_0(L) \cong \frac{2\pi}{L}\,\xi\left(X_\phi + m + m'\right) \; ; \; m = m' = 0, 1, 2 \ldots \qquad \textbf{(I.9)}$$

$$P_{m,m'} = \frac{2\pi}{L}\left(S_\phi + m - m'\right) \; ; \; m = m' = 0, 1, 2 \ldots \qquad \textbf{(I.10)}$$

respectivamente, quando $L \to \infty$. $E_0(L)$ é a energia do estado fundamental da Hamiltoniana de Largura L e ξ é uma constante que depende do modelo em estudo. Esta constante é introduzida para tornar as equações de movimento invariantes conformes e usualmente é determinada numericamente [20].

A invariância conforme também nos informa que a correção dominante, para L grande, do estado fundamental $E_0(L)$, do sistema finito, é governada pela anomalia conforme c, isto é [21,22]

$$E_0 - e_\infty = \xi\,\frac{\pi c}{L^2} + 0\left(L^{-2}\right) \qquad \textbf{(I.11)}$$

onde e_∞ é a energia do estado fundamental, por número de sítios da rede, no limite termodinâmico ($L \to \infty$).

Estas últimas relações entre os sistemas infinitos e finitos fornecem uma técnica bastante eficiente de se estudar a criticalidade dos sistemas bidimensionais, onde a hipótese de invariância conforme seja válida. Infelizmente o espectro dos sistemas finitos, pelos métodos tradicionais numéricos (método de LANCZOS ou suas variações [23]), só podem ser obtidos para sistemas de tamanho $L = 10 - 20$, dependendo do modelo. No entanto recentemente mostrou-se [24,25] que para modelos possíveis de se formular um "Bethe ansatz" o espectro da Hamiltoniana associada pode ser obtido para sistemas com $L \sim 100 - 1000$, o que permite um estudo numérico bastante preciso destes modelos.

Esta tese tem como objetivo estudar o conjunto de Hamiltonianas quânticas antiferromagnéticas em 1-dimensão que descrevem a dinâmica de partículas com spin s arbitrário ($s = 1, 3/2, 2, \ldots$). Estas Hamiltonianas são generalizações do modelo anisotrópico (isotrópico) de Heisenberg ou modelo XXZ - $S = 1/2$(XXX -$S = 1/2$). Tais modelos são exatamente solúveis pelo método do Bethe ansatz algébrico [26]. Os capítulos III e IV compõem a parte original deste trabalho [27,32], que está organizado da seguinte maneira: no Capítulo II descrevemos o modelo e suas propriedades no limite termodinâmico; no Capítulo III estudamos os modelos de Heisenberg isotrópicos com spin - $s = 1, 3/2$ e 2 (XXX - s). Determinamos, neste capítulo a carga central c e as dimensões dos operadores da teoria. Nossos resultados mostram que os modelos σ-não linear WESS-ZUMINO-WITTEN-NOVIKOV [33], com carga topológica $k = 2s$, são as teorias de campos conforme que descrevem a criticalidade dos modelos XXX-s de mecânica estatística com spin-s arbitrário.

No Capítulo IV analisamos os modelos de Heisenberg anisotrópicos com spin-s = 1 e 3/2 (XXZ-S). No caso de condições periódicas de contorno a relação (I.11) indica que a carga central da

teoria é dada por $c = \frac{3s}{s+1}$ independe da anisotropia. O conteúdo de operadores da teoria, tanto para redes pares como ímpares, foi determinado e os expoentes críticos do modelo variam continuamente com a anisotropia, como no caso do modelo de 8-vértices [3]. O conteúdo de operadores da teoria indica que a teoria de campos conforme que governa estes modelos, na criticalidade, podem ser descrita por operadores compostos pelo produto direto de um campo Gaussiano por um campo com simetria Z(2S)-FATEEV-ZAMOLODCHIKOV.

Sugerimos ainda que estes modelos, com condições especiais de contorno, são realizações físicas, das teorias invariantes conformes recentemente propostas [17] (eqs. I.7, I.8). Finalmente analisamos a topologia dos zeros das equações do Bethe ansatz associada a estes modelos bem como identificamos alguns operadores responsáveis pelas correções de escala devido ao tamanho finito da rede.

O Capítulo V fica reservado para as conclusões, comentários e perspectivas futuras deste trabalho.

Capítulo II

II.a. Considerações Gerais

A técnica do Bethe ansatz foi usada pela primeira vez por H. A. BETHE [34] para resolver exatamente o espectro do modelo de Heisenberg no limite termodinâmico. Desde então tal técnica foi desenvolvida, surgindo outros métodos, tais como o "nested Bethe ansatz" [35] e o método do espalhamento inverso quântico [26]. Estas técnicas foram usadas para resolver exatamente vários modelos de teoria de campos, matéria condensada e mecânica estatística [36].

A integrabilidade de vários modelos de mecânica estatística e teoria de campos está associada à álgebra de YANG-BAXTER-ZAMOLODCHIKOV-FADDEEV (YBZF) [37]. Esta álgebra é uma ferramenta essencial na construção dos espectros destes modelos [26]. Em mecânica estatística uma das realizações físicas da álgebra YBZF são os modelos de vértices [3] em duas dimensões. Para entendermos a afirmação acima vamos primeiramente definir o modelo de vértice em uma rede retangular M X N. Cada vértice é formado pelo cruzamento de uma linha vertical com uma linha horizontal (ver Figura III.1). À linha horizontal (vertical) associamos o par de variáveis a e b (α e β) que podem assumir um número h(v) de estados. Podemos associar a cada configuração de vértice o peso estatístico $\left(t_{ab}\right)_{\alpha}^{\beta}$, como mostra a Figura II.1.

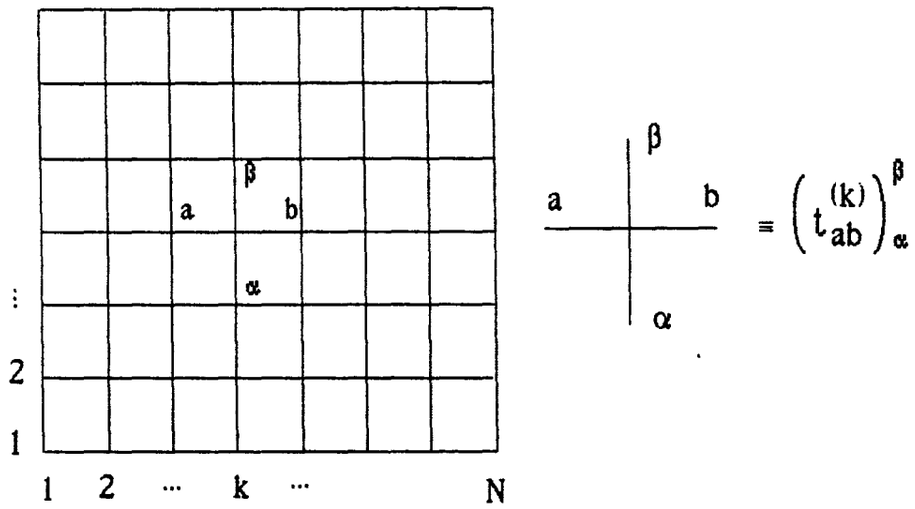

Figura II.1. Representação do peso $\left(t^{(k)}_{ab}\right)^{\beta}_{\alpha}$, $1 < k < N$. N e M são os números de linhas verticais e horizontais respectivamente.

Para representarmos, de uma maneira mais compacta, a matriz de transferência ($\tau(\theta)$ deste modelo de vértices, em termos de seus pesos estatísticos, é conveniente introduzirmos a definição da matriz de monodromia. Os elementos T_{ab} ($1 < a$, $b < h$) da matriz de monodromia $T(\theta)$ são dados por

$$T_{ab}(\theta) = \sum_{a_1 \ldots a_{N-1}} t^{(N)}_{a,a_{n-1}}(\theta) \otimes t^{(N-1)}_{a_{n-1},a_{n-2}}(\theta) \otimes \ldots \otimes t^{(2)}_{a_2,a_1}(\theta) \otimes t^{(1)}_{a_2,a_1}(\theta) \quad \textbf{(II.1)}$$

onde $t^{(k)}_{ab}(\theta)$ é uma matriz definida no espaço formado pelos estados de linha vertical k (espaço quântico $v^{(k)}$), cujos elementos são os pesos estatísticos $\left(t^{(k)}_{ab}\right)^{\beta}_{\alpha}$ ($1 < a$, $b < v$). Portanto T_{ab} é um operador definido no espaço $V = \prod_{k=1}^{N} \otimes v^{k}$, enquanto que $T(\theta)$ é uma matriz $h \times h$ no espaço formado pelos estados horizontais ($1 < a$, $b < h$), muitas vezes denominado de espaço auxiliar (H).

A matriz de transferência ($t(\theta)$), neste caso, se relaciona com a matriz de monodromia por:

$$\tau(\theta) = \Gamma_{\Gamma_H}\left(T(\theta)\right) \qquad \textbf{(II.2)}$$

onde Γ_{Γ_H} = traço no espaço H.

Por outro lado, a relação que define a álgebra de YBZF [37] é a existência de uma matriz $R(\theta, \theta')$ definida no espaço $H \times H$, satisfazendo:

$$R(\theta,\theta')\ T(\theta) \otimes T(\theta') = T(\theta') \otimes T(\theta)\ R(\theta,\theta') \qquad \textbf{(II.3)}$$

Para notarmos a conexão entre a álgebra de YBZF e a integrabilidade, reescrevemos a equação (II.3) como:

$$T(\theta) \otimes T(\theta') = R^{-1}(\theta,\theta')\ T(\theta) \otimes T(\theta')\ R(\theta,\theta') \qquad \textbf{(II.4)}$$

e tomando o traço no espaço $H \times H$, obtemos

$$\left[\tau(\theta)\ ,\ \tau(\theta')\right] = 0 \qquad \textbf{(II.5)}$$

Agora, expandindo $\tau(\theta)$ na série:

$$\tau(\theta) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n\ \theta^n \qquad \textbf{(II.6)}$$

temos de (II.5) que

$$\left[c_n\ ,\ c_{n'}\right] = 0\ ,\ \forall_{n,n'}$$

o que mostra que a teoria possui um número infinito de comutadores nulos gerados pela matriz de transferência $\tau(\theta)$ (infinitas cargas conservadas).

Como última observação, salientamos que quando os espaços H e v são idênticos (h = v) podemos associar um modelo de spin a este modelo de vértice [3], e em geral e Hamiltoniana quântica unidimensional associada pode ser obtida de: [38]

$$H = -\frac{d}{d\theta}\left(\ln t(\theta)\right)_{\theta=0} \qquad \text{(II.7)}$$

II.b. O modelo e sua solução no limite termodinâmico

Como vimos na seção (II.a), modelos de vértices em mecânica estatística são obtidos associando-se a cada sítio da rede um vértice, onde cada ligação assume, por exemplo, $(2s+1)$ valores $(-s, -s+1, \ldots, s-1, s)$ sendo $s = 1/2, 1, 3/2, 2 \ldots$ (veja Figura II.1). Uma das realizações físicas da álgebra YBZF, com simetria U(1), é obtida pelos modelos de vértices [39,40] que satisfazem à regra de seleção $a + \alpha = \beta + b$, onde a, b e α, b são as ligações horizontais e verticais, conforme mostra a Figura II.1.

O caso $s = 1/2$ é o conhecido modelo de 6-vértices enquanto que para $s = 1$ temos um modelo de 19-vértices. Os diagramas dos vértices e seus respectivos pesos estatísticos no caso dos $s = 1/2$ e $s = 1$ são mostrados nas Figuras (II.2) e (II.3), respectivamente.

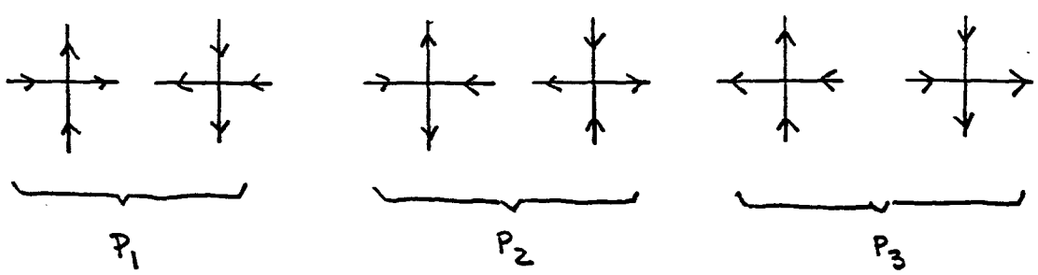

Figura II.2. Caso $S = 1/2$; P_1, P_2, P_3 correspondem aos pesos estatísticos de cada vértice, e as flexas $(>, <)$ correspondem a $(1/2, -1/2)$ para a configuração (a, α) e $(-1/2, +1/2)$ para a configuração (β, b)

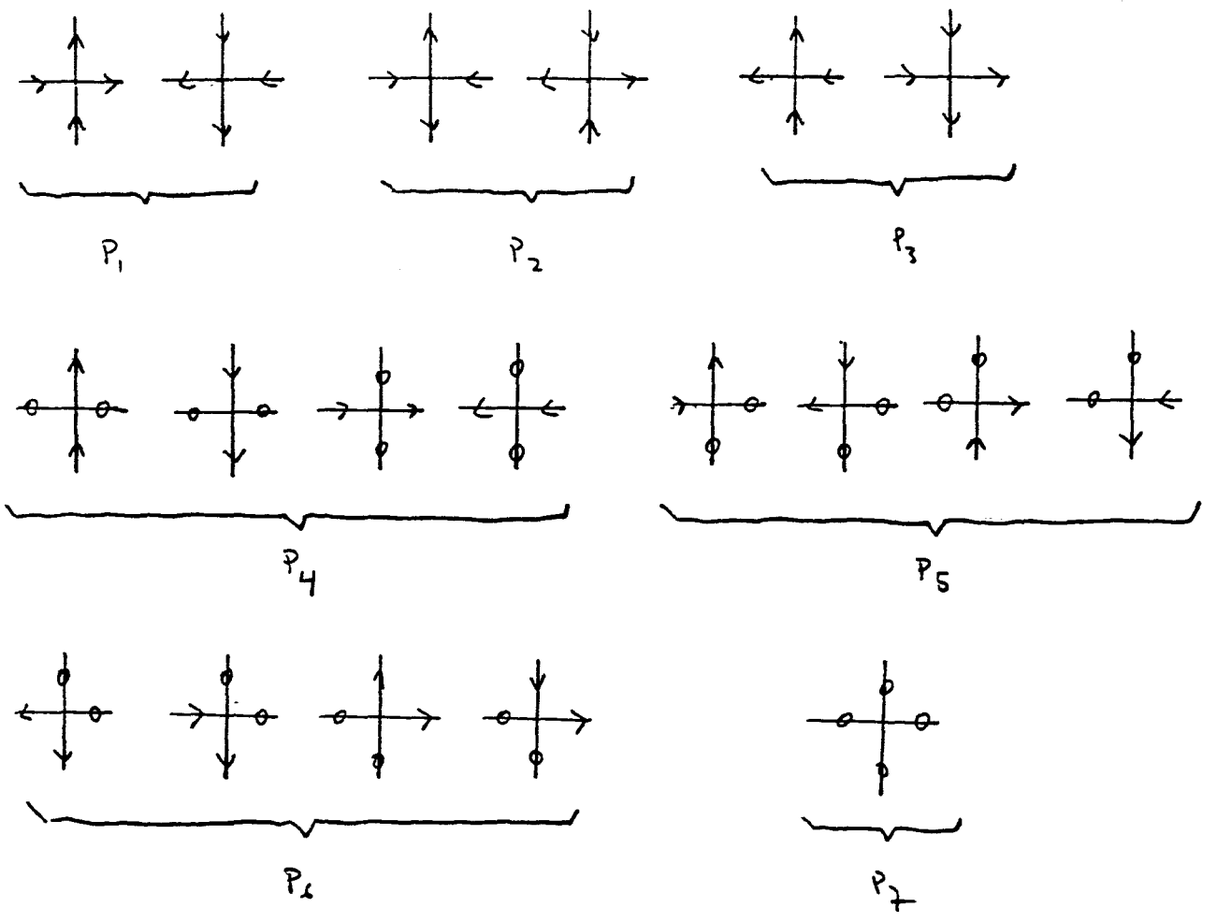

Figura II.3. Caso S = 1 , P_1 - P_7 correspondem aos pesos estatísticos dos vértices. As flexas (> , <) tem o mesmo significado da Figura II.2 e o símbolo 0 corresponde ao valor nulo de cada ligação do vértice

A versão Hamiltoniana destes modelos de vértices são generalizações do modelo anisotrópico de Heisenberg para spin-s arbitrário (XXZ-S). Os possíveis valores da variável s (s = 1/2 , 1 , 3/2 ...) estão associados às representações do grupo SU(2) que são soluções da álgebra de YBZF (eq. II.3). No caso do S = 1/2 , temos o tradicional modelo XXZ [3] cuja Hamiltoniana é dada por:

$$H_{1/2} = -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{L}\left(\sigma_i^x\,\sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y\,\sigma_{i+1}^y - \cos\gamma\,\sigma_i^z\,\sigma_{i+1}^z\right) \qquad \textbf{(II.8)}$$

onde σ^X, σ^Y, σ^Z são as matrizes de Pauli, γ é a anisotropia, e L é o número de sítios da rede; enquanto que para o s = 1 temos: [39]

$$H_1 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{L} \sigma_i - \sigma_i^2 - 2\left(\cos\gamma - 1\right)\left(\sigma_i^{\perp}\ \sigma_i^{z} + \sigma_i^{z}\sigma_i^{\perp}\right)$$

$$- 2\,\mathrm{sen}^2(\gamma)\left(\sigma_i^{z} - \left(\sigma_i^{z}\right)^2 + 2\left(S_i^{z}\right)^2 - 2\right) \qquad \textbf{(II.9)}$$

onde $\sigma_i = \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = \sigma_i^{\perp} + \sigma_i^{z}$, $\sigma_i^{z} = S_i^{z}\ S_{i+1}^{z}$. Aqui s^X , s^Y , s^Z são matrizes (3 x 3) de spin 1.

No caso geral $s > 1$ este modelo é descrito por uma Hamiltoniana complicada que pode ser escrita como um polinômio de grau 2s, envolvendo matrizes de spin-s e o parâmetro de anisotropia γ.

A diagonalização do modelo XXZ-S é baseada no método do espalhamento inverso quântico [26] o qual é uma formulação algébrica do Bethe ansatz. As energias e os momentos do espectro são parametrizados em termos de um conjunto de raízes $\{\lambda_j\}$ que são soluções de um sistema de equações algébricas, denominadas equações do Bethe ansatz (EBA).

As Hamiltonianas quânticas destes modelos XXZ-S comutam com o operador $\hat{S}^Z = \sum_{i=1}^{L} S_i^Z$ (simetria U(1)). Consequentemente, na base em que S^Z é diagonal redes com L par (ímpar) tem o seu espaço de Hibelt associado separado em 2 LS +1 (2LS) setores disjuntos classificados pelos autovalores de S^Z, ou seja, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm LS$ ($n = \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots \pm LS$). Devido à simetria de inversão dos spins ($s_i \rightarrow -s_i$) os setores com $n = k$ e $n = -k$ são degenerados e podemos nos restringir a setores com $n > 0$. As equações do Bethe ansatz (EBA) para um dado setor n , assumindo condições periódicas de contorno, são dadas por: [40]

$$\left[\frac{\operatorname{sen} h\,\gamma\left(\lambda_j - i\,s\right)}{\operatorname{sen} h\,\gamma\left(\lambda_j + i\,s\right)}\right]^L = \prod_{\substack{k=1\\ k\neq j}}^{SL-n} \frac{\operatorname{sen} h\,\gamma\left(\lambda_j - \lambda_k - i\right)}{\operatorname{sen} h\,\gamma\left(\lambda_j - \lambda_k + i\right)}\,;\; j = 1, \ldots SL-n \qquad \textbf{(II.10)}$$

A energia e o momentum dos estados são dados em termos das raízes dos EBA por: [40]

$$E = \frac{\operatorname{sen}^2(2\,s\,\gamma)}{2\,s} \sum_{j=1}^{SL-n} \frac{1}{\cos\left(2\,s\,\gamma\right) - \cos h\left(2\,\lambda_j\right)} \qquad \textbf{(II.11)}$$

e

$$P = \sum_{j=1}^{SL-n} 2\,\operatorname{arc\,tg}\left(\cot h\,(s\,\gamma)\,\tan\lambda_j\right)\,(\operatorname{mod} 2\,\pi) \qquad \textbf{(II.12)}$$

respectivamente.

Em geral, o conjunto de soluções $\{\lambda_j\}$ das equações (II.10) são complexas, e a maneira usual de se transformar este conjunto de equações complexas em reais é pela introdução da chamada "hipótese de string". Esta hipótese afirma que no limite termodinâmico ($L \to \infty$) as raízes $\{\lambda_j\}$ formam strings complexos. Cada string de comprimento m (m-string) é composto por raízes complexas dadas por:

$$\lambda_{j,k}^{m} = \lambda_j^{m} + \frac{1}{2}\,i\,\left(m + 1 - 2\,k\right),\; k = 1, 2 \ldots m \qquad \textbf{(II.13)}$$

onde λ_j^m são números reais, denominados de centros dos strings. A hipótese acima nos permite parametrizar uma configuração arbitrária de raízes, correspondente a um estado no setor n pelo número (υ_m) de strings de comprimento m , tal que $\sum_m m\,\upsilon_m = SL - n$. Mediante tal hipótese o conjunto de equações (II.10), para uma dada

configuração de strings $\{ \upsilon_m \}$ se reduz a um sistema de equações reais para os λ_j^m , $j = 1, 2, \ldots m$ dada por: [40]

$$L\, \Psi_{m,2s}\left(\lambda_j^m\right) = 2\pi\, Q_j^m + \sum_{m=1}^{+\infty} \sum_{k=1}^{\upsilon_m} \Xi_{m,m'}\left(\lambda_j^m - \lambda_k^{m'}\right) \qquad \textbf{(II.14a)}$$

onde

$$\Psi_{m,2s}(X) = \sum_{\ell=1}^{\min(m,2s)} \theta(x)_{m+2s+1-2\ell} \qquad \textbf{(II.14b)}$$

$$\Xi(x) = \begin{cases} \theta_{|m'-m|}(x) + 2\,\theta_{|m'-m|+2} + \ldots + 2\,\theta_{m'-m}(x), & m' \neq m \\ 2\,\theta(x) + \ldots + 2\,\theta_{2m-2}(x) + \theta_{2m}(x), & m' = m \end{cases} \qquad \textbf{(II.14c)}$$

com $\theta_m(x) = 2 \tanh\left(\cot\left(\frac{1}{2}\gamma m\right) \operatorname{th} x\right)$.

Os números Q_j^m são inteiros ou semi-inteiros dependendo da particular configuração $\{ \upsilon_m \}$ dos strings. Para L par o estado fundamental [40], que ocorre no setor $n = 0$, corresponde a um mar de 2s-strings $\left(\upsilon_{2s} = \frac{L}{2},\ \upsilon_m = 0 \quad m = 2s\right)$ enquanto o estado de mais baixa energia no setor n corresponde à configuração $\upsilon_{2s} = \frac{N}{2} - \left[n/2s \right] + 1$, $\upsilon_{2s - \{n/2s\}} = 1$ e $\upsilon_m = 0$, $m \neq 2s$ e $2s - \{ n/2s \}$. Aqui $\left[n/2s \right]$ e $\left\{ n/2s \right\}$ são as partes inteiras e o resto da divisão $n/2s$. Neste caso os números Q_j^m são dados por:

$$Q_j^{2s} = -\frac{1}{2}\left(\upsilon_{2s} - 1\right) + I - 1 \ ; \ I = 1, 2 \ldots, 2s$$

$$Q_j^{2s - \{n/2s\}} = 0 \qquad \textbf{(II.15)}$$

Os estados excitados dentro de um mesmo setor n, geralmente são obtidos adicionando-se ao mar de strings, estruturas especiais de zeros [30]. Este fato será comentado em mais detalhes no Capítulo IV (Seção IV.b).

A solução exata [40] do sistema de equações II.14, no limite termodinâmico, mostra que estes modelos XXZ-S não possuem massa no intervalo $0 \leq \theta \leq \pi$, $\theta = 2s\gamma$. O estado fundamental é antiferromagnético com energia por sítio ε_∞ dada por:

$$\varepsilon_\infty = -\frac{\operatorname{sen}\theta}{2s}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \, \frac{\left[\operatorname{sen h}(\pi-\theta)\omega\right]\operatorname{sen h}(\theta\omega)}{\left[\operatorname{sen h}(\pi\omega)\right]\operatorname{sen h}(\theta\omega/s)} \qquad \textbf{(II.16)}$$

e a relação de dispersão é dada por: [40]

$$\varepsilon(k) = \frac{\pi}{2\theta}\operatorname{sen}\theta\,|\operatorname{sen} k|\,,\ 0 \leq k \leq \pi \qquad \textbf{(II.17)}$$

Recentemente [42] KIRILOV E RESHETIKHIM consideraram este mesmo modelo num intervalo maior, $0 \leq \gamma \leq \pi/2$. Quando $0 \leq \gamma \leq \pi/2s$, eles reobtiveram os resultados anteriores (II.17) enquanto que para $\pi/2s < \gamma \leq \pi/2$ eles notaram que o estado fundamental é formado por vários "líquidos de Fermi", com relação de dispersão dependente do valor da anisotropia γ.

O caso isotrópico ($\gamma = 0$) destes modelos XXZ-S foram tratados anteriormente por BABUJIAN [43] e TAKHTAJAN [44], e neste caso a simetria do modelo passa de U(1) para SU(2).

No limite $\gamma \to 0$, as equações de Bethe ansatz (II.10) tornam-se

$$\left[\frac{\lambda_j - i s}{\lambda_j + i s}\right]^L = \prod_{\substack{k=1 \\ k=j}}^{SL-n} \frac{\lambda_j - \lambda_k - i}{\lambda_j - \lambda_k + i} \qquad \textbf{(II.18)}$$

enquanto que a energia (II.11) e o momento (II.12) e a relação de dispersão são dados por:

$$E = - \sum_{j}^{SL-n} \frac{s}{\lambda_j^2 + s^2} \qquad \textbf{(II.19a)}$$

$$P = - \sum_{j}^{SL-n} \operatorname{arctg}\left(\lambda_j / s\right) - \pi \ (\mathrm{mod}\ 2\pi) \qquad \textbf{(II.19b)}$$

$$\varepsilon(k) = \frac{\pi}{2} \operatorname{sen} |k \qquad \textbf{(II.19c)}$$

respectivamente.

Analogamente ao caso anisotrópico, as equações complexas (II.18) podem ser transformadas em reais, usando-se a hipótese de string (II.13). Neste caso recuperamos o resultado obtido para o caso anisotrópico (eqs. II.14), apenas redefinindo-se $\theta(x)_m = 2 \operatorname{arctg}\left(x/m\right)$.

A Hamiltoniana destes modelos isotrópicos (XXX-S) é um polinômio especial de grau (2s), cuja forma é:

$$H_s = \sum_{n=1}^{L} Q_{2s}\left(\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}\right) \qquad \textbf{(II.20a)}$$

onde

$$Q_{2s}(x) = - \sum_{\ell=0}^{2s} \sum_{k=+1}^{2s} \frac{1}{k} \prod_{\substack{j=0 \\ j=\ell}}^{2s} \frac{x - x_j}{x_\ell - x_j} \qquad \textbf{(II.20b)}$$

com

$$x_\ell = \frac{1}{2}\left[(\ell + 1) - 2s(s+1) \right] \qquad \textbf{(II.20c)}$$

Por exemplo para o spin $s = 1$ temos:

$$H_1 = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{L} \left\{ \vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} - \left(\vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} \right)^2 \right\} \qquad \textbf{(II.21)}$$

enquanto para o spin $s = 3/2$ e 2 tem-se

$$H_{3/2} = \sum_{n=1}^{L} \left\{ -\frac{3}{8} - \frac{1}{16} \vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{54} \left(\vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} \right)^2 + \frac{1}{27} \left(\vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} \right)^3 \right\} \qquad \textbf{(II.22)}$$

e

$$H_2 = \sum_{n=1}^{L} \left\{ -\frac{1}{4} - \frac{13}{48} \left(\vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} \right) + \frac{43}{864} \left(\vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} \right)^2 - \right.$$

$$\left. - \frac{5}{432} \left(\vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} \right)^3 - \frac{1}{128} \left(\vec{S}_i . \vec{S}_{i+1} \right)^4 \right\} \qquad \textbf{(II.23)}$$

II.c. Condições especiais de contorno

O modelo XXZ-S tem simetria U(1), de modo que à álgebra YBZF é invariante por esta simetria, ou seja:

$$T'(\theta) = g_k \, T(\theta) \, g_k^{-1} \, , \; g_k = e^{i\varphi_k s_k^z} \, , \; k = 1, \ldots L+1 \qquad \textbf{(II.24)}$$

satisfaz a equação (II.3), consequentemente:

$$\left[g_k \otimes g_k \, , \, R \right] = 0 \qquad \textbf{(II.25)}$$

Considerando as condições acima (II.24), o método do espalhamento inverso ainda pode ser aplicado [45], e para o caso particular onde $\phi_{L+1} = \phi$ e $\phi_k = 0$, $k = L+1$ as equações do Bethe ansatz são

$$\left[\frac{\operatorname{sen} h\gamma(\lambda_j - i s)}{\operatorname{sen} h\gamma(\lambda_j + i s)} \right]^L e^{i\varphi} = \prod_{\substack{k=1 \\ k=j}}^{SL-n} \frac{\operatorname{sen} h\gamma(\lambda_j - \lambda_k - i)}{\operatorname{sen} h\gamma(\lambda_j - \lambda_k + i)} \qquad \textbf{(II.26)}$$

e as equações para a energia e momento seguem idênticas as equações (II.11) e (II.12), respectivamente.

A modificação acima pode ser interpretada como uma rotação de um ângulo ϕ ao redor do eixo z no último spin, produzindo uma Hamiltoniana com condição de contorno dada por: [29]

$$\left(S^x_{L+1} \pm i S^y_{L+1} \right) = e^{\pm i\phi} \left(S^x_1 \pm S^y_1 \right) , \; S^z_{L+1} = S^z_1 \qquad \textbf{(II.27)}$$

Para finalizar, lembramos que as propriedades do limite termodinâmico da eq. (II.26) é idêntica às de quando $\phi = 0$. Veremos, no entanto (Capítulo IV, seção IV.e) que tais condições de contorno nos permite obter consequências físicas bastante relevantes, quando consideramos estes modelos em uma geometria finita.

Capítulo III

III.a. Introdução

Neste capítulo analisaremos o modelo de Heisenberg isotrópico com spin $s = 1, 3/2$ e 2 (XXX-S). Estes modelos XXX-S foram introduzidos simultaneamente por BABUJIAN [43] e Takhtajan [44]. Nestes trabalhos eles calcularam, além de propriedades à temperatura nula como por exemplo a energia do estado fundamental (II.19a) e algumas exitações (II.19c), o comportamento do calor específico a baixas temperaturas. Por outro lado os efeitos de tamanho finito em um sistema de mecânica estatística a duas dimensões, definido numa tira de largura L, são equivalentes aos efeitos de temperatura (T) finita na Hamiltoniana quântica unidimensional associada ($L = \beta = 1/T$). Deste fato e das equações (I.11), a anomalia conforme (c) pode ser estimada do comportamento à baixas temperaturas do calor específico da Hamiltoniana quântica associada. Usando os cálculos de calor específico dos trabalhos de BABUJIAN [43], AFFLECK [22,46] mostrou que a anomalia conforme destes modelos XXX-S é dada por:

$$c = \frac{3s}{s+1} \qquad \textbf{(III.1)}$$

Por outro lado esta carga central é a mesma que a de uma teoria conforme satisfazendo a álgebra de KAC-MOODY [16] com grupo de simetria SU(2) e um termo topológico $k = 2s$ (ver equação I.6). Uma realização desta álgebra conforme é o modelo σ-não linear WESS-ZUMINO-WITTEN-NOVIKOV [33] com simetria SU(2) e com um termo de carga K. Estes fatos bem como mapeamentos aproximados entre estes dois modelos levaram AFFLECK e HALDANE [47] conjecturar que o modelo WESS-ZUMINO-WITTEN-NOVIKOV seria a teoria de campos conforme que descreve as flutuações críticas dos modelos de spin-s arbitrário

(modelo XXX-S). AFFLECK e HALDANE [47] também mostraram que estes modelos de spin deveriam ter operadores primários cujas dimensões seriam dadas por:

$$x_j = \frac{j(j+1)}{1+s}, \quad j = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots s \qquad \textbf{(III.2)}$$

Verificaremos neste capitulo, de forma independente, estas conjecturas (eqs. III.1 e III.2) analizando o espectro do modelo XXX-S. Tal análise espectroscopica será feita mediante estudo numerico e analitico das equações do Bethe ansatz dos modelos XXX-S (eq. II.18).

Finalmente mencionamos que em trabalhos anteriores [48] tentou-se verificar estas conjecturas, para o caso particular do modelo XXX-S = 1. No entanto nestes trabalhos [48] os autores só conseguem analisar o espectro para redes de até L = 12 sítios. Devido ao tamanho da rede ser pequeno e ao surgimento de correções logarítmicas (seção III.b) os resultados por eles encontrados foram pouco convincentes. Contudo, a existência de um Bethe ansatz para estes modelos XXX-S permitiu-nos calcular o espectro destes modelos para tamanhos de rede (L) bem maiores. Analisando este espectro para os casos de spin 1 , 3/2 e 2 calculamos a carga central e várias dimensões de operadores, com boa precisão, e isto permitiu-nos verificar a validade das conjecturas III.1 e III.2, com bastante confiança.

III.b. Correções (1/L) e a hipótese de string

No Capítulo II vimos que a hipótese de string (II.13) permitia transformar as equações do Bethe ansatz (II.10) em equações reais (II.14) para os centros dos strings. Como esta hipótese é esperada ser válida apenas no Limite termodinâmico. ($L \to \infty$), não esperamos que as correções-finitas para o espectro, obtidas usando tal

hipótese, sejam corretas. Apesar destas correções não serem quantitativamente corretas elas puderam nos dar uma idéia do comportamento das correções finitas para o espectro. Estas correções, dentro da hipótese de string, podem ser calculadas usando um método analítico introduzido por de VEGA, WOYNOROVICH [49] e HAMER [50] e posteriormente refinado por WOYNOROVICH e ECKLE [51]. Estes cálculos, embora não triviais são longos e estão explicados no Apêndice A. Da equação (A.28) a energia do estado fundamental E_0^{st}, usando-se a hipótese de string, comporta-se quando $L \to \infty$ como:

$$E_0^{st} - e_\infty = -\frac{\pi^2}{12 L^2} + \frac{a}{L^2 (\ln L)^3} + \left(\frac{\ln(\ln L)}{L^2 (\ln L)^4} \right) \qquad \textbf{(III.3a)}$$

enquanto que da equação (A.29), a diferença entre a energia do estado de mais baixa energia de um dado setor $n\,(n = 1, 2, \ldots)$ $\left(E_n^{st}\right)$ e o estado fundamental $\left(E_0^{st}\right)$ comporta-se quando $L \to \infty$, como:

$$\frac{E_r^{st}}{L} - \frac{E_0^{st}}{L} = \frac{\pi n^2}{4 s L^2} + \frac{b}{L^2 \ln L} + 0\left(\frac{\ln(\ln L)}{L^2 (\ln L)^2} \right) \qquad \textbf{(III.3b)}$$

onde os parâmetros a e b dependem dos valores do spin s e do setor n.

Por outro lado usando o valor $\xi = \pi/2$ obtido da relação de dispersão (II.19c) nas relações (I.9) e (I.11) e comparando-as com as equações (III.3), obtemos $c = 1$ para todos os valores do spin s e $x_n = \frac{n^2}{4s}$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ Estes resultados como já era esperado, estão em desacordo com as conjecturas (III.1) e (III.2) para $s > 1/2$, porque a hipótese de string nestes casos é válida apenas no limite $L \to \infty$. No caso $s = 1/2$ as equações (III.3) dão os valores corretos $c = 1$, $X_1 = 1/2$, pois neste caso, os estados E_n^{st} consistem de strings

reais (1-string) e a hipótese de string é correta mesmo para L finito. Embora as equações (III.3) conduzam os resultados incorretos, esperamos que as correções logarítmicas previstas nas equações (III.3) devem estar presentes no cálculo correto das correções-finitas. Tais correções deverão prejudicar as estimativas da anomalia conforme e especialmente das dimensões dos operadores pois neste caso estas serão mais evidentes. Estas correções logarítmicas são conhecidas exatamente para o modelo de Heisenberg, com $s = 1/2$ [51, 24, 52] e a sua presença no modelo XXX-S explica as estimativas ruins encontradas anteriormente [48] para o expoente crítico no spin $s = 1$. Como no modelo de Heisenberg, esperamos que estas correções apareçam pelo fato do operador responsável pelas correções de escala, devido ao tamanho finito da rede, ser um operador marginal ($d = 2$).

III.c. Solução Numérica das equações de Bethe ansatz

Com o objetivo de obtermos as correções devido ao tamanho finito da rede, calculamos os estados de menor energia em cada setor n ($n = 0, 1, 2, \ldots$) destes modelos com spin arbitrário, resolvendo numericamente as equações originais complexas (II.18) do Bethe ansatz para spin $s = 1, 3/2$ e 2. Resolvemos estas equações usando o método de Newton. Primeiramente resolvemos as equações reais (II.14) (com $\theta(x)_m = 2 \operatorname{artg}(x/m)$) provenientes do uso da hipótese de string e em seguida usamos esta solução como tentativa inicial para resolver o sistema de equações complexas (II.18). Na Tabela (III.1) mostramos as raízes complexas para o estado fundamental com $L = 16$ para o spin 2, também apresentamos nesta tabela os zeros da equação (II.14) (centros do string). Na Tabela (III.2) e (III.3) mostramos estas raízes para estados de energia mais baixo do setor $n = 1$ do spin $s = 3/2$ com $L = 16$ e 20

respectivamente. Para certificarmos de que as soluções encontradas numericamente correspondem realmente aos estados de energia mais baixa em um dado setor n , diagonalizamos a Hamiltoniana (II.20) diretamente para redes até tamanho L ~ 10 -12 e comparamos estas energias com as obtidas pelas soluções das equações do Bethe ansatz (II.18).

Tabela III.1. Raízes complexas $\lambda_j = \lambda_j^R + i\,\lambda_j^I$ (j = 1 - 8) do sistema (II.18) correspondente no estado fundamental do spin s = 2 com L = 16. As outras raízes que não são mostradas nesta tabela são obtidas destas pela combinação $\pm\lambda_j^R \pm\lambda_j^I$. As raízes $\pm\lambda_j^{2s}$ são as raízes das equações (II.14) (com $\theta(x)_m = 2\,\mathrm{artg}\,(x/m)$).

j	λ_j^R	λ_j^I	λ_j^{2S}
1	0.790764 41	0.525126 70	0.769265 10
2	0.770641 99	1.584745 20	0.384626 65
3	0.387753 87	0.506240 73	0.201040 90
4	0.386237 01	1.522850 69	0.063339 91
5	0.202074 33	0.503939 40	
6	0.201633 96	1.514538 90	
7	0.063610 60	0.503283 39	
8	0.063499 77	1.512146 86	

Tabela III.2. Raízes complexas $\lambda_j = \lambda_j^R + i\,\lambda_j^I$ (j = 1 - 7) do sistema (II.18) correspondente ao estado com energia mais baixa no setor n = 1 do spin s = 3/2 com L = 16. Há uma raiz na origem ($\lambda = 0$) e as outras raízes não mostradas nesta tabela são obtidas destas tomando o negativo (complexa conjugado) das raízes reais (complexas). As cinco raízes 0 , $\pm\lambda_7^R \pm i\,\lambda_7^I$ nos dão uma estrutura ($L \to \infty$) tipo 3-string e um defeito $\lambda\pm$ = ($\pm$ i). As raízes $\pm\lambda_j^{2s}$ e 0 correspondem a solução de (II.18) (com $\theta(x)_m$ - 2 artg (x/n)).

j	λ_j^R	λ_j^I	λ_j^{2S}
1	0.594225 42	0.930295 54	0.574727 80
2	0.528275 24	0	0.302851 83
3	0.343764 11	0.954389 34	0.136881 41
4	0.285664 06	0	0
5	0.186056 05	0.964783 93	
6	0.130235 32	0	
7	0.059296 25	0.968820 10	

Por outro lado, notamos que, para certos valores do setor n e do spin s a solução de string não é um bom dado inicial na solução da equação (II.18). Por exemplo isto ocorre no setor n - 1 do spin s - 3/2. Se compararmos neste caso, as raízes complexas de L - 16 com L - 20 , dadas nas tabelas (III.2) e (III.3) respectivamente, vemos que quando L aumenta ao invés de duas das raízes complexas convergirem para (i/2 , - i/2) , (2-string), de acordo com a hipótese de string elas preferem formar um defeito (i , -i). Isto também

ocorre no setor $n = 4$ do spin $s = 3/2$ e nos setores $n = 1$ e 5 do spin $s = 2$. Consequentemente a hipótese de string para alguns estados exitados não é exata mesmo quando $L \to \infty$. Considerações mais gerais sobre estes defeitos serão dadas no capítulo IV, (seção IV.e), onde também incluiremos uma anisotropia no modelo.

Tabela III.3. O mesmo que a Tabela (III.2) para $L = 20$. As cinco raízes 0, $\pm \lambda_7^R \pm i\, \lambda_7^I$ tendem, quando $L \to \infty$, a uma exitação do tipo 3-string e a um defeito $(i, -i)$.

j	λ_j^R	λ_j^I	λ_j^{2S}
1	0.667056 87	0.933472 57	0.651553 01
2	0.601955 63	0	0.383961 60
3	0.418407 45	0.958863 55	0.227289 19
4	0.363864 19	0	0.107066 40
5	0.266046 74	0.970074 61	
6	0.217424 67	0	
7	0.149512 96	0.975284 32	
8	0.102842 26	0	
9	0.048364 74	0.977408 48	

Se modificarmos a hipótese de string (II.13) de modo a incluir os defeitos mencionados acima, obtemos um novo conjunto de equações, diferente de (II.14), mas no limite termodinâmico a mesma relação de dispersão, dada pela equação (II.19c) é obtida. Por exemplo no caso do setor $n = 1$ e spin s arbitrário, estas novas equações teriam a forma:

$$L\,\Psi_{2s,2s}(\lambda_j) = 2\pi\, Q_j^{2s} + \Xi^{D}_{2s,2s-1}(\lambda_j - \lambda_D) + \sum_{k=j}^{L/2-1} \Xi_{2s,2s}(\lambda_i - \lambda_k)$$

(III.4a)

$$L\,\Psi_{2s,2s-1}(\lambda_D) - \sum_{j=1}^{L/2-1} \Xi^{D}_{2s,2s-1}(\lambda_D - \lambda_j)$$

onde $\Psi_{2s,2s}(x)$ e $\Xi_{2s,2s}(x)$ e Q_j^{2s} são dados como nas equações (II.14b), (II.14c) e (II.15) respectivamente.

$\Psi^{D}_{2s,2s-1}(x)$ e $\Xi^{D}_{2s,2s-1}(x)$ são definidos por:

$$\Psi^{D}_{2s,2s-1}(x) = \theta_{4s-1}(x) + \theta_{4s-4} + \theta_{4s-6} + \dots + \theta_4 + \theta_1 \qquad \textbf{(III.4b)}$$

$$\Xi^{D}_{2s,2s-1}(x) = \theta_{4s} + \theta_2 + \theta_{4s-2} + \theta_4 + \dots + \theta_{2s+3} + \theta_{2s-1} + \theta_{2(2s-1)} +$$

$$+ \theta_{2(2s-2)} + \theta_2 + \dots + \theta_{2s+1} + \theta_{2s-3} + \delta_{2s,k}\left(\theta_{2s+1} + \theta_{2s-1}\right) \qquad \textbf{(III.4c)}$$

onde k é um índice e $\theta(x)_m = 2\,\mathrm{arctg}\,(x/m)$.

Calculando analiticamente as correções finitas como no Apêndice A, incluindo-se estes defeitos, encontramos que as correções em $O(1/L^2)$ são as mesmas que as das equações (III.3), mas as correções logarítmicas são diferentes. Nestes casos usamos como zeros iniciais as soluções das equações (III.4), onde estes defeitos são levados em conta.

III.d. Resultados

Neste seção apresentaremos os principais resultados numéricos para a anomalia conforme e os expoentes críticos dos modelos XXX-S.

III.d.1. Anomalia conforme

A anomalia conforme pode ser calculada, do limite de L grande, da sequência:

$$C_L = -\left(E_0 - e_\infty L\right) \frac{L^2}{\pi^2} \qquad \text{(III.5)}$$

obtida da relação (I.11) com $\xi = \pi/2$. Na equação (III.5) E_0 é a energia do estado fundamental e e_∞ é a energia por sítio do estado fundamental no limite $L \to \infty$.

Nas tabelas (III.4(a) - (c)) mostramos para o spin $s = 1$ (L até 84), $s = 3/2$ (L até 80) e $s = 2$ (L até 64) estas sequências para a energia E_0 (obtida resolvendo as equações complexas (II.18)) e E_0^{st} (obtida resolvendo as equações para o centro de string II.14). Mostramos também nestas tabelas os resultados extrapolados e os conjecturados. As extrapolações são feitas usando o método dos aproximantes de Van der Broeck e Shwartz [53] (VBS aproximants). No procedimento de extrapolação introduzimos um pequeno parâmetro $\underline{e}$ com a finalidade de medir a estabilidade da sequência extrapolada [54]. Quanto mais estável for a região dos extrapolantes, devido à variação do parâmetro $\underline{e}$, mais confiável será o resultado. Aqui, e ao longo desta tese todos os resultados extrapolados usarão a técnica da

extrapolação discutida acima, que será indicada daqui para frente por VBS.

Tabela III.4. Sequências para a extrapolação da carga central para (a) spin s = 1, (b) spin s = 3/2 e (c) spin s = 2. E_0^{st} e E_0 são as energias do estado fundamental obtidas usando-se ou não a hipótese de string, respectivamente.

(a)

L	$-E_o/L$	$-E_o^{st}/L$	$-(E_o-e_\infty L)12L/\ ^2$	$-(E_o^{st}-e_\infty L)12L/\pi^2$
8	1.020 086	1.013 350	1.562 956	1.038 861
20	1.003 122	1.002 078	1.518 365	1.010 403
36	1.000 958	1.000 638	1.510 172	1.005 483
52	1.000 459	1.000 305	1.507 532	1.003 968
68	1.000 268	1.000 178	1.506 217	1.003 236
84	1.000 175	1.000 117	1.505 418	1.002 799
EXTR	-	-	1.500(4)	1.000(2)
CONJEC.	1.0	1.0	1.5	1.0

(b)

L	$-E_o/L$	$-E_o^{st}/L$	$-(E_o-e_\infty L)12L/\ ^2$	$-(E_o^{st}-e_\infty L)12L/\pi^2$
8	1.217 487	1.206 658	1.894 045	1.045 097
20	1.196 908	1.195 230	1.829 403	1.012 984
32	1.194 607	1.193 957	1.818 656	1.007 835
44	1.193 917	1.193 574	1.814 368	1.005 839
56	1.193 622	1.193 411	1.812 046	1.004 784
68	1.193 469	1.193 326	1.810 575	1.004 130
80	1.193 379	1.193 276	1.809 549	1.003 682
EXTR	-	-	1.800(8)	1.000(3)
CONJ.	1.193 147...	1.193 147...	1.8	1.0

Tabela III.4 - continuação

L	$-E_o/L$	$-E_o^{st}/L$	$-(E_o-e_\infty L)\,12L/\pi^2$	$-(E_o^{st}-e_\infty L)\,12L/\pi^2$
8	1.360 614	1.346 815	2.122 890	1.049 057
20	1.327 529	1.335 421	2.040 362	1.015 201
32	1.334 961	1.334 144	2.026 100	1.009 466
44	1.334 192	1.333 761	2.020 291	1.007 161
56	1.333 862	1.333 597	2.017 106	1.005 911
64	1.333 738	1.333 535	2.015 664	1.005 350
EXTR.	-	-	2.00(1)	1.000(5)
CONJ	1.333...	1.333...	2.0	1.0

Vemos destes resultados que os valores encontrados para a anomalia conforme estão em boa concordância com a conjectura (III.1). A boa convergência destas sequências indicam que, assim como no caso das energias obtidas usando a hipótese de string, o termo que corrige a equação (III.3a) é da ordem de $0\left(\frac{1}{(\ln L)^3}\right)$. Se extrapolarmos a diferença entre as energias corretas (E_0) e as energias de string (E_0^{st}) esperamos cancelar pelo menos parcialmente esta correção logarítmica. De fato, usando estas diferenças para fazermos a extrapolação e somando-se o valor extrapolado ao resultado exato obtido nas equações (III.3a), obtemos estimativas bem melhores:

$c = 1.50001 \pm 0.0002\,(1)$, para o spin $s = 1$

$c = 1.8004 \pm 0.000\,(5)$, para o spin $s = 3/2$

$c = 2.0005 \pm 0.000\,(5)$, para o spin $s = 2$

III.d.2. As dimensões dos operadores

As dimensões dos operadores que governam o comportamento crítico das várias funções de correlação podem ser estimadas usando-se as relações (I.9). Para cada setor n ($n = 1, 2, ..$), esperamos que a amplitude da lacuna de massa para o estado de energia mais baixa E_n, deste setor, esteja relacionada com a dimensão X_n de um operador primário. Estas dimensões podem ser estimadas usando-se, para L grande, o limite da sequência:

$$x_n(L) = \left(E_n - E_0\right) \frac{L^2}{\pi^2} \qquad \textbf{(III.7)}$$

Na tabela (III.5) apresentamos estas sequências para os setores $n = 1 - 5$ do spin $s = 1$, $3/2$ e 2. Devido à instabilidades numéricas somente calculamos a energia mais baixa do setor $n = 4$ do spin 2 para comprimento de redes até $L = 32$. Os resultados extrapolados da tabela (III.5) foram obtidos usando-se extrapolação do tipo VBS. Os valores conjecturados são aqueles dados por (III.2) e por uma análise dada posteriormente (ver seção III.e).

Tabela III.5. Amplitudes da lacuna de massa e extrapolações para os setores n (1 - 5) do spin (a) spin s = 1 , (b) spin s = 3/2, (c) spin s = 2. Os valores conjecturados são dados em (III.2) e (III.12a).

(a)

L	$X_1(L)$	$X_2(L)$	$X_3(L)$	$X_4(L)$	$X_5(L)$
8	0.336 784	0.740 494	1.672 538	2.407 210	3.644 041
20	0.337 846	0.803 857	1.886 674	2.960 138	4.662 006
36	0.339 962	0.829 474	1.958 793	3.155 378	5.002 364
52	0.341 389	0.841 900	1.991 375	3.239 970	5.144 823
68	0.342 426	0.849 709	2.011 296	3.289 661	5.227 074
84	0.343 229	0.855 258	2.025 270	3.323 434	5.282 452
EXTR.	0.3(5)	0.9(4)	2.2(5)	3.7(7)	6.6(1)
CONJ.	0.375	1.0	2.375	4.0	6.375

(b)

L	$X_1(L)$	$X_2(L)$	$X_3(L)$	$X_4(L)$	$X_5(L)$
8	0.284 978	0.624 958	0.991 413	1.851 179	2.500 350
20	0.277 241	0.654 902	1.114 668	2.112 626	3.068 554
32	0.276 194	0.665 726	1.155 600	2.186 552	3.234 594
44	0.275 981	0.671 960	1.177 753	2.224 442	3.317 209
56	0.275 994	0.676 234	1.192 276	2.248 737	3.368 604
64	0.276 084	0.678 461	1.199 627	2.260 931	3.393 840
80	0.276 203	0.681 991	1.210 970		3.431 857
EXTR.	0.2(8)	0.7(6)	1.3(9)	2.6(5)	4.0(1)
CONJ.	0.3	0.8	1.5	2.8	4.3

Tabela III.5. continuação

L	$X_1(L)$	$X_2(L)$	$X_3(L)$	$X_4(L)$	$X_5(L)$
8	0.250 280	0.546 825	0.871 821	1.193 742	2.020 109
16	0.239 443	0.555 047	0.933 552	1.347 115	2.283 265
24	0.236 318	0.559 328	0.958 926	1.412 260	2.380 163
32	0.234 864	0.562 143	0.973 603	1.449 876	2.432 493
44	0.233 752	0.565 095	0.987 490		2.479 424
56	0.233 168	0.567 241	0.996 720		2.509 360
64	0.232 920	0.568 400	1.001 444		2.524 331
EXTR.	0.2(3)	0.6(3)	1.1(6)	1.6(5)	3.0(4)
CONJ.	0.25	0.666...	1.25	2.0	3.25

Vemos claramente, da tabela (III.5), que os resultados extrapolados não concordam com as conjecturas, o que não é surpresa pois dos resultados analíticos da seção (III.b) já esperávamos que aparecesse um termo de correção da ordem de $0\left(\frac{1}{(\ln L)}\right)$ na sequência (III.7); responsável por instabilidades na extrapolação VBS (tais extrapolações são boas para séries com comportamento assintótico polinomial +) e portanto dando estimativas ruins para as dimensões dos operadores. Contudo, esperamos que possa ocorrer um cancelamento, se não completo ao menos parcial destes logarítimos, se usarmos ao invés de (III.7) a sequência:

+ Infelizmente não existem métodos numéricos confiáveis para se obter bons resultados de sequêncis cujo comportamento assintótico envolvam logarítimos

$$D_n(L) = \left[\left(E_n - E_0 \right) - \left(E_n^{st} - E_0^{st} \right) \right] \frac{L^2}{\pi^2} \qquad \textbf{(II.8)}$$

onde como antes E_n^{st} (n=1,2,...) denota a energia mais baixa do setor n obtida usando-se a hipótese de string. Consequentemente dos resultados analíticos (III.3b) e da sequência acima deveremos obter uma estimativa melhor:

$$x_n = D_n(\infty) + \frac{n^2}{4s} \qquad \textbf{(III.9)}$$

para as dimensões dos operadores.

Na tabela III.6 (a) - (c), mostramos a sequência (III.8) para setores n = 1 - 5 e spin s = 1 , 3/2 e 2 respectivamente. Mostramos também as extrapolações da sequência (III.8), bem como as estimativas (III.9) nas linhas marcadas por VBS. Com algumas exceções para s>1 (estes casos são denotados pelos símbolos + ou ‡), que discutiremos abaixo, há uma boa concordância com os valores conjecturados (III.2) e (III.12a).

Tabela III.6. Sequências D_n (L) , n = 1 - 5 , para (a) spin s = 1, (b) spin s = 3/2 e (c) spin s = 2. Os resultados extrapolados derrotados por VBS são obtidos de (III.9) e os conjecturados de (III.2) e (III.12a)

L	$D_1(L)$	$D_2(L)$	$D_3(L)$	$D_4(L)$	$D_5(L)$
8	0.118 550	0.014 8478	0.061 6628	0.036 8408	0.045 0017
20	0.121 419	0.005 3599	0.088 5157	0.018 4639	0.064 9935
36	0.122 445	0.003 0060	0.101 4681	0.009 9641	0.077 3298
52	0.122 889	0.002 0877	0.107 3706	0.006 6169	0.087 2656
68	0.123 146	0.001 8149	0.110 7617	0.004 9272	0.093 6852
84	0.123 317	0.001 5791	0.112 9719	0.003 9367	0.098 1576
EXTR.	0.124(6)	0.000(3)	0.124(4)	0.000(7)	0.124(5)
VBS	0.374(6)	1.000(3)	2.374(4)	4.000(7)	6.374(5)
CONJ.	0.375	1.0	2.375	4.0	6.375

Tabela III.6 - continuação

(b)

L	$D_1(L)^+$	$D_2(L)$	$D_3(L)$	$D_4(L)^+$	$D_5(L)^\ddagger$
8	0.125 741	0.078 182	0.039 856	0.050 982	0.065 433
20	0.127 450	0.093 447	0.019 095	0.060 216	0.055 793
32	0.128 449	0.101 362	0.012 824	0.070 177	0.058 342
44	0.129 062	0.106 101	0.009 826	0.077 322	0.062 747
56	0.129 486	0.109 307	0.008 074	0.082 623	0.067 051
64	0.129 704	0.110 941	0.007 262	0.085 466	0.069 668
80	0.130 046	0.113 453	0.006 114		0.074 263
EXTR.	0.133(1)	0.133(2)	0.000(9)	0.0(9)	0.0(9)
VBS	0.299(7)	0.799(8)	1.500(9)	2.7(5)	4.2(6)
CONJ.	0.3	0.8	1.5	2.8	4.3

L	$D_1(L)^\dagger$	$D_2(L)$	$D_3(L)^\ddagger$	$D_4(L)$	$D_5(L)^+$
8	0.117 443	0.074 959	0.066 114	0.065 623	0.063 100
16	0.117 251	0.090 187	0.062 163	0.045 327	0.041 345
24	0.117 858	0.100 351	0.064 649	0.035 572	0.041 100
32	0.118 379	0.107 251	0.067 659	0.029 678	0.043 087
44	0.118 976	0.114 341	0.071 698		0.046 773
56	0.119 423	0.119 270	0.075 026		0.050 284
64	0.119 665	0.121 831	0.076 915		0.052 412
Extr.	0.125(1)	0.166(6)	0.0(9)	0.00(1)	0.0(8)
VBS	0.500(1)	0.666(6)	1.13(4)	2.00(1)	3.2(1)
CONJ.	0.5	0.666...	1.25	2.0	3.25

Como foi discutido na seção III.c para certos valores do spin s e do setor n (como ocorre nos casos simbolizados por + na Tabela 6(b) e 6 (c)), a solução de string não é válida mesmo no limite de $L \to \infty$. Ao invés de termos apenas um conjunto de strings, aparecem nestes casos os defeitos que não foram levados em conta nas equações (II.14). Portanto a sequência (III.8) pode produzir estimativas ruins porque a primeira correção logarítmica $0\left(\frac{1}{\ln L}\right)$ de $E_n(L)$ e $E_n^{st}(L)$ podem ser diferentes. Nestes casos, introduzindo os strings e os defeitos, derivamos um novo conjunto de equações (III.4) diferente das equações originais (II.14, com $\theta_m(X) = 2\,\mathrm{artg}\,(X/m)$). Resolvendo-se estas equações numericamente obtemos as energias $E_n^{def}(L)$, que possue em princípio um termo de $0\left(\frac{1}{\ln L}\right)$, que é uma melhor aproximação ao termo correspondente de $E_n(L)$ do que aquele obtido por meio de $E_n^{st}(L)$. Nestes casos as sequências:

$$F_n^s = \left[\left(E_n - E_0\right) + \left(E_n^{det} - E_0^{st}\right)\right] \frac{L^2}{\pi^2} \qquad \textbf{(III.10)}$$

devem produzir estimativas melhores para as dimensões dos operadores, onde usamos o fato de que no limite $L \to \infty$ o estado fundamental não possui nenhum tipo de defeito, sendo representado por um conjunto de 2s-strings. É importante mencionar que a correção $0\left(\frac{1}{L^2}\right)$ para as energias $E_n^{def}(L)$ são as mesmas daquelas correspondentes a $E_n^{st}(L)$ e portanto as estimativas destas dimensões são:

$$x_n = F_n^s(\infty) + \frac{n^2}{4s} \qquad \textbf{(III.11)}$$

Na Tabela (III.7), mostramos a sequência (III.11) para os casos onde estes defeitos ocorrem (denotados por + nas tabelas 6(b), 6(c)). Vemos então que os resultados extrapolados e os estimados por (III.11) (linha marrada por VBS) estão em boa concordância com os resultados conjecturados.

Tabela III.7. Sequências $E_n^{st}(L)$ (ver III.10). As duas primeiras (últimas) colunas reterem-se ao spin $s = 3/2$ (spin $s = 2$). Os resultados extrapolados denotados por VBS foram obtidos de (III.11) e os conjecturados de (III.2) e (III.12a).

L	$F_1^{3/2}(L)$	$F_4^{3/2}(L)$	$F_1^2(L)$	$F_5^2(L)$
8	0.340 819	0.459 312	0.338 704	0.510 718
20	0.227 749	0.373 160	0.221 006	0.423 842
32	0.195 369	0.319 887	0.188 362	0.363 756
44	0.179 884	0.287 819	0.172 872	0.326 357
56	0.170 758	0.266 372	0.163 769	0.300 871
64	0.166 494	0.255 575	0.159 519	0.287 896
80	0.160 426			
EXTR.	0.1333(2)	0.133(0)	0.12(5)	0.12(6)
VBS	0.2999(8)	2.799(6)	0.50(0)	3.25(1)
CONJ.	0.3	2.8	0.5	3.25

Os casos denotados por ⸸ nas tabelas 6(b) e 6(c), especificamente setor $n = 5$ do spin $s = 3/2$ e setor $n = 3$ do spin $s = 2$ também não dão bons resultados para as dimensões dos operadores. Estes estados correspondem, no limite $L \to \infty$, a um

conjunto de strings e a convergência ruim nestes casos é de natureza diferente que a dos casos denotados por +. Nestes casos a solução de string, embora válida para $L \to \infty$, não dá um bom valor para o termo $0\left(\frac{1}{L^2 \ln L}\right)$. Concluímos disto que a parte imaginária das raízes de (II.18) não sendo fixa como na hipótese de string (II.13), produz contribuições diferentes não só para termos de $0\left(\frac{1}{L^2}\right)$ como também para de $0\left(\frac{1}{L^2 \ln L}\right)$. A fim de obtermos melhores estimativas, nestes casos, extrapolamos a diferença destas energias com outros estados, testando a estabilidade da convergência da respectiva extrapolação. Uma boa convergência para os setores $n = 5$ do spin $s = 3/2$ e do setor $n = 3$ do spin $s = 2$ foi obtida usando as sequências

$$S_1 = \left[\left(E_s - E_s^{st}\right) - \left(E_4 - E_4^{st}\right)\right] \frac{L^2}{\pi^2},$$

$$S_2 = \left[\left(E_s - E_s^{det}\right) - \left(E_3 - E_3^{st}\right)\right] \frac{L^2}{\pi^2},$$

respectivamente. Estas sequências dão como resultados extrapolados S_1 (00) = - 0.00 (1) e S_2 (00) = 0.00(2), produzindo, usando-se (III.3b), os valores x_5 = 4.29 (0) (spin s = 3/2) e x_3 = 1.25(2) (spin s = 2), cujos resultados conjecturados (ver III.e) são

$$x_5 = \frac{103}{24} = 4.2916 \text{ (spin 3/2)}, \quad x_3 = \frac{5}{4} = 1.25 \text{ (spin 2)}.$$

III.e. Conclusão e Sumário

Neste capítulo calculamos a anomalia conforme e as dimensões de escala dos operadores que governam a criticalidade dos modelos de Heisenberg isotrópicos (XXX-S) com spin $s = 1$, $3/2$ e 2, exatamente solúveis pelo Bethe ansatz. Estas quantidades são calculadas explorando a sua relação com o espectro do modelo para redes finitas (equações I.9 e I.11). Analisamos as equações do Bethe ansatz, para L finito, dos modelos XXX-S unindo resultados analíticos (seção III.c e Apêndice A) e numéricos (seção III.d). Esta união foi necessária por causa das correções logarítmicas, as quais são responsáveis por convergência ruins das quantidades a serem estimadas. Estas correções logarítmicas, como no modelo de Heisenberg ($s = 1/2$), indicam que o operador responsável pelas correções de tamanho finito é marginal ($x = 2$).

De fato, introduzindo uma anisotropia [8] nestes mdelos XXX-S, ainda preservamos a sua integrabilidade [40,42] e veremos no capítulo IV (seção IV.f) que o operador responsável pelas correções de tamanho finito é irrelevante ($x > 2$) para valores arbitrários da anisotropia, exceto no ponto isotrópico ($\gamma = 0$) onde este torna-se marginal, originando as correções logarítmicas.

Nossos resultados numéricos [27,28], para os operadores relevantes, estão em boa concordância com os valores conjecturados (III.2). Esta concordância dá suporte à conjectura de que os modelos σ-não linear Wess-Zumino-Witten-Novikov com carga topológica $k = 2s$ e com simetria SU(2) é a teoria de campos conforme destes modelos de spin s, na criticalidade.

Da hipótese de string (II.13) a energia mais baixa num dado setor n corresponde a configuração de raízes complexas

formadas pelo conjunto de um string de tamanho (n/2s) em um mar de 2s-strings, onde (m/n) é o resto da divisão m/n. Nossos resultados indicam que as dimensões dos geradores, para estes estados, tem uma contribuição que depende de (n/2s) além de uma simples contribuição devido aos strings de tamanho 2s: $n^2/4s$. Todos os nossos resultados levam-nos à seguinte conjectura para as dimensões de escala associadas a estes estados de menor energia em um dado setor n para o modelo XXX-S:

$$x_n = \frac{n^2}{4s} - \frac{R(2s-R)}{4s(s+1)} \quad , n = 1, 2. \qquad \textbf{(III.12a)}$$

onde R é o resto da divisão n/2s. A conjectura (III.12a) reproduz (III.2) para $n < 2s$ e concorda com os nossos resultados numéricos e analíticos para $n > 2s$.

É interessante observar ainda que a anomalia conforme dos modelos que estamos estudando pode ser decomposta da seguinte forma:

$$c = \frac{3s}{s+1} = 1 + \frac{2s-1}{s+1} \qquad \textbf{(III.12b)}$$

Como foi mencionado no capítulo I, ZAMOLODCHIKOV e FATEEV [15] construíram um conjunto de teorias invariantes conformes com simetria Z(N). Estas teorias são caracterizadas por uma carga central $C_{Z(N)}$ dada por (ver equação I.5)

$$c_{Z(N)} = \frac{2(N-1)}{n+2} \qquad \textbf{(III.13a)}$$

e as dimensões de escala de alguns operadores (operadores Z(N) - carregados) [15,55] são dadas por:

$$x^{n}_{Z(N)} = \frac{n(N-n)}{N(n+2)} \; ; \; n = 1, 2 \ldots N-1 \qquad \textbf{(III.13b)}$$

Comparando as equações (II.12) com as equações (III.13) e escolhendo $N = 2s$ notamos, para estados de energia mais baixa em um dado setor n, que as equações (III.13) podem ser reescritas como:

$$c = 1 + c_{Z(2s)}$$

$$\textbf{(III.14)}$$

$$x_n = \frac{n^2}{4s} + x^{n}_{Z(2s)}$$

Assim, as equações (III.14), indicam que a álgebra dos modelos XXX-S pode ser descrita por operadores compostos formado pelo produto de um campo bosônico [6] $\left(c = 1 \, , \; X_n = \frac{n^2}{4s} \right)$ por um campo com simetria Z(2s) - Fateev-Zamolodchikov.

Para finalizar, e satisfazer em parte a curiosidade do leitor, adiantamos que no capítulo IV veremos que a composição de operadores acima mencionada é verdadeira mesmo quando introduzimos uma anisotropia (γ) nestes modelos de spin.

Capítulo IV

IV.a. Considerações Gerais

Neste capítulo analisaremos um conjunto especial de Hamiltonianas quânticas antiferromagnéticas que são generalizações anisotrópicas dos modelos estudados no capítulo III. Estes modelos são generalizações do modelo anisotrópico de Heisenberg com spin $s = 1/2$ (XXZ-S = 1/2), para spin s arbitrário, e como consequência são os candidatos naturais a exibirem uma linha de pontos críticos com expoentes críticos variáveis. Da mesma forma que o modelo XXZ-S = 1/2, estas Hamiltonianas são exatamente integráveis pelo método do Bethe ansatz [40] (ver equações II.10). Estudaremos o espectro deste modelos XXZ-S analisando as equações advindas do Bethe ansatz (equações do Bethe ansatz). O espectro destes modelos juntamente com as equações (I.9) e (I.11) permitirá estimar a carga central (c) bem como o conteúdo de operadores destes modelos. Como foi feito no capítulo III, seção III.b, é interessante calcularmos analiticamente as correções de tamanho finito para o espectro, usando a hipótese de string (II.13). Apesar de sabermos que, estes cálculos não são corretos, pois a hipótese de string é esperada ser válida somente no limite $L \to \infty$, isto poderá nos dar uma idéia do comportamento destas correções de tamanho finito. Estes cálculos são feitos em detalhes no Apêndice A, e aqui nos ateremos apenas aos resultados finais. Da equação (A.25) a energia do estado fundamental $E_0^{st}(\gamma)$ (o índice st refere-se à hipótese de string), comporta-se quando $L \to \infty$ como:

$$\frac{E_0^{st}(\gamma)}{L} - e_\infty = -\frac{\pi^2 \operatorname{sen}(2\,s\,\gamma)}{4\,s\,\gamma\,L^2}\left(-\frac{1}{6} + O\left(L^{-2}\right) + O\left(L^{-2/s}\right) + O\left(L^{-4\gamma/(\pi-2\,s\,\gamma)}\right)\right) \quad \textbf{(IV.1a)}$$

Por outro lado da equação (A.26), a diferença entre a energia $E_0^{st}(\gamma)$ do estado de mais baixa energia de um lado setor n (n = 1 , 2 , ...), e o estado fundamental $\left(E_0^{st}\right)$ comporta-se, no limite $L \to \infty$, como

$$\frac{E_n^{st} - E_0^{st}}{L} = \frac{\pi^2 \operatorname{sen}(2 s \gamma)}{2 s \gamma L^2} \left\{ n^2 x_p + 0\left(L^{-1}\right) + 0\left(L^{-2}\right) + \right.$$

$$\left. + 0\left(L^{-2/s}\right) + 0\left(L^{-4s/(\pi - 2s\gamma)}\right) \right\} \qquad \textbf{(IV.1b)}$$

onde $X_p = (\pi - 2s\gamma) / 4\pi s$.

Veremos, nas seções IV.b - f, utilizando cálculos numéricos, que embora algumas potências de L estejam corretas nas equações (IV.1), as amplitudes para a carga central (c) bem como as dimensões dos operadores obtidas comparando as equações (IV.1) e (I.9), (I.11), usando-se $\xi = \frac{\pi}{2} \frac{\operatorname{sen}(2 s \gamma)}{2 s \gamma}$ [40] (ver seção IV.c) não são corretas.

IV.b. Soluções numéricas das equações do Bethe ansatz

Vários trabalhos explorando a solução das equações do Bethe ansatz (EBA), para L finito, foram publicados na literatura. A maioria destes trabalhos concentraram-se no modelo de Heisenberg com S = 1/2 (XXZ-1/2). DES CLOIZEAUX e PEARSON [56] analisaram as energias mais baixas das excitações do tipo "onda de spin", enquanto GRIEGER [57] e BORYSOWICZ et al [58] calcularam funções de correlação no estado fundamental no caso isotrópico ($\gamma \to 0$). O estado fundamental e alguns estados excitados para $0 \leqslant \gamma \leqslant \pi$, foram calculados por WOYNAROVICH e ECKLE [51], mas uma análise completa de todo o espectro do modelo XXZ-1/2 só foi feita recentemente por ALCARAZ,

BARBER e BATCHELOR [24]. É importante mencionar que a maioria dos auto-estados no caso do spin $s = 1/2$ correspondem a um conjunto de soluções reais das equações do Bethe ansatz, enquanto que para $s > 1$ isto só ocorre para alguns estados no limite $L \to \infty$, isto e, para aqueles estados em que a hipótese de string (II.13) é correta. Devemos também mencionar que a maioria dos trabalhos da literatura [27,28,59] para $s > 1$, concentrou-se no caso isotrópico.

Nesta seção apresentaremos nossa analise numérica das equações do Bethe ansatz (II.10) dos modelos XXZ-S para spin $s = 1$ e $s = 3/2$, na região critica $0 \leqslant \gamma \leqslant \pi/2s$. As equações do Bethe ansatz serão resolvidas numericamente usando-se basicamente o método de Newton para solução de sistemas de equações não lineares. Tais equações serão resolvidas para cadeias quânticas de tamanho $L = 3, 4, \ldots, 40$. Embora tais tamanhos de rede sejam suficientes para os propósitos deste capítulo podemos, sem muito esforço computacional, estender tais cálculos para até $L \sim 100$ sítios.

A fim de entendermos as possíveis estruturas de zeros das equações do Bethe ansatz é interessante resolvê-las inicialmente para redes de tamanho pequeno. No caso do spin $s = 1$ e $L = 4$, as possíveis configurações de zeros são mostradas nas tabelas IV.1a-b. Na Figura IV.1 e na tabela IV.1a introduzimos nossa notação para a distribuição dos zeros. A tabela IV.1a nos fornece a localização exata das raízes das equações do Bethe ansatz para alguns estados do espectro, enquanto na figura IV.1 estas excitações são exemplificadas de uma forma esquemática. Na tabela IV.1b apresentamos para todos os setores, uma cenario completo dos zeros para todo o espectro, bem como as energias e os momentos correspondentes.

Tabela IV.1a. Raízes complexas das EBA e momentos para alguns estados, nos setores $n = 0, 1, 2$ e 3, do modelo de spin $s = 1$ com anisotropia $\gamma = \pi/10$ e tamanho $L = 4$. Os símbolos na primeira coluna caracterizam a distribuição de zeros (ver figura IV.1)

$\{\nu_n\}$	n	P	$\{\lambda_j\}$
$2_{1/2}\,2_{-1/2}$	0	0	$\pm$ 0.295 7747 $\pm$ 0.551 2269i
$A^{+}_{0}\,1_{0}\,2_{0}$	0	0	5i, 0, $\pm$ 0.451 9395i
$A^{-}_{-2}\,1_{-1}\,1_{1}A^{+}_{2}$	0	0	1.972 2917 + 5i, - 1.972 217 - 5i, $\pm$ 0.713 8511
$1_{0}\,2_{0}$	1	Π	0, $\pm$ 0.444 7932i
1_{-2}	3	Π	- 1.073 1427
$A^{+}_{1/2}\,1_{2}$	2	$\frac{\Pi}{2}$	0.310 2752 + 5i, 1.002 8587

Tabela IV.1b. A distribuição de zeros das EBA, energias e momentos para o conjunto completo de estados para o spin $s = 1$ com anisotropia $\gamma = \pi/10$ e tamanho $L = 4$. Os símbolos na primeira coluna caracterizam a distribuição de zeros (ver figura IV.1). As energias com o símbolo (*) são duplamente degeneradas, e a configuração de zeros correspondente ao outro estado é obtida mudando-se o sinal das partes reais dos zeros.

η	$\{\nu_n\}$	E/N	P	r	$\{\nu_n\}$	E/N	P
0	$2_{1/2}\ 2_{-1/2}$	-0.986 4962	0	1	$2_{-1/2}\ A^+_1$	-0.432 8636*	$\frac{\pi}{2}$
0	$1_0 A^+_0 2_0$	-0.774 5026	π	1	3_0	-0.327 2542	0
0	$A^-_{-2}\ 2_0 A^+_2$	-0.585 8934	0	1	$1_{-1}\ A^+_0\ 1_1$	-0.268 7634	0
0	$1_0 3_0$	-0.553.3813	π	1	3_1	-0.244 3134*	$\frac{\pi}{2}$
0	$1_{-1/2}\ 2_{1/2}\ A^+_1$	-0.509 4177*	$\frac{\pi}{2}$	1	$2_{-1}\ 1_1$	-0.202 2542	π
0	$2_{-1/2}\ A^+_1\ A^-_{-2}$	-0.428 3813*	$\frac{\pi}{2}$	1	$A^-_{-2}\ 1_0 A^+_2$	-0.188 0810	π
0	$3_0 A^+_0$	-0.303 3813	0	1	$A^-_{-2}\ 1_1 A^+_1$	-0.075 6080	$\frac{\pi}{2}$
0	$A^-_{-2} 1_{-1}\ 1_1 A^+_2$	-0.262 2292	0	1	$A^-_{-3}\ A^+_0 A^+_3$	+0.051 0924	0
0	$3_1\ A^+_2$	-0.251 1805*	$\frac{\pi}{2}$	2	2_0	-0.618 1534	0
0	4_0	-0.236 7097	0	2	$2_{-1/2}$	-0.444 1201*	$\frac{\pi}{2}$
0	$2_{-1}\ A^+_{-1}\ A^+_2$	-0.202 2542*	π	2	$1_{-1}\ 1_1$	-0.279 5084	0
0	$A^-_{-3}\ 1_0 A^+_0\ A^+_3$	-0.183 3872	π	2	$A^+_0 1_0$	-0.202 2542*	π
0	$A^-_{-3}\ A^-_{-1/2}\ A^+_2\ 1_2$	-0.072 2992*	$\frac{\pi}{2}$	2	$A^+_{1/2}\ 1_2$	-0.085 3888*	$\frac{\pi}{2}$
0	$A^-_{-4}\ A^-_{-2}\ A^+_2\ A^+_4$	-0.054 4854	0	2	$A^-_{-2}\ A^+_2$	+0.040 8989	0
0	$2_0 1_0$	-0.793 6816	π	3	1_0	-0.226 1227	π
1	$A^+_0 2_0$	-0.593 3460	0	3	1_{-2}	-0.101 1271*	$\frac{\pi}{2}$
1	$1_{-1/2} 2_{1/2}$	-0.508 4864*	$\frac{\pi}{2}$	3	A^+_0	+0.023 8729	0

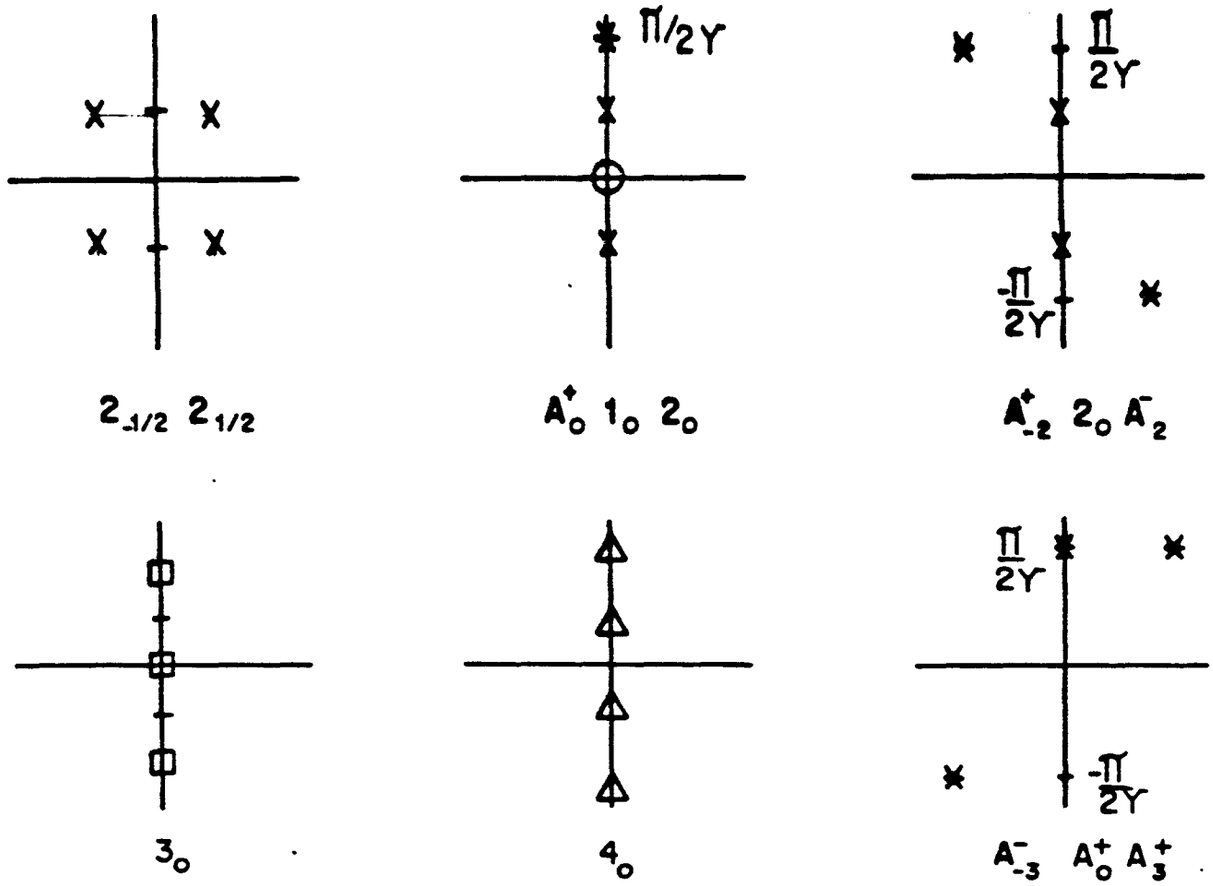

Figura IV.1. Algumas configurações típicas dos zeros complexos das EBA, para spin $s = 1$ e tamanho $L = 4$. O eixo vertical (horizontal) representa a parte imaginária (real) dos zeros. Os símbolos B_k com $B = 1, 2, 3, 4$ ou $A\pm$ denotam "strings" de tamanho 1, 2, 3, 4 ou uma excitação com parte imaginária ($\pm\pi/2\gamma$), respectivamente e o inteiro ou semi inteiro mais próximo que melhor representa a parte real dos zeros. Os "strings" de tamanho 1, 2, 3, 4 são representados por círculos (0), cruzes (x), quadrados (□) e triângulos (Δ), enquanto que as excitações do tipo A são representadas por asterístico (*).

Observamos, destas tabelas, que quando uma raiz com parte imaginária ($\pm\pi/2\gamma$) (raiz do tipo A_k^+ na figura IV.1, representada pelo símbolo *) é adicionada a uma configuração do setor n ($n > 0$), isto produz uma configuração de zeros do setor $n - 1$. Por exemplo o estado com três zeros localizados em ($0, +ia, -ia$), no setor $n = 1$ com configuração $1_0\, 2_0$ nas tabelas IV.1a-b, produz quando adicionamos um zero do tipo A^+ um estado com quatro zeros

localizados em ($i\pi/2\gamma$, 0 , ib , -ib) no setor $n = 0$, que corresponde a uma configuração do tipo $1_0\, A_0^+\, 2_0$. Outro exemplo é o estado com dois zeros reais (ia , - ia) no setor $n = 2$ com configuração 2_0 que com a adição de um zero A^+ produz o estado no setor $n = 1$ com zeros ($i\pi/2\gamma$, b , -b) (configuração $2_0\, A_0^+$) ou pela introdução de dois zeros A^+ e A^- produz o estado, no setor $n = 0$, com zeros ($a' + i\pi/2\gamma$, $-a' - i\pi/2\gamma$, b' , -b') (configuração $A_{-2}^-\, 2_0\, A_2^+$).

Por outro lado nossos resultados numéricos das EBA até redes de tamanho $L = 40$, para o spin $s = 1$, 3/2 e 2, indicam que os zeros do tipo $A_k^{\pm}$ possuem parte imaginária fixa nos valores ($i\pi/2\gamma$), independentemente do tamanho da rede L e do spin s. Estes tipos de zeros não satisfazem a hipótese de string (III.13) mas podem entretanto serem incluídos em uma hipótese mais geral [42,60]. No ponto isotrópico ($\gamma = 0$) estes zeros vão para o infinito produzindo uma degenerescência entre estados de diferentes setores. Tal degenerescência ocorre porque neste limite, zeros no infinito não contribuem para a energia (veja eq. II.19a).

IV.b.1. Estados de mais baixa energia do setor n

O estado fundamental, no caso de redes pares, tem momento zero e ocorre no setor $n = 0$. A sua distribuição de zeros corresponde a um mar de L strings de comprimento 2s (2s-strings) (veja II.13). Os estados de mais baixa energia em cada setor n também possuem momento zero e sua distribuição de zeros corresponde a um mar de (L - [n/2s]) 2s-strings com um string adicional, de comprimento { n/2s }, onde como anteriormente [n/2s] e { n/2s } são as partes inteiras e o resto da divisão n/2s , respectivamente. Nas figuras IV.2a-c (spin $s = 1$) e IV.3a-c (spin $s = 3/2$) mostramos de forma esquemática, para redes de tamanho

$L = 8$ e anisotropia $\gamma = \pi/5$, a distribuição de zeros para os estados de mais baixa energia nos setores $n = 0, 1$ e 2.

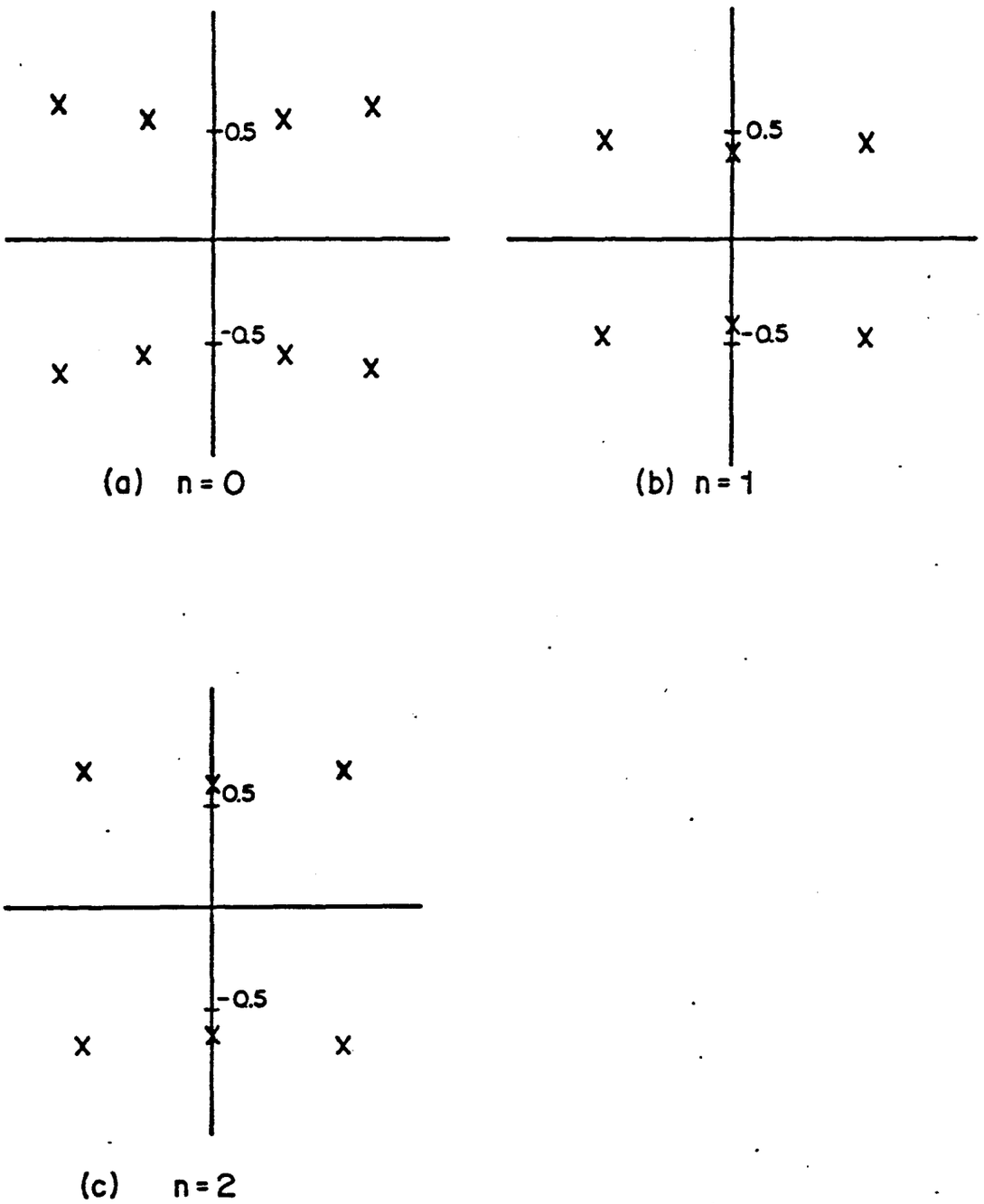

Figura IV.2a-c. Distribuição de zeros das equações do Bethe ansatz para os estados de mais baixa energia no setor n do spin $s = 1$ com $\gamma = \pi/5$ e $L = 8$, a) $n = 0$ (estado fundamental), b) $n = 1$, c) $n = 2$

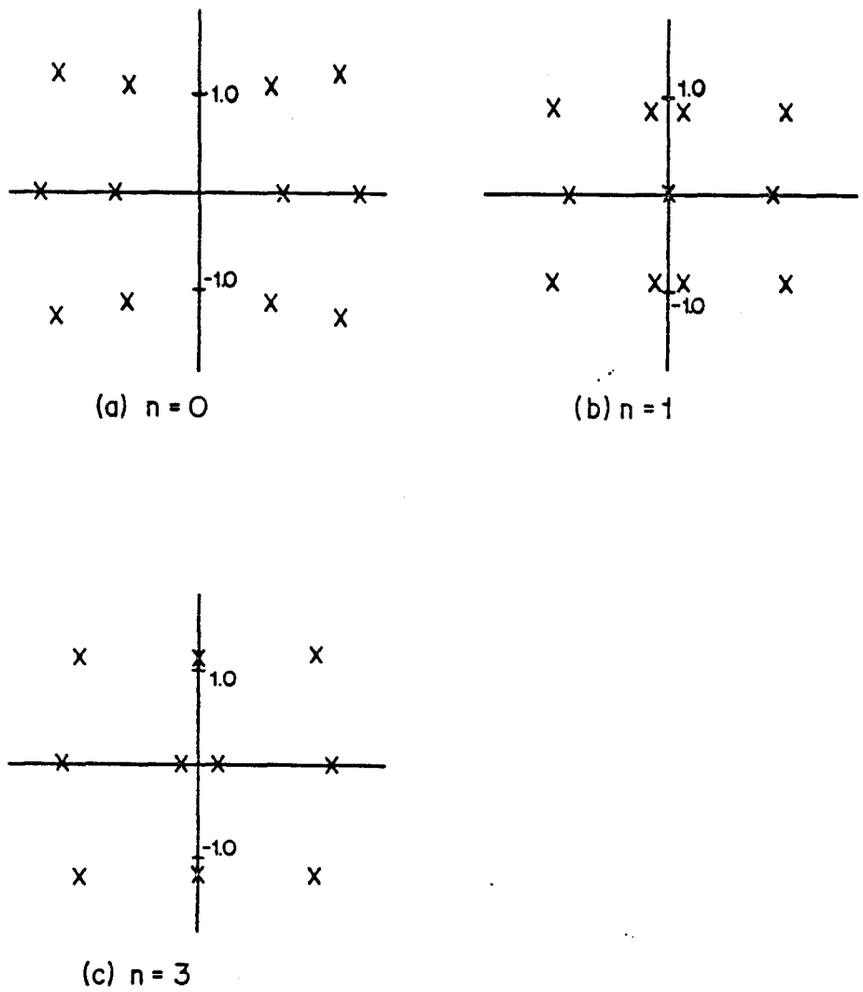

Figura IV.3a-c. O mesmo da figura IV.2a-c para o spin $s = 3/2$.

IV.b.2. Estados excitados com momento zero

Para um dado setor n várias excitações ocorrem, com uma distribuição simétrica de zeros (com respeito ao eixo imaginário) e consequentemente possuindo momento nulo (veja II.13). Na Figura IV.a-g mostramos esquematicamente o cenário das distribuições de zeros das excitações mais relevantes do estado fundamental ($n = 0$), no caso do spin $s = 1$ e $L = 8$. Estas configurações correspondem a excitações em um mar de strings de comprimento 2 (2-string) (representado por cruzes). A configuração (IV.4a) é obtida, para todo

L, fixando dois zeros, um na origem (círculo) e o outro em $X = i\pi/2Y$ (asterístico) e adicionando-se um par de strings de comprimento 2 (2-string). Na Figura (IB.4b) e (IV.4c) o 3-string (triângulos) são fixos como na hipótese de string (II.13), mesmo para redes finitas. Os quadrados na figura (IV.4d) representam uma excitação do tipo 4-string. As excitações onde a parte imaginária é dada por $+ i\pi/2Y$, representadas pelos asterísticos da figura IV.4, não estão incluídos na hipótese de string dada pela equação (II.13), no entanto elas podem ser incluídas numa hipótese de string mais abrangente [42,60]. As excitações representados pelos quadrados pretos na figura IV.4c correspondem, no limite de L infinito, a zeros localizados em $(-2i\ ,\ -i/2\ ,\ +1/2\ ,\ 2i\ )$ os quais não estão incluídos em nenhuma hipótese de string mencionada anteriormente [42,60]. Este fato será comentado na seção (IV.b4) com mais detalhes.

Na figura IV.5a-f mostramos as possíveis configurações de zeros, com momento zero, no setor $n = 0$ para o spin $s = 3/2$ e $L = 8$. Como antes, várias excitações ocorrem em um mar de strings de comprimento 3 (3-string) (triângulos). No caso de setores com $n = 0$ as distribuições de zeros que ocorrem são similares às das figuras (IV.4) e (IV.5) mudando-se apenas o número de zeros de comprimento 2s que compõe o mar de strings (2s-strings).

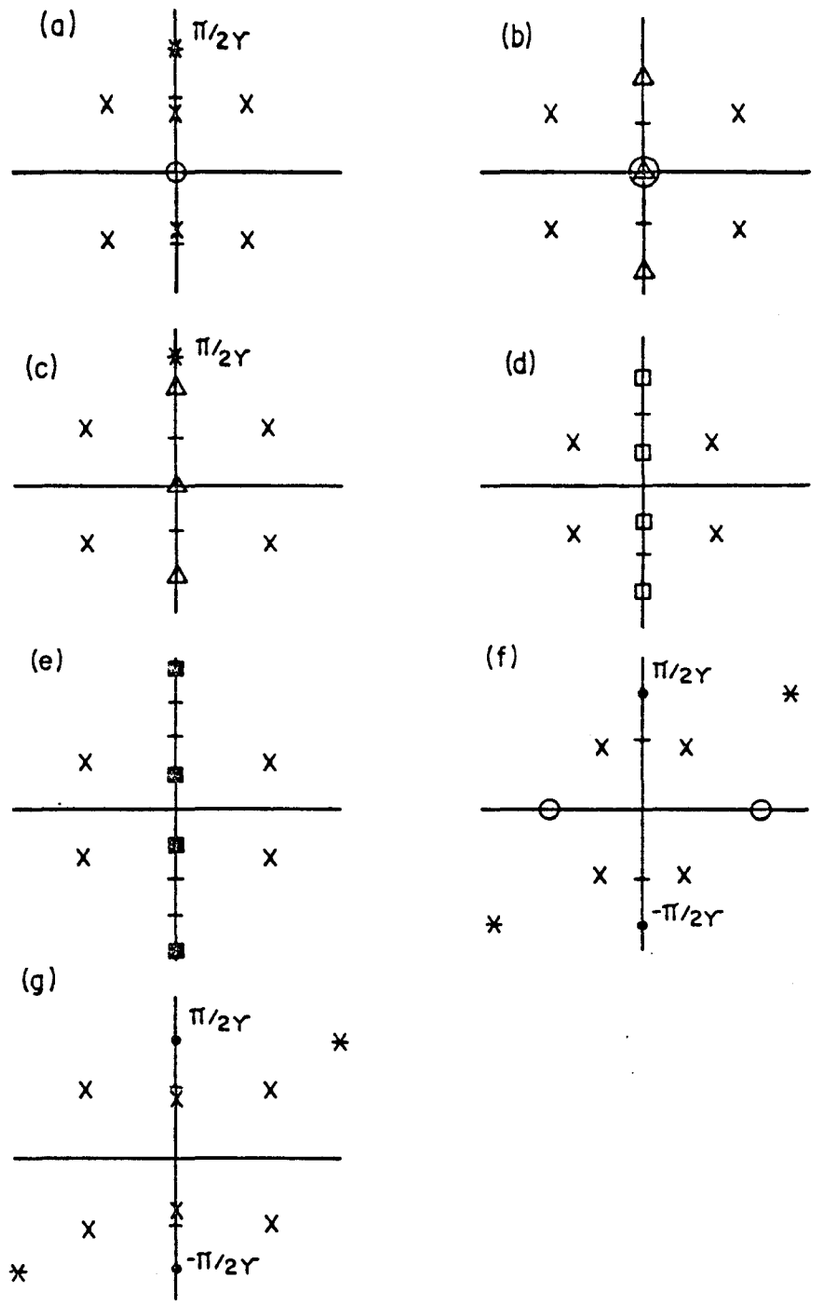

Figura IV.4. Configurações típicas dos zeros das equações do Bethe ansatz para o setor $n = 0$ do spin $s = 1$ e tamanho de rede $L = 8$. Os zeros formando strings de comprimento 1, 2, 3, 4 são representados por círculos (0), cruzes (X), triângulos (Δ), e quadrados (□), respectivamente. A excitação denotada pelos quadrados pretos em (e) não são preditas pela hipótese de string (veja texto) e os zeros representados por asterísticos possuem parte imaginária fixa em $\pm\, i\pi/2\gamma$.

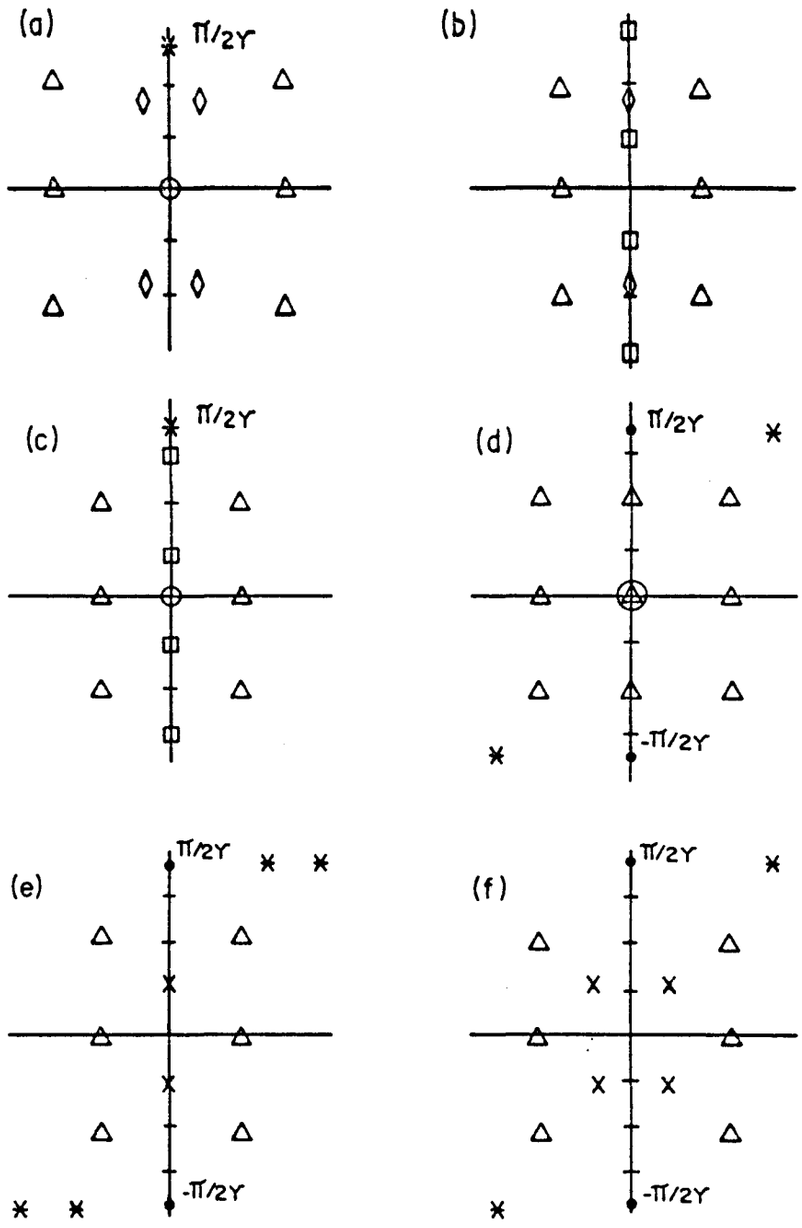

Figura IV.5. Configurações típicas dos zeros das equações do Bethe ansatz para o setor $n = 0$ do spin $s = 3/2$ e $L = 8$. Os zeros formando strings de comprimento 1, 2, 3, 4 são representados por círculos (0), cruzes (X), triângulos (Δ), e quadrados (□), respectivamente. Excitações denotadas pelos losângulos (◇) (a) e (b) não são preditas pela hipótese de string (veja seção IB.b4) e os zeros representados por (*) possuem parte imaginária fixa em $\pm i\pi/2\gamma$.

IV.b.3. Estados excitados com momento não nulo

Estados com momento $p = \frac{2\pi k}{L}$ $(k = 1, 2, \ldots, L-1)$ são caracterizados por distribuições de zeros assimétricos. Na Figura (IV.6) mostramos algumas configurações de zeros, juntos com seu respectivo momento, para $L = 8$ e spin $s = 1$ e $3/2$.

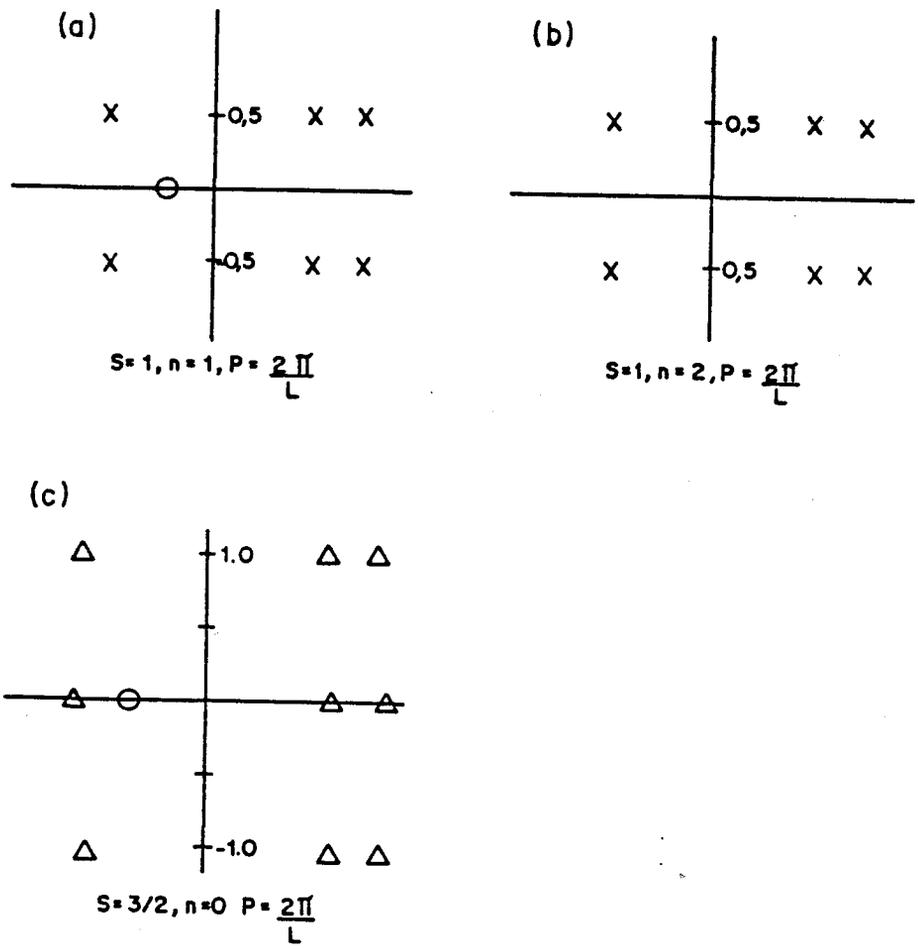

Figura IV.6. Distribuição esquemática de zeros para estados com momento (p) não nulo, para $L = 8$. a) spin $s = 1$, setor $n = 1$ $p = 2\pi/L$; b) spin $s = 1$, setor $n = 2$, $p = 2\pi/L$; c) spin 3/2, setor $n = 2$, $p = 2\pi/L$.

Antes de terminarmos esta seção mencionaremos as principais características que ocorrem na distribuição de zeros quando o tamanho da rede é ímpar. Os resultados de ALCARAZ et al [24] para o $s = 1/2$ e os nossos resultados para o spin $s = 1$ e $s = 3/2$ indicam que ao contrário do caso em que L é um número par, o estado fundamental ocorre no setor $n = \pm s$ e consequentemente, é no mínimo duplamente degenerado. Na figura (IV.7a) e (IV.7b) mostramos, no caso do modelo de spin $s = 1$, configurações de zeros para o estado de mais baixa energia no setor $n=1$ (estado fundamental) e no setor $n = 0$, respectivamente. Ainda no caso em que $s = 1$ mostramos nas figuras (IV.7c) e (IV.7d) as estruturas dos zeros para estados excitados com momento não nulo nos setores $n = 1$ e $n = 0$, respectivamente.

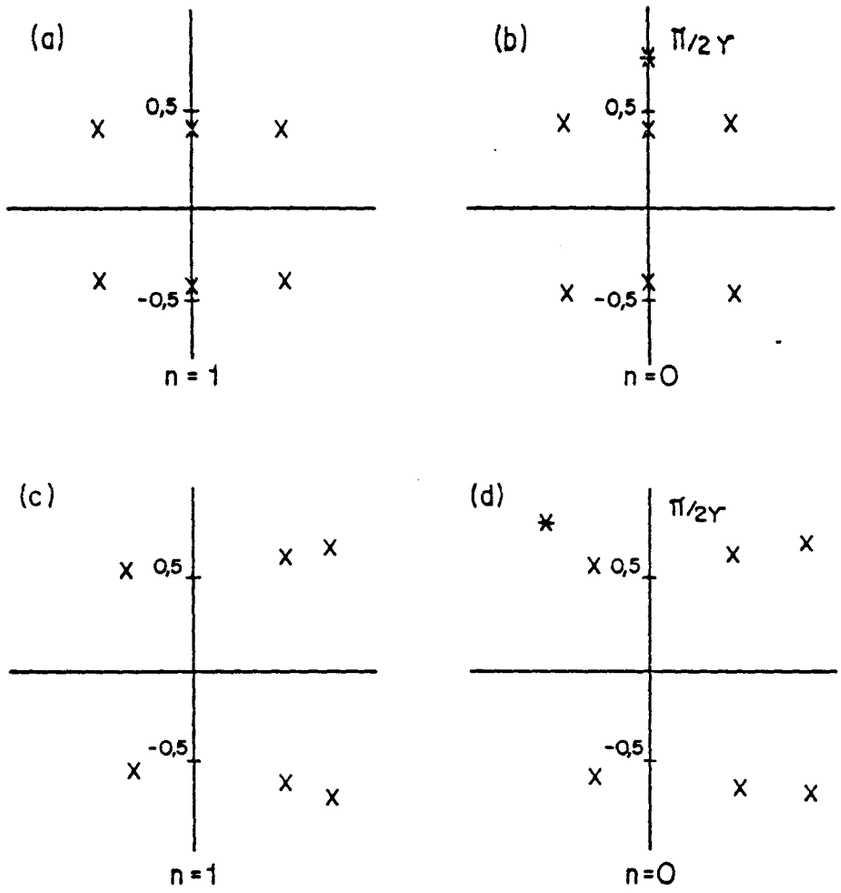

Figura IV.7. Configurações típicas dos zeros das equações do Bethe ansatz do modelo com spin $s = 1$ e da cadeia com $L = 7$ sítios. a) estado fundamental (setor $n = 1$), b) estado de energia mais baixa no setor $n = 0$, c) estado excitado no setor $n = 1$, d) estado excitado no setor $n = 0$.

IV.b.4. Excitações especiais

Como foi mencionado na seção (IV.B.2.), observamos que aparecem distribuições especiais de zeros que violam a hipótese de string. Denominamos estas excitações de defeitos (veja figura IV.4e, IV.5a e IV.5b). A primeira estrutura de zeros onde este defeito ocorre é no setor $n = 0$ do spin $s = 1$. Esta estrutura envolve quatro zeros e lembra, para redes pequenas, a excitação do tipo 4-string. No entanto, à medida que L cresce, a parte imaginária do maior (Y_2) e do menor (Y_1) zero (relativa ao eixo real) tende para os valores 2 e 1/2, respectivamente, em constraste com a hipótese de string onde strings de comprimento 4 (4-strings) estes valores são 3/2 e 1/2 respectivamente. A fim de ilustrar este tipo de defeito, e compará-lo com o 4-string normal, mostramos nas tabelas (IV.2a-b), para vários valores de L, a parte imaginária Y_1 e Y_2 dos zeros destas estruturas. As raízes apresentadas nas tabelas (IV.2a-b) aparecem junto com um mar de $\left(\frac{L-4}{2}\right)$ strings de tamanho 2 (2-strings). Observamos que, para $L > 8$, este mar de 2-string associado às tabelas (IV.2a) e (IV.2b), exibem comportamentos diferentes. O mar de 2-strings associado com a tabela (IV.2a) (tabela IV.2b) sempre tem a parte imaginária de seus zeros com valor absoluto maior (menor) que 1/2.

Tabela 2a-b. A localização, para vários valores do comprimento (L) da rede, dos zeros da equação do Bethe ansatz que lembra a configuração do tipo 4-string, para spin $s = 1$ e $\gamma = \pi/6$. A parte imaginária dos dois menores e maiores zeros são indicadas por $\pm(Y_1)$ e $\pm(Y_2)$ respectivamente. Quando L aumenta, os zeros tendem a formar o defeitos em (a) e um string de tamanho 4 em (b) (ver texto). As energias correspondentes à distribuição de zeros referentes às estruturas mencionadas acima, também são mostradas.

(a)

N	E/N	Y_1	Y_2
8	-0.573 8621	0.502 5052	1.577 2115
16	-0.704 6703	0.503 4479	1.657 8458
24	-0.729 9104	0.503 0303	1.706 1569
32	-0.738 7478	0.502 5694	1.738 6620
40	-0.742 8242	0.502 1985	1.762 3723
Extr.	-0.750(1)	0.500(1)	1.99(1)
Conj.	-0.75	0.5	2

(b)

N	E/N	Y_1	Y_2
8	-0.419 6783	0.500 0400	1.506 5420
16	-0.582 4816	0.500 0038	1.502 0327
24	-0.638 7408	0.500 0017	1.500 9875
32	-0.666 8884	0.500 0003	1.500 5840
Extr.	-0.750(4)	0.50000(2)	1.4999(8)
Conj.	-0.75	0.5	1.5

A nossa análise numérica para os spins $s = 3/2$ e $s = 2$ também indicam um outro tipo de defeito, e acreditamos que esta estrutura ocorra para qualquer valor de spin $s \geq 3/2$. Com o propósito de explicar estas estruturas vamos nos restringir a redes com tamanho múltiplo de 4. Para estas redes, de acordo com a hipótese de string, os estados de energia mais baixa no setor $n = 1$ é formado por $\left(\frac{N}{2} - 2\right)$ strings de tamanho 2s, simetricamente distribuído em relação ao eixo imaginário, e dois strings de tamanho (2s) e (2s - 1) localizados no eixo imaginário. No entanto a solução das equações do Bethe ansatz, para L finito, mostra que um conjunto de (4s - 1) zeros, puramente imaginários, ao invés de formar strings de tamanho 2s e 2s - 1 , preferem formar uma estrutura de zeros onde os quatro maiores zeros (em relação ao eixo real) são localizados nas extremidades de um retângulo ($\pm\lambda_R \pm i\lambda_I$) e os zeros restantes se localizam ao longo do eixo imaginário, formando um string de tamanho (2s - 2) e outro de tamanho (2s - 3). Na figura (IV.8a) mostramos esta estrutura de 4-zeros para o spin $s = 2$. Quando L aumenta a parte real (λ_R) dos zeros que forma o retângulo tende a decrescer, enquanto a parte imaginária (λ_I) tende a $i(s - 1/2)$. Consequentemente, no limite $L \to 0$, a estrutura completa dos zeros é composta por $\left(\frac{N}{2} - 2\right)$ strings de comprimento 2s, outros dois strings de tamanho (2s - 2) e (2s - 3) e um par de raízes localizadas em $\pm i(s - 1/2)$, em contradição com a hipótese de string.

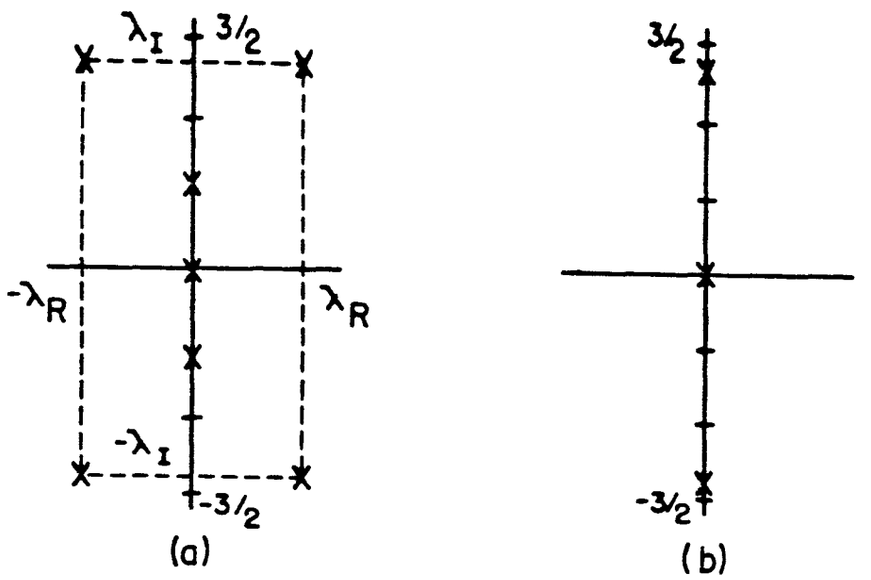

Figura IV.8. Algumas configurações das raízes das equações do Bethe ansatz, para o spin $s = 2$, que desviam da hipótese de string (veja texto). As cruzes (X) representam as raízes e os eixos horizontal (vertical) são suas partes reais (imaginária). As configurações IV.8a (IV.8b) aparecem na distribuição de raízes associadas às energias mais baixas dos setores $n = 1, 9, 17$ ($n = 5, 13, 21 \ldots$)

Na Tabela IV.3 mostramos, para spins $s = 3/2$ e $s = 2$, a tendência de formação deste par de defeitos exibindo os valores de λ_R e λ_I até $L = 40$. Este tipo de defeito foi comentado recentemente [28,59] no caso especial onde $\gamma = 0$ (modelos isotrópicos). Mais geralmente, a partir de nossos resultados numéricos, conjecturamos que, para $s > 3/2$, estas estruturas com defeitos descritas acima deverão ocorrer em outros setores $n = 1$, do espaço de Hilbert. Mais precisamente elas aparecerão em configurações de zeros associadas aos estados de mais baixa energia dos setores $n = 1 + 2sj$, onde $j = 0, 1, 2, \ldots$ De acordo com a hipótese de string a configuração de zeros esperada para tais estados são formados por $\left(\frac{L}{2} - j - 1\right)$ strings de tamanho $2s$ e um único string de tamanho $(2s - 1)$. Se j é par a mesma estrutura descrita acima, no caso do setor $n = 1$, ocorre. No

entanto se j é ímpar, o string de tamanho (2s - 1) prefere, à medida que L aumenta, transformar-se em uma estrutura composta por um string de tamanho (2s -3) e um defeito localizado em $\pm i \lambda_I = \pm i (s - 1/2)$. Na figura (IV.8b) desenhamos esta estrutura, no caso do spin s = 2 e setor n = 5. Na tabela IV.3 mostramos também as posições da parte imaginária ($\pm i (s - 1/2)$) do defeito para o setor n = 4 do modelo com spin s = 3/2.

Tabela IV.3. A localização, para vários tamanhos de rede L, de algumas excitações que desviam da hipótese de string. As excitações aparecendo no setor n = 1 dos spins s = 3/2 e s = 2 (setor n = 4 do spin s = 3/2) são do tipo daquelas mostradas na Figura IV.8a (IV.8b).

N	S=3/2, r=1		S=2, r=1		S=3/2, r=4
	λ_R	λ_I	λ_R	λ_I	λ_I
8	0.108 7111	0.928 5499	0.122 9136	1.471 8195	0.605 9265
16	0.060 6575	0.973 7695	0.062 2109	1.490 7608	0.674 6341
24	0.041 1062	0.984 9942	0.041 5598	1.494 9970	0.733 8721
32	0.031 0002	0.989 7428	0.031 1958	1.496 7277	0.787 1811
40	0.024 8642	0.992 3047	0.024 9678	1.497 6352	0.836 7649
Extr.	0.000 1(4)	1.000 0(8)	0.000 3(1)	1.499 8(1)	1.0(2)
Conj.	0	1	0	1.5	1

Como última observação desta seção, mencionamos que estas excitações com defeitos também aparecerão em estados de outros setores. Elas ocorrerão, como já foi discutido anteriormente, e estados com diferentes setores são obtidos ao adicionarmos a estes defeitos excitações é fixa em $\pm i \pi/2\gamma$ (tipo $A_k^{\pm}$ na figura IV.1).

IV.c. Anomalia conforme

Como foi mencionado no Capítulo III (seção III.d.1) relacionando os efeitos de tamanho finito em um sistema de mecânica estatística crítico a duas dimensões com os efeitos de temperatura finita (T), é possível extrair a anomalia conforme do modelo de mecânica estatística associado a partir de seu calor específico a baixas temperaturas. Usando este fato, recentemente Johannesson [61] calculou a anomalia conforme utilizando-se dos cálculos existentes [42] do calor específico destes modelos. Quando a anisotropia é escrita como $\gamma = \frac{\pi}{p}$, ele mostrou que para p racional e $0 \leqslant \gamma \leqslant \pi/2s$ a carga central é dada por:

$$c = \frac{3\,s}{s+1} \qquad \textbf{(IV.2a)}$$

independente de γ.

Nossos resultados numéricos, para L finito, mostram que para qualquer valor de γ ($0 \leqslant \gamma \leqslant \pi/2s$) a anomalia conforme é dada pela equação (IV.2a). A carga central c pode ser calculada usando-se as correções de tamanho finito (L) do estado fundamental, como na equação (I.11). A constante ξ, que aparece em (I.11) e (I.9) pode ser calculada comparando-se diferentes níveis de energia associados com o mesmo operador (mesma torre conforme). Todas as análises das correções de tamanho finito do espectro indicam que:

$$\xi = \frac{\pi \operatorname{sen}(2\,s\,\gamma)}{4\,\gamma}\,,\quad 0 \leqslant \gamma \leqslant \pi/2s \qquad \textbf{(IV.2b)}$$

que coincide com a velocidade do som originalmente calculada por SOGO[40]. Das equações (I.11) e (IV.2b) podemos estimar a anomalia conforme, no limite de L grande, da sequência

$$c(L,\gamma) = \frac{24\gamma L}{\pi^2 \operatorname{sen}(2s\gamma)} \left(e_\infty - E_0(L)\right) \qquad \textbf{(IV.3)}$$

Na tabela IV.4 (spin s = 1) e na tabela IV.5 (spin s = 3/2) mostramos a sequência (IV.3) para L = 8 - 40 e alguns valores de γ.

Tabela IV.4. Sequências $c(L,\gamma)$ (IV.3) para a anomalia conforme do spin s = 1 com vários valores de γ. Nas duas últimas linhas apresentamos os resultados extrapolados e conjecturados (c = 3/2)

L	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5.5}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$	$\gamma = \frac{\pi}{4\sqrt{2}}$	$\gamma = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$	$\gamma = \frac{\pi}{3}$
8	1.556 670	1.554 628	1.551 836	1.555 339	1.545 776	1.532 078
16	1.518 574	1.517 165	1.515 435	1.517 641	1.512 370	1.508 159
24	1.510 206	1.509 094	1.507 816	1.509 463	1.505 805	1.503 682
32	1.506 826	1.505 896	1.504 876	1.506 200	1.503 400	1.502 095
40	1.505 057	1.504 252	1.503 401	1.504 513	1.502 247	1.501 354
Extr.	1.500 00(5)	1.500 00(2)	1.500 00(2)	1.500 00(3)	1.500 00(2)	1.500 00(1)
Exact.	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5

Tabela IV.5. O mesmo da tabela IV.4 para o spin $s = 3/2$, neste caso o valor conjecturado é $c = 9/5$

L	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5.5}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$	$\gamma = \frac{\pi}{4\sqrt{2}}$	$\gamma = \frac{\pi}{4}$	$\gamma = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$
8	1.874 366	1.868 455	1.861 212	1.870 463	1.844 910	1.849 180
16	1.822 895	1.819 802	1.816 722	1.820 793	1.812 113	1.813 130
24	1.811 823	1.809 746	1.807 913	1.810 388	1.805 703	1.806 147
32	1.807 472	1.805 924	1.804 667	1.810 639	1.803 357	1.803 604
40	1.805 262	1.804 035	1.803 103	1.804 397	1.802 231	1.802 387
Extr.	1.800 00(4)	1.800 00(4)	1.800 00(2)	1.800 00(4)	1.800 00(2)	1.800 00(1)
Exact.	1.8	1.8	1.8	1.8	1.8	1.8

IV.d. O conteúdo de operadores do modelo XXZ-S com condições periódicas de contorno

Investigamos nesta seção o conteúdo de operadores do modelo XXZ-S, para o caso em que o tamanho da rede (L) é um número par ou ímpar. Em ambos os casos as dimensões de escala dos operadores que descrevem o comportamento crítico, do sistema infinito, serão calculados usando-se as relações (I.9). Tais relações relacionam as dimensões dos operadores que governam a criticalidade do sistema infinito com as lacunas de massa de rede finita, com condições de contorno periódicas.

Usando-se a equação (I.9) a dimensão de escala associada com o m-ésimo estado excitado $E_n^m(\gamma, L)$ do setor n poderá ser estimado pelo limite $L \to \infty$ de uma das sequências abaixo:

$$\Lambda_L^m(\gamma, n) = \frac{L}{2\pi\xi}\left[E_n^m(\gamma, L) - E_0(\gamma, L)\right] \qquad \textbf{(II.4)}$$

$$\Omega_L^m(\gamma, n) = \frac{L}{12\pi\xi}\left[\left(E_n^m(\gamma, L) - L e_\infty\right) 6L + \pi\xi\right] \quad \textbf{(IV.5)}$$

onde, como antes, ξ é dado por (IV.2), $E_0(\gamma, L)$ é a energia do estado fundamental do sistema de tamanho L, c é a anomalia conforme já calculada na seção IV.c e, e_∞ é a energia do estado fundamental, por sítio da rede, no limite termodinâmico (eq. II.16). Na tabela (IV.6) apresentamos, para alguns valores de γ, o valor de e_∞ para os spins s = 1 e 3/2.

Tabela IV.6. Energia do estado fundamental, no limite termodinâmico (eq. II.16) para os spins s = 1 e 3/2 e vários valores de γ

γ	$e_\infty(1)$	$e_\infty(3/2)$
$\frac{\pi}{6}$	-0.75	-0.619 3035
$\frac{\pi}{4\sqrt{2}}$	-0.722 0079	-0.563 3719
$\frac{\pi}{5.5}$	-0.707 7075	-0.535 5164
$\frac{\pi}{3\sqrt{2}}$	-0.544 8573	-0.256 0750
$\frac{\pi}{4}$	-0.5	-0.192 8775

As sequências (IV.4) e (IV.5) deverão ser mais convenientes para os casos onde L é par ou ímpar, respectivamente. Agora, consideraremos separadamente os modelos com spin s = 1 e 3/2.

IV.d.1. Modelo XXZ-S com spin s = 1

IV.d.1.a. L par

Vamos considerar inicialmente o caso quando L é par. Neste caso o estado de menor energia para qualquer setor n possui momento nulo e o estado fundamental pertence ao setor n = 0. Nossos resultados numéricos indicam que associado a estes estados no setor n (0 , ± 1 , ± 2 , ...) existem operadores $0_{n,0}$ com dimensão $X_{n,0}(\gamma)$ dado por

$$x_{n,0}(\gamma) = n^2 X_p + \frac{k}{8} \ , \ n = \pm 1 , \pm 2 , \ldots \qquad \textbf{(IV.6a)}$$

onde $X_p = \dfrac{\pi - 2\gamma}{4\pi}$ e $k = (n + m) \bmod (2)$.

Na tabela (IV.7), mostramos para dois valores de γ, as sequências (IV.4) correspondente a $X_{n,0}$ para L até 40. Também apresentamos nestas tabelas os valores extrapolados e conjecturados. Embora possamos extender nossos cálculos numéricos até L ~100 , isto não é necessário porque os valores obtidos nas extrapolações das sequências (IV.4), exceto ao redor de $\gamma = 0$ (veja capítulo III, seção III.b), são suficientemente estáveis quando consideramos tamanhos de rede até L ~40. As dimensões (IV.6) dependem continuamente de γ, como no caso do modelo de s = 1/2 [24], e os operadores $0_{1,0}$ e $0_{2,0}$ são generalizações do operador polarização e energia do modelo de 6-vértices [3] , respectivamente. A constante k/8 que aparece em (IV.6), que assume o valor 1 para n ímpar (0 para n par) está relacionada com o fato de que, para tais estados, as configurações dos zeros das equações do Bethe ansatz tem (não tem) excitações de 1-string, além do mar de excitações do tipo de 2-string.

Tabela IV.7. Dimensões de escala dadas pela sequência $\Lambda_L^0(\gamma, n)$ (eq. IV.4) associadas com os estados de mais baixa energia nos setores $n = 1, 2, 3$ do spin $s = 1$ para $\gamma = \frac{\pi}{5.5}$ e $\gamma = \pi/3$. Os valores conjecturados são dados por $X_{1,0}$; $X_{2,0}$ e $X_{3,0}$ na equação (IV.6)

	$\Lambda_L^0(\gamma,1)$		$\Lambda_L^0(\gamma,2)$		$\Lambda_L^0(\gamma,3)$	
L	$\gamma = \frac{\pi}{5.5}$	$\gamma = \frac{\pi}{3}$	$\gamma = \frac{\pi}{5.5}$	$\gamma = \frac{\pi}{3}$	$\gamma = \frac{\pi}{5.5}$	$\gamma = \frac{\pi}{3}$
8	0.293 770	0.216 797	0.604 082	0.337 335	1.431 334	0.897 076
16	0.288 377	0.211 744	0.622 176	0.334 283	1.516 489	0.891 919
24	0.286 854	0.210 429	0.627 626	0.333 745	1.537 152	0.887 609
32	0.286 136	0.209 838	0.630 176	0.333 560	1.545 324	0.884 968
40	0.285 717	0.209 505	0.631 627	0.333 767	1.549 395	0.883 225
Extr.	0.284 08(9)	0.208 33(4)	0.636 3(4)	0.333 33(3)	1.556(7)	0.874 99(8)
Exact.	0.284 091	0.208 333	0.636 363	0.333...	1.55 682	0.875

Vamos agora calcular as dimensões de escala associada com os estados excitados em cada setor n. Inicialmente vamos restringir-nos às lacunas de massa associadas com auto-estados de momento nulo. A distribuição de zeros das equações do Bethe ansatz para estes estados são simétricas, com respeito a eixo imaginário, e nas figuras (IV.4a-g) podemos ver alguns exemplos típicos destas excitações. Nossos resultados numéricos indicam que, para um dado setor n, existem duas séries de dimensões $x_{n,m}$ e $y_{n,m}$ associadas aos estados de momento nulos;

$$x_{n,m}(\gamma) = n^2 X_p + \frac{m^2}{16 X_p} + \frac{|n.m|}{2} + \frac{k}{8} \qquad \textbf{(IV.7a)}$$

e

$$y_{n,m}(\gamma) = x_{n,m}(\gamma) + 1 \,,\; (n+m) = 0 \mod 2 \qquad \textbf{(IV.7b)}$$

com $n,m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ e $k = (n+m) \mod (2)$. Vemos claramente que, a menos de algumas constantes adicionais, as equações (IV.7) tem dimensões cuja estrutura é a mesma daquela que surge no modelo Gaussiano[62]. Na tabela (IV.8a-b), mostramos para dois valores de γ, as sequências (IV.4) para alguns estados excitados. E interessante, neste ponto, darmos uma idéia da distribuição dos zeros das equações do Bethe ansatz de algumas das excitações que produzem as dimensões de escala dada pelas equações (IV.7). As dimensões $X_{n,-1}$ são obtidas de uma configuração de zeros onde um dos zeros é sempre fixo em $\lambda = \pm \dfrac{i\pi}{2\gamma}$ (exitação do tipo $A_k^{\pm}$), como na figura (IV.4a) para o setor $n = 0$. Por outro lado as dimensões $X_{n,+1}$ são produzidas por configurações onde três zeros formam um 3-string exato no eixo imaginário $(-i, 0, i)$, como na figura (IV.4b) para o setor $n = 0$. As dimensões $x_{n,-2}$ são formadas quando quatro zeros produzem um 3-string e uma exitação do tipo $A_k^{\pm}$ (figura IV.4c), enquanto $x_{n,+2}$ são produzidas quando 4 zeros preferem formar uma excitação do tipo 4-string (figura IV.4d). A outra família de dimensões $Y_{n,m}$, as quais obedecem à regra de seleção $(n+m) = 0 \mod (2)$, é formada, no caso em que n e m são diferentes de zero, a partir das configurações que produzem $X_{n,m}$, tomando-se dois zeros do tipo 2-string e colocando-os no eixo real.

Tabela IV.8. Sequências (IV.4) associadas com as dimensões de escala $X_{n,m}$ e $Y_{n,m}$ para o modelo com spin $s = 1$. a) $\gamma = \pi/6$ e b) $\gamma = \pi/3\sqrt{2}$. Os valores conjecturados são dados em (IV.7)

(a)

L	$X_{0,-1}$	$X_{0,1}$	$X_{1,1}$	$X_{2,1}$	$Y_{2,0}$	$Y_{1,1}$
8	0.426 975	0.664 442	0.815 966	1.691 706	1.452 700	1.577 605
16	0.442 636	0.603 717	0.887 411	1.876 763	1.575 718	1.760 964
24	0.450 957	0.580 027	0.917 468	1.942 698	1.611 650	1.827 359
32	0.456 323	0.566 946	0.934 843	1.977 775	1.627 939	1.862 686
40	0.460 167	0.558 465	0.946 485	2.000 164	1.637 041	1.885 134
Extr.	0.500(1)	0.500(8)	1.040(9)	2.16(7)	1.666(6)	2.04(1)
Exact.	0.5	0.5	1.041 666	2.166...	1.666...	2.041 666

(b)

L	$X_{0,-1}$	$X_{0,1}$	$X_{1,1}$	$X_{2,1}$	$Y_{2,0}$	$Y_{1,1}$
8	0.547 607	0.698 164	0.928 352	1.759 540	1.385 526	1.677 497
16	0.570 430	0.651 720	1.012 558	1.957 544	1.480 061	1.893 878
24	0.578 752	0.635 043	1.042 452	2.019 710	1.503 739	1.966 977
32	0.583 073	0.626 436	1.045 760	2.048 909	1.513 286	2.002 778
40	0.585 735	0.621 160	1.066 744	2.065 621	1.518 125	2.023 837
Extr.	0.597 9(5)	0.597 9(4)	1.105 0(4)	2.126(5)	1.528(2)	2.105(1)
Exact.	0.597 952	0.597 952	1.105 100	2.126 547	1.528 955	2.105 100

É importante observar que as equações (IV.7) prevê a dimensão $Y_{0,0} = 1$ (figura IV.4g), independentemente da anisotropia γ (ver tabela IV.9). Por outro lado pelo fato das dimensões (IV.7) dependerem continuamente de γ, argumentos usuais de grupo de renormalização, nos levam a supor a existência de um operador marginal. O_{mar} com dimensão $X_{mar} = 2$ para qualquer γ. Tal operador governará o movimento ao longo da linha de pontos fixos [62,63]. De fato a configuração de zeros com dois zeros com parte imaginária ($\pm i\pi/2\gamma$), como na figura (IV.4f), produz a dimensão $X = 2$, para todo valor de γ. Na tabela (IV.9) mostramos, para alguns valores de γ, as sequências (IV.4) correspondentes ao operador marginal e à dimensão $Y_{0,0}$.

Tabela IV.9. Sequências (IV.4) associadas às dimensões de escala $Y_{0,0}$ e X_{mar} para $\gamma = \pi/6$, $\pi/5$ e $\pi/3\sqrt{2}$. Os valores conjecturados são $Y_{0,0} = 1$ e $X_{mar} = 2$ para todos os valores de γ

	$Y_{0,0}$			X_{mar}		
L	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$	$\gamma = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$	$\gamma = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$
8	0.851 557	0.890 211	0.925 984	1.613 828	1.662 672	1.728 701
16	0.920 530	0.952 621	0.974 573	1.801 863	1.852 085	1.902 064
24	0.945 918	0.972 031	0.986 972	1.867 114	1.912 079	1.948 881
32	0.959 052	0.980 920	0.991 981	1.900 062	1.939 859	1.968 238
40	0.967 068	0.985 860	0.994 520	1.919 923	1.955 389	1.978 169
Extr.	0.999 9(8)	0.999 9(8)	0.999 9(8)	1.999 9(4)	1.999(8)	1.999(8)
Exact.	1	1	1	2	2	2

O fato da anomalia conforme ter o valor $c = 3/2 = 1 + 1/2$ e a existência de um operador marginal, peculiar de teorias com $c = 1$,

nos induzem a interpretar o modelo XXZ-S = 1 em termos de operadores compostos:

$$\Psi^{n.m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I} = \sigma_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I}\ \phi^{n.m}_{\Delta^+,\Delta^-} \qquad \textbf{(IV.8)}$$

formado pelo produto de operadores $\sigma_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I}$, tipo ising (c = 1/2), com dimensões $\left(\Delta_I\,,\,\bar{\Delta}_I\right)$ e operadores $\phi^{n.m}_{\Delta^+,\Delta^-}$, tipo Gaussiano (c = 1), com dimensões (Δ^+ , Δ^-), que descrevem excitações do tipo onda de spin (n) e de vórtices (m)

$$\Delta_I,\bar{\Delta}_I = 0\,,\,1/2\,,\,1/16 \qquad \textbf{(IV.9a)}$$

$$\Delta^{\pm} = \frac{\left(n\sqrt{X_p} \pm \dfrac{m}{4\sqrt{X_p}}\right)^2}{2} \qquad \textbf{(IV.9b)}$$

Consequentemente as dimensões de escala e spin de composição (IV.8) são dadas por:

$$d^{n.m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I} = \Delta_I + \bar{\Delta}_I + n^2\,X_p + \frac{m^2}{16\,X_p} \qquad \textbf{(IV.10a)}$$

e

$$S^{n.m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I} = \Delta_I - \bar{\Delta}_I + \frac{|n\,.\,m|}{2} \qquad \textbf{(IV.10b)}$$

respectivamente. De fato podemos interpretar de forma fechada, todas as dimensões (IV.7) (relacionada com estados de momentum zero), como aparecendo de torres conformes de operadores primários $\Psi^{n,m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I}$. Por exemplo, mostramos na tabela (IV.10) mostramos a posição

(M e M' da eq. I.9) na torre conforme dos operadores primários $\Psi^{n,m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I}$, para algumas dimensões (IV.7). Mais geralmente de (IV.7) e da tabela (IV.10) vemos claramente que os operadores do tipo ising e Gaussiano se acoplam de uma maneira peculiar dependendo da paridade de n e m: $\Psi^{n,m}_{0,0}$ e $\Psi^{n,m}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$ para n,m = 2z' (par); $\Psi^{n,m}_{0,\frac{1}{2}}$ e $\Psi^{n,m}_{\frac{1}{2},0}$ para n,m = 2z + 1 (ímpar) e $\Psi^{n,m}_{\frac{1}{16},\frac{1}{16}}$ para n - m = 2z + 1 (ímpar).

Tabela IV.10. A localização (M e M' da eq. I.9) das dimensões $X_{n,m}$ e $Y_{n,m}$, dadas nas equações (IV.7), nas torres conformes de operadores primários $\Psi^{n,m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I}$ com spin $S^{n,m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I}$

	n	m	Δ_I	$\bar{\Delta}_I$	$\left\lvert\frac{n.m}{2}\right\rvert$	M	M'	$S^{n,m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I}$
$X_{0,0}$	0	0	0	0	0	0	0	0
$Y_{0,0}$	0	0	1/2	1/2	0	0	0	0
$X_{0,1}$	0	1	1/16	1/16	0	0	0	0
$X_{1,1}$	1	1	0	1/2	1/2	0	0	0
$Y_{1,1}$	1	1	1/2	0	1/2	0	1	1
$X_{2,1}$	2	1	1/16	1/16	1	0	1	1
$X_{2,2}$	2	2	0	0	2	0	2	2
$Y_{2,0}$	2	0	1/2	1/2	0	0	0	0

Estes resultados também predizem que o nível mais baixo (M = M' = 0), na torre conforme de operadores primários com spin não nulo, deverão corresponder a estados com momentum diferente de zero. De fato verificamos estas predições numericamente. Por exemplo, a energia, no setor n = 1, correspondente à configuração do tipo mostrado na figura (IV.6a) (momento $p = 2\pi/L$) produz a dimensão do campo primário $\Psi^{1,1}_{\frac{1}{2},0}$ com spin 1. Como outro exemplo típico mencionamos o estado com momento $p = 2\pi/L$ no setor n = 2 (figura IV.6b) o qual dá a dimensão do campo primário $\Psi^{2,1}_{\frac{1}{16},\frac{1}{16}}$ com spin 1. Na tabela (IV.11) mostramos nossas estimativas numéricas para estes dois estados de momento diferente de zero.

Tabela IV.11. Sequências (IV.4) correspondentes às dimensões $d^{2,1}_{\frac{1}{16},\frac{1}{16}}$ e $d^{1,1}_{\frac{1}{2},0}$ para $\gamma = \pi/6$ e $\gamma = \pi/5$. Estas dimensões são relacionadas com estados de momento $p = 2\pi/L$ e seus valores conjecturados são dados por (IV.10a)

	$d^{2,1}_{1/16,1/16}$		$d^{1,1}_{1/2,0}$	
L	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$
8	1.083 739	1.070 432	0.999 616	1.013 155
16	1.137 619	1.119 800	1.037 710	1.056 296
24	1.150 266	1.130 371	1.042 759	1.063 193
32	1.155 510	1.134 465	1.043 858	1.065 275
40	1.158 299	1.136 527	1.044 068	1.066 103
Extr.	1.166 6(5)	1.141(6)	1.041(6)	1.066(7)
Exact.	1.166...	1.141 666	1.041 666	1.066...

É interessante observar que as dimensões $X_{mar} = 2$, correspondente ao operador marginal, não é dada diretamente de (IV.10). Podemos tentar interpretar esta dimensão como o filhote $M = M' = 1$ (o correspondente nível deve ter momento zero, como já é sabido) do operador identidade $\Psi^{0,0}_{0,0}$ ou ainda como o primeiro nível ($M = M' = 0$) de um operador (sem spin) marginal de uma álgebra de Virasoro. Neste último caso, a fim de incluir este campo primário nas equações (IV.10) as dimensões Δ^+ e Δ^- do campo Gaussiano $\phi^{n,m}_{\Delta^+,\Delta^-}$ deverá ser interpretado como representações irredutíveis de uma álgebra maior que a álgebra de Virasoro. Do fato que quando $\gamma = 0$ a álgebra conjecturada por AFFLECK e HALDANE [47] é uma álgebra Kac-Mody SU(2) e esperamos, assim como no caso do modelo XXZ-S = 1/2 [24] que as dimensões (Δ^+ , Δ^-) do campo Gaussiano sejam

representações irredutíveis de uma álgebra de Kac-Moody U(1). Como foi discutido por CARDY [63] um operador marginal de uma teoria $c > 1$ não-decomponível, somente pode ocorrer através de uma combinação muito especial dos coeficientes da expansão do produto de operadores da álgebra de operadores associada. Isto não é o caso que ocorre no modelo XXZ-S = 1, pois das equações (IV.10) podemos decompor sua álgebra conforme com $c > 1$ em um produto de uma com $c = 1$ (que possue o operador marginal) e uma com $c = 1/2$.

Todos esses resultados indicam que o conteúdo de operadores do modelo XXZ-S = 1, com condições periódicas de contorno, é dado por:

$$\xi^{e}_{S=1}(\gamma)=\left\{\left[(0,0)_V+\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)_V\right]\otimes\sum_{\substack{n=2z\\ m=2z}}+\left[\left(0,\frac{1}{2}\right)_V+\left(\frac{1}{2},0\right)_V\right]\otimes\sum_{\substack{n=2z+1\\ m=2z+1}}\right.$$

$$\left.+\left(\frac{1}{16},\frac{1}{16}\right)_V\otimes\sum_{\substack{n=2z\\ m=2z+1}}+\left(\frac{1}{16},\frac{1}{16}\right)_V\otimes\sum_{\substack{n=2z+1\\ m=2z}}\right\}\left(\Delta_+,\Delta_-\right)_{k-m} \qquad \textbf{(IV.11)}$$

onde $\left(\Delta_I,\bar{\Delta}_I\right)_V$ e $\left(\Delta^+,\Delta^-\right)_{k-m}$ são repreentações irredutíveis da álgebra $c = 1/2$ (Ising) Virasoso e da álgebra Kac-Moody U(1) (Gaussiana), respectivamente.

E importante mencionar aqui que a equação (IV.11) fornece precisamente as dimensões que ocorrem no cenário de um gás de Coulomb generalizado proposto para este modelo por DI FRASCESCO, SALEUR e ZUBER [64].

As dimensões típicas de uma álgebra Z(2) (Ising) que ocorrem na equação (IV.11) podem ser identificadas [63], com o conteúdo de operadores $Z_2(r,s)$ do setor $s = 0$ ou 1 (paridade par ou impar) do modelo de Ising com condições de contorno toroidais $r = 0$

ou r = 1 (periódicas ou antiperiódicas). Usando-se tal identificação a equação (IV.11) pode ser escrita em uma forma mais simplificada:

$$\xi^{e}_{s=1}(Y) = \sum_{r=0}^{1} \sum_{s=0}^{1} z_2(r,s) \otimes \sum_{\substack{n=2z+r \\ m=2z+s}}^{1} \left(\Delta^{+}, \Delta^{-}\right)_{k-m} \qquad \textbf{(IV.12)}$$

IV.d.1.b. Limpar

Nesta seção calcularemos o conteúdo de operadores do modelo XXZ-S = 1, no caso em que o tamanho da rede é um número ímpar. Devido ao caráter antiferromagnético dos modelos XXZ-S , o estado fundamental para redes ímpares é frustado. Isto implica que, no limite do L infinito, o estado fundamental destas redes ímpares corresponde a um estado excitado com uma excitação topológica induzida por esta frustação. Neste sentido este efeito é similar aquele produzido pela introdução de uma outra condição de contorno toroidal, diferente da periódica, no caso de redes pares (ver seção IV.e).

Do mesmo modo como acontecia quando L era par, as dimensões obtidas extrapolando-se a sequência (IV.5) podem ser geradas a partir de torres conformes de operadores primários compostos $\Psi^{n,m}_{\Delta_I,\bar{\Delta}_I}$. Conforme foi discutido na seção (IV.b.3) o estado fundamental, neste caso, ocorre no setor n = 1 e tem momento zero (ver figura IV.7a)). A sua dimensão, obtida da sequência (IV.5), é dada por $d^{1,0}_{\frac{1}{16},\frac{1}{16}}$. A energia mais baixa no setor n = 0 (ver figura IV.7b), que é associada a um estado de momento zero, nos dá a dimensão $d^{0,1}_{\frac{1}{16},\frac{1}{16}}$. Os estados de momento não nulos do setor n = 1 e n = 0 são mostrados na figura (IV.7c) e (IV.7d) e nos dão as dimensões $d^{1,1}_{0,0}$ e $d^{0,0}_{\frac{1}{2},0}$ respectivamente. Na tabela (IV.12)

mostramos as sequências (IV.5) correspondentes às dimensões mencionadas acima.

Tabela IV.12a-b. As sequências (IV.5) para o spin $s = 1$ com $\gamma = \pi/6$ e $\gamma = \pi/5$ em uma rede com um número ímpar de sítios. **a)** sequências correspondentes a $d^{1,0}_{\frac{1}{16},\frac{1}{16}}$ e $d^{0,1}_{\frac{1}{16},\frac{1}{16}}$; **b)** sequências correspondentes a $d^{1,1}_{0,0}$ e $d^{0,0}_{\frac{1}{2},0}$ (veja texto)

(a)

	$d^{1,0}_{1/16,1/16}$		$d^{0,1}_{1/16,1/16}$	
L	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$
7	0.274 186	0.261 698	0.385 096	0.428 289
15	0.283 218	0.268 830	0.421 333	0.471 938
23	0.286 117	0.271 035	0.436 461	0.489 223
31	0.287 539	0.272 094	0.445 418	0.498 803
35	0.288 009	0.272 440	0.448 654	0.502 195
Extr.	0.291 66(6)	0.274 9(9)	0.500(3)	0.541 6(2)
Exact.	0.291 66...	0.275	0.5	0.541 666

(b)

	$d^{1,1}_{0,0}$		$d^{0,0}_{1/2,0}$	
L	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$
7	0.549 052	0.565 966	0.511 146	0.506 089
15	0.547 987	0.568 587	0.507 253	0.503 801
23	0.546 277	0.568 179	0.505 037	0.502 441
31	0.545 247	0.567 833	0.503 828	0.501 738
35	0.544 882	0.567 702	0.503 413	0.501 506
Extr.	0.541(5)	0.566(5)	0.499 9(4)	0.499 9(4)
Exact.	0.541 66...	0.566...	0.5	0.5

Analisando as amplitudes acima obtidas, nossos resultados numéricos indicam que, no caso de redes ímpares, o conteúdo de operadores que descreve a criticalidade do modelo XXZ-S = 1 é dado por:

$$\xi^{0}_{S=1}(\gamma) = \left\{ \left[\left(0, \frac{1}{2}\right)_V + \left(\frac{1}{2}, 0\right)_V \right] \otimes \sum_{\substack{n=2z \\ m=2z}} + \left[(0,0)_V + \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)_V \right] \otimes \sum_{\substack{n=2z+1 \\ m=2z+1}} \right.$$

$$\left. + \left(\frac{1}{16}, \frac{1}{16}\right)_V \otimes \sum_{\substack{n=2z \\ m=2z+1}} + \left(\frac{1}{16}, \frac{1}{16}\right)_V \otimes \sum_{\substack{n=2z+1 \\ m=2z}} \right\} \left(\Delta^{+}, \Delta^{-}\right)_{k-m} \qquad \textbf{(IV.13)}$$

onde a notação é a mesma da equação (IV.11). O resultado dado pela equação (IV.13) está em contradição com os cálculos de Di FRANCESCO et al [64], baseado no gás de Coulomb generalizado mostrando ser incorreta a conjectura destes autores, no caso de redes ímpares.

IV.d.2. Modelo XXZ-S com spin s = 3/2

IV.d.2.a. L par

Vamos inicialmente nos restringir ao caso de redes pares. Usando o estado de energia mais baixa, em cada setor n (momento zero - veja Figura 3a-c), na sequência (IV.4) obtemos as dimensões:

$$x_{n,0} = n^2 X_p + t_n \qquad \textbf{(IV.14a)}$$

onde

$$X_p = \frac{\pi - 3\gamma}{6\pi} \qquad \textbf{(IV.14b)}$$

e $t_n = 0$ ou $2/15$ dependendo se n é múltiplo de 3 ($n = 3Z$) ou não ($n = 3Z + 1$ ou $n = 3Z + 2$), respectivamente. Assim como no caso do spin $s = 1$ estas dimensões dependem continuamente de γ. Na tabela (IV.13) mostramos algumas das nossas estimativas numéricas, para estas dimensões. As constantes t_n acima introduzidas coincidem com algumas das dimensões que aparecem na tabela de Kac (I.3) de uma álgebra com carga central $c = 4/5$. Como é o caso do modelo de Potts de 3-estados.

Tabela IV.13. Sequências $\Lambda_L^0(\gamma, n)$ (IV.4) associadas com o estado de mais baixa energia dos setores $n = 1, 2$ e 3 do spin $3/2$ para $\gamma = \pi/3\sqrt{2}$ e $\gamma = \pi/6$. Os valores conjecturados são dados por $X_{1,0}$, $X_{2,0}$ e $X_{3,0}$ em (IV.14)

	$\Omega_L^0(\gamma,1)$		$\Omega_L^0(\gamma,2)$		$\Omega_L^0(\gamma,3)$	
L	$\gamma = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{3\sqrt{2}}$	$\gamma = \frac{\pi}{6}$
8	0.196 617	0.236 134	0.339 730	0.474 425	0.441 280	0.709 246
16	0.189 050	0.226 211	0.333 608	0.472 258	0.439 591	0.733 202
24	0.186 825	0.223 184	0.331 931	0.471 192	0.439 384	0.740 277
32	0.185 743	0.221 690	0.331 139	0.470 505	0.439 335	0.743 442
40	0.185 096	0.220 790	0.330 672	0.470 019	0.439 321	0.745 177
Extr.	0.182 1(3)	0.216 66(5)	0.328 5(8)	0.466 6(7)	0.439 33(8)	0.749 9(5)
Exact.	0.182 149	0.2166...	0.328 595	0.466...	0.439 340	0.75

Os nossos resultados para o spin $s = 1$ e o fato que a anomalia conforme para o modelo XXZ-$S = 3/2$ é $c = 9/5 = 1 + 4/5$, sugerem-nos interpretar os operadores do modelo com spin $s = 3/2$ em termos de operadores compostos:

$$\Psi^{n.m}_{\Delta_3, \bar{\Delta}_3} = \sigma_{\Delta_3, \bar{\Delta}_3} \; \phi^{n.m}_{\Delta^+, \Delta^-} \qquad \textbf{(IV.15a)}$$

formado pelo produto de um operador do tipo Z(3) (c = 4/5) $\sigma_{\Delta_3,\bar{\Delta}_3}$, com dimensões $\left(\Delta_3, \bar{\Delta}_3\right)$ e por um operador Gaussiano (c = 1) $\phi^{n,m}_{\Delta^+,\Delta^-}$ com dimensões (Δ^+ , Δ^-) dadas por:

$$\Delta^{\pm} = \frac{\left(n\sqrt{X_p} \pm \frac{m}{6\sqrt{X_p}}\right)^2}{2} \qquad \textbf{(IV.15b)}$$

Da equação (I.3) as dimensões de escala possíveis para um campo com simetria z(3) (com c = 4/5) são dadas por:

$$\Delta_3 = \bar{\Delta}_3 = 0, \frac{1}{40}, \frac{1}{15}, \frac{1}{8}, \frac{2}{5}, \frac{2}{3}, \frac{21}{40}, \frac{7}{5}, \frac{13}{8}, 3 \qquad \textbf{(IV.15c)}$$

de forma que a dimensão e o spin do operador $\Psi^{n,m}_{\Delta_3,\bar{\Delta}_3}$ serão dadas por:

$$d^{n,m}_{\Delta_3,\bar{\Delta}_3} = \Delta_3 + \bar{\Delta}_3 + n^2 X_p + \frac{m^2}{36 X_p} \qquad \textbf{(IV.15d)}$$

e

$$s^{n,m}_{\Delta_3,\bar{\Delta}_3} = \Delta_3 - \bar{\Delta}_3 + \frac{|n \cdot m|}{3} \qquad \textbf{(IV.15e)}$$

respectivamente. Consequentemente as dimensões (IV.10) podem ser identificadas como aquelas associadas aos operadores (sem spin) $\Psi^{n,0}_{0,0}$ ou $\Psi^{n,0}_{\frac{1}{15},\frac{1}{15}}$ dependendo se n é múltiplo de 3 ou não, respectivamente.

Os estados excitados, com momento zero, em um dado setor n nos fornecem várias famílias de dimensões. Por exemplo, estados com distribuição de zeros dadas nas figuras (IV.5a-f) nos dão as dimensões $d^{0,-1}_{\frac{1}{15},\frac{1}{15}}$, $d^{0,1}_{\frac{1}{15},\frac{1}{15}}$, $d^{0,2}_{\frac{1}{15},\frac{1}{15}}$, $d^{0,0}_{\frac{2}{15},\frac{2}{15}}$, $d^{0,0}_{\frac{7}{5},\frac{7}{5}}$ e

$X_{mar} = 2$, respectivamente. Na tabela (IV.14) e (IV.15) mostramos algumas sequências (IV.4) obtidas de estudos com momento nulo.

Das amplitudes calculadas numericamente, e a nossa experiência do modelo com spin $s = 1$ indicam o seguinte conteúdo de operadores para o modelo com spin $s = 3/2$, com condições periódicas de contorno:

$$\xi^{e}_{s=3/2}(\gamma) = \sum_{r=0}^{2} \sum_{s=0}^{2} z_3(r,s) \otimes \sum_{\substack{n=3z+r \\ m=3z+s}} (\Delta_+, \Delta_-)_{k-m} \qquad \textbf{(IV.16a)}$$

onde:

$$z_3(0,0) = (0,0)_v + \left(\frac{2}{5},\frac{2}{5}\right)_v + \left(\frac{2}{5},\frac{7}{5}\right)_v + \left(\frac{7}{5},\frac{7}{5}\right)_v + \left(\frac{7}{5},\frac{2}{5}\right)_v$$

$$+ (3,0)_v + (0,3)_v + (3,3)_v \qquad \textbf{(IV.16b)}$$

$$z_3(1,1) = z_3(2,2) = \left(\frac{1}{15},\frac{2}{5}\right)_v + \left(\frac{1}{15},\frac{7}{15}\right)_v + \left(\frac{2}{3},0\right)_v + \left(\frac{2}{3},3\right)_v \qquad \textbf{(IV.16c)}$$

$$z_3(1,2) = z_3(2,1) = \left(\frac{2}{5},\frac{1}{15}\right)_v + \left(\frac{7}{5},\frac{1}{15}\right)_v + \left(0,\frac{2}{3}\right)_v + \left(3,\frac{2}{3}\right)_v \qquad \textbf{(IV.16d)}$$

$$z_3(1,0) = z_3(0,1) = z_3(0,2) = z_3(2,0) = \left(\frac{1}{15},\frac{1}{15}\right)_v + \left(\frac{2}{3},\frac{2}{3}\right)_v \qquad \textbf{(IV.16e)}$$

As dimensões $\left(\Delta_3, \bar{\Delta}_3\right)_V$ e $\left(\Delta^+, \bar{\Delta}^-\right)_{k-m}$ são representações irredutíveis da álgebra de Virasoro $c = 4/5$ (Potts - 3 estados) e da álgebra Kac-Moody U(1) (Gaussiana), respectivamente.

Tabela IV.14. Sequências (IV.4) associadas a estados de momento zero do spin $s = 3/2$ com $\gamma = \pi/6$. As dimensões conjecturadas são dadas pela equação (IV.15d). A última coluna corresponde ao filhote $M = 0$, $M' = 1$ (ver eq. I.9) do operador primário com spin 1 e dimensão $d^{1,1}_{0,2/3}$

L	$d^{0,-1}_{1/15,1/15}$	$d^{0,1}_{1/15,1/15}$	$d^{2,0}_{2/3,2/3}$	$d^{1,1}_{1/15,2/5}$	$d^{3,0}_{2/5,2/5}$	$d^{1,1}_{0,2/3}+1$
8	0.432 962	0.612 011	1.470 906	1.045 961	1.421 125	1.629 843
16	0.441 860	0.548 797	1.591 220	0.998 577	1.509 423	1.829 941
24	0.446 560	0.526 212	1.624 541	0.973 072	1.531 421	1.624 541
32	0.449 455	0.514 312	1.638 920	0.952 199	1.540 146	1.638 920
40	0.451 451	0.506 849	1.646 611	0.947 531	1.544 455	1.646 611
Extr.	0.466(8)	0.466(7)	1.666(4)	0.883(7)	1.55(2)	1.666(4)
Exact.	0.466...	0.466...	1.666...	0.8833...	1.55	1.666...

Tabela IV.15. Sequências (IV.4) correspondentes às dimensões de escala $d^{0,0}_{\frac{2}{5},\frac{2}{5}}$ e X_{mar} para o spin $s = 3/2$ com $\gamma = \pi/6$ e $\gamma = \pi/5$. Os valores conjecturados são $d^{0,0}_{\frac{2}{5},\frac{2}{5}} = 4/5$ e $X_{mar} = 2$ para todos os valores de γ.

	$d^{0,0}_{2/5,2/5}$		X_{mar}	
L	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$	$\gamma = \frac{\pi}{6}$	$\gamma = \frac{\pi}{5}$
8	0.767 180	0.803 640	1.668 626	1.757 219
16	0.793 840	0.813 440	1.885 240	1.916 682
24	0.800 091	0.812 790	1.914 165	1.957 605
32	0.802 244	0.811 422	1.941 377	1.974 075
40	0.803 107	0.810 198	1.956 563	1.982 381
Extr.	0.80(2)	0.80(1)	1.999(2)	1.999 9(3)
Exact.	0.8	0.8	2	2

Como no modelo XXZ-S = 1, as dimensões dadas pelas equações (IV.16), são aquelas que aparecem na função de partição do gás de Coulomb generalizado recentemente introduzido por Di FRANCESCO et al [64]. É importante observar que somente um sub-conjunto de todas as possíveis dimensões (IV.15c) aparecem nas equações (IV.16b-e). De fato, de modo análogo ao caso do modelo XXZ-S = 1, as dimensões $z_3(r, s)$ são exatamente o conteúdo de operadores do setor de carga s (0, 1 ou 2) do modelo de Potts com 3 estados (Z(3)) com condições de contorno toroidais $s_{L+1} = s_1 e^{i\frac{2\pi}{3}r}$ (r = 0, 1 e 2), onde s_i são operadores com simetria z(3) [65].

IV.d.2.a. L ímpar

Concluímos esta seção discutindo o conteúdo de operadores obtido no caso de redes ímpares. Como no caso do modelo XXZ-S = 1, devido ao caráter antiferromagnético das interações, o estado fundamental é frustado. O estado fundamental tem momento não nulo e pertence ao setor n = 3/2. Usando as sequências (IV.5) verificamos que sua dimensão é dada por $d^{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}_{\frac{1}{15},\frac{1}{15}}$. Por outro lado o estado de energia mais baixa no setor n = 1/2 tem a dimensão $d^{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}_{\frac{1}{15},\frac{1}{15}}$.

As equações do Bethe ansatz para redes ímpares são mais difíceis de serem resolvidas numericamente e calculamos somente poucas lacunas de massa. As amplitudes por nós calculadas juntamente com os resultados da equação (IV.13) para o spin s = 1 (L ímpar) e (IV.16a) para o spin 3/2 (L par) indicam que o conteúdo de operadores para o spin s = 3/2, no caso de redes ímpares é dado por:

$$\xi^{\upsilon}_{s=3/2}(\gamma) = \sum_{r=0}^{2}\sum_{s=0}^{2} z_3(r,s) \otimes \sum_{\substack{n=3z+r+3/2 \\ m=3z+s+3/2}} \left(\Delta^{+},\Delta^{-}\right)_{k-m} \qquad \textbf{(IV.17)}$$

onde a notação é a mesma que a da equação (IV.16).

IV.e. Estados com condições especiais de contorno

Como foi mencionado no capítulo II (seção II.c) introduzindo-se condições de contorno especiais (que dependem de um ângulo ϕ) o modelo XXZ-S ainda permanece exatamente integrável. Nesta seção analisaremos, para alguns estados, a dependência de suas respectivas dimensões em relação a este ângulo ϕ, que especifica a

condição de contorno. Iniciaremos esta análise estudando o efeito deste ângulo ϕ no estado fundamental.

IV.e.1. Estado fundamental

Como foi visto na seção (IV.b.1) o estado fundamental, quando $\phi = 0$, ocorre no setor $n = 0$ (L par) e sua distribuição de zeros é constituída por um mar de 2s-strings dispostos simetricamente em relação ao eixo imaginário. No caso de $\phi = 0$, esta distribuição será assimétrica em relação ao eixo imaginário, de forma semelhante ao caso quando temos momento não nulo. Procedendo da mesma forma que na seção (IV.c), supomos que o estado fundamental, para L grande, tenha o seguinte comportamento assintótico:

$$E_0(\gamma, d, L) - e_\infty(\gamma) = -\frac{\pi \hat{c}(\phi)}{6 L^2} + 0\left(L^{-2}\right) \qquad \textbf{(IV.18)}$$

onde $\hat{c}(0) = \dfrac{3s}{s+1}$.

Na tabela (IV.15), usando a equação (IV.18) apresentamos várias estimativas de $\hat{c}(\phi)$ para o spin $s = 1$, enquanto na tabela (IV.16) mostramos outras estimativas de $\hat{c}(\phi)$ para spin $s = 3/2$. Nossos resultados numéricos indicam que $\hat{c}(\phi)$, para o spin $s = 1$, comporta-se como:

$$\hat{c}_0(\phi) = \frac{3}{2} - X_{0,\phi/\pi} \; ; \; X_{0,\phi/\pi} = \frac{(\phi/\pi)^2}{16 X_p} \; , \; X_p = \frac{\pi - 2\gamma}{4\pi} \qquad \textbf{(IV.19a)}$$

e para o spin $s = 3/2$ como

$$\hat{c}_0(\phi) = \frac{9}{5} - X_{0,3\phi/2\pi} \; ; \; X_{0,3\phi/2\pi} = \frac{\left(\frac{3}{2}\frac{\phi}{\pi}\right)^2}{36 X_p} \; , \; X_p = \frac{\pi - 3\gamma}{6\pi} \qquad \textbf{(IV.19b)}$$

Tabela IV.15. Sequências para spin $s = 1$ de $\hat{c}(\phi)$ no caso do a) $\phi = \pi/5$ e $\gamma = \pi/6$, $\pi/5$ e $\pi/4$, b) $\gamma = \pi/4$ e $\phi = \pi/8$, $\pi/7$ e $\pi/6$. Os valores conjecturados são dados pela equação (IV.20)

(a)

L	γ: $\pi/6$	$\pi/5$	$\pi/4$
8	1.363 825	1.341 012	1.293 804
16	1.333 741	1.312 015	1.268 835
24	1.327 335	1.306 027	1.264 052
32	1.324 807	1.303 742	1.262 332
40	1.323 508	1.302 610	1. 26 152
Extr.	1.319 9(8)	1.299 9(8)	1.259 9(8)
Exact.	1.32	1.3	1.26

(b)

L	ϕ: $\pi/8$	$\pi/7$	$\pi/6$
8	1.445 762	1.415 913	1.369 953
16	1.416 610	1.387 603	1.342 920
24	1.411 011	1.382 169	1.337 735
32	1.408 994	1.380 212	1.335 868
40	1.408 392	1.379 286	1.334 985
Extr.	1.406 2(4)	1.377 5(4)	1.333 3(2)
Exact.	1.406 25	1.377 551	1.3

Tabela IV.16. Sequências (IV.18) para spin $s = 3/2$ de $\hat{c}(\phi)$ no caso do a) $\phi = \pi/6$ e $\gamma = \pi/6$, $\pi/5$ e $\pi/4$, b) $\gamma = \pi/5$ e $\phi = \pi/8$, $\pi/7$ e $\pi/5$. Os valores conjecturados são dados pela equação (IV.20)

(a)

L	γ: $\pi/6$	$\pi/5$	$\pi/4$
8	1.607 641	1.533 378	1.325 157
12	1.578 457	1.508 804	1.311 644
20	1.562 0691	1.495 712	1.304 476
28	1.556 969	1.491 904	1.302 400
32	1.555 621	1.490 942	1.301 877
Extr.	1.550 (1)	1.48 75(1)	1.300 0(1)
Exact.	1.55	1.48 75	1.3

(b)

L	ϕ: $\pi/8$	$\pi/7$	$\pi/5$
8	1.676 560	1.620 160	1.389 761
12	1.648 573	1.593 540	1.368 421
20	1.633 634	1.597 341	1.357 079
28	1.629 278	1.575 204	1.353 788
32	1.628 176	1.574 159	1.352 958
Extr.	1.624 2(4)	1.570 4(1)	1.350 0(1)
Exact.	1.624 188	1.570 408	1.35

Os nossos resultados (IV.19) para o spin $s = 1$ e $3/2$ e aquele obtido por ALCARAZ et al [24] para o spin $s = 1/2$, indicam-nos que, em geral para qualquer spin s, a dependência de $\hat{c}(\phi)$, com o spin s e o ângulo ϕ, é dada por

$$\hat{c}(\phi) = \frac{3s}{s+1} - X_{0,s\phi/\pi} \tag{IV.20a}$$

onde

$$X_{0,s\phi/\pi} = \frac{(s\phi/\pi)^2}{(4s)^2 X_p}, \quad X_p = \frac{\pi - 2s\gamma}{4s\pi} \tag{IV.20b}$$

Para finalizarmos esta seção, notamos que fixando a relação $\phi = 2\gamma$, entre ϕ e γ, escolhendo-se $\gamma = \frac{\pi}{m+2s}$, e substituindo-se estas relações nas equações (IV.10) teremos que

$$c_0(\phi) = \frac{3s}{s+1}\left(1 - \frac{4(s+1)}{m(m+2s)}\right) \tag{IV.21}$$

que é justamente a anomalia conforme (I.7) ($k = 2s$) das álgebras recentemente propostas [17] e mencionadas na introdução desta tese. Esta relação entre o modelo XXZ-S e estas novas álgebras [29,32] será discutido com mais detalhes na seção (IV.f).

IV.e.2. Estados excitados

Nesta seção concentraremos a nossa análise nos estados com energia mais baixa nos setores $n = 0$. Como no estado fundamental, a introdução de uma fase ϕ implica numa distribuição de zeros assimétrica. Com o objetivo de estimarmos as dimensões

associadas a estes estados de energia $E_n(\gamma, L, \phi)$, no caso destas condições de contorno especiais, definimos como na seção (IV.d) as estimativas:

$$\Lambda_L^{\phi}(\gamma, n) = \frac{L}{2\pi\xi}\left[E_n(\gamma, L, \phi) - E_0(\gamma, L)\right] \qquad \textbf{(IV.22)}$$

onde, como antes, ξ é dado por (IV.2) e $E_0(\gamma, L)$ é a energia do estado fundamental do sistema de tamanho L.

Na tabela (IV.17) apresentamos tais estimativas para os setores $n = 1$ e 2 do modelo com spin $s = 1$. Na tabela (IV.18) mostramos as sequências (IV.22) para o modelo com spin $s = 3/2$ no setor $n = 1$.

Extrapolando-se as sequências (IV.22) nossos resultados numéricos indicam que as dimensões associadas aos estados de mais baixa energia do setor n do modelo com spin $s = 1$ são dadas por:

$$X_{n,0} = X_{n,\phi/\pi} = n^2 X_p + \frac{(\phi/\pi)^2}{16 X_p} + \frac{k}{8} \qquad \textbf{(IV.23a)}$$

onde k e X_p são definidos como na equação (IV.66). Analogamente no caso do spin $s = 3/2$ nossos resultados indicam

$$X_{n,0}(\gamma) = X_{n,3\phi/\pi} = n^2 X_p + \frac{(3\phi/2\pi)^2}{36 X_p} + t_n \qquad \textbf{(IV.23b)}$$

onde t_n foi definido na seção (IV.d.2a), enquanto X_p é dado pela equação (IV.14b).

Tabela IV.17. Sequências (IV.22) para spin $s = 1$, $\gamma = \pi/6$ e $\phi = \pi/8$, $\pi/6$ no caso de a) $n = 1$ e b) $n = 2$. Os valores conjecturados são dados pela equação (IV.23a)

(a)

L	ϕ: $\pi/8$	$\pi/6$
8	0.291 694	0.296 471
12	0.287 795	0.292 685
20	0.285 074	0.290 039
28	0.284 002	0.288 996
32	0.283 678	0.288 680
Extr.	0.281 5(0)	0.286 57(3)
Exact.	0.281 510	0.286 574

(b)

L	ϕ: $\pi/8$	$\pi/6$
8	0.631 712	0.636 451
16	0.653 101	0.657 840
24	0.660 015	0.664 711
32	0.663 335	0.668 020
40	0.665 305	0.669 951
Extr.	0.672 5(2)	0.677 0(8)
Exact.	0.672 525	0.677 083

Tabela IV.18. Sequências (IV.22) para spin $s = 3/2$, $\gamma = \pi/6$ e $\phi = \pi/8$ e $\pi/6$ no caso de $n = 1$. Os valores conjecturados são dados pela equação (IV.23b)

L	ϕ: $\pi/8$	$\pi/6$
8	0.247 072	0.255 603
12	0.240 514	0.249 183
20	0.235 726	0.244 541
28	0.233 755	0.242 637
32	0.233 143	0.242 047
Extr.	0.228 4(2)	0.237 5(4)
Exact.	0.228 385	0.237 5

A discussão mais completa dos estados excitados, no caso de condições especiais de contorno, bem como as dimensões de escala associadas estão sendo analisadas no momento e serão publicadas em um trabalho posterior [32].

IV.f. Correções de tamanho finito

Nesta seção discutiremos brevemente algumas das correções dominantes que aparecem nas equações (I.9) e (I.11) devido ao tamanho finito da rede (L). As relações (I.9) e (I.11) são válidas apenas no limite $L \to \infty$. Para L finito a energia E_α (L) correspondente a um operador O_α, com dimensão X_α, tem a correção R_α (L), isto é:

$$\frac{E_\alpha(L)}{L} = e_\infty + \frac{2\pi\xi}{L^2}\left(X_\alpha - \frac{c}{12} + R_\alpha(L)\right) \qquad \textbf{(IV.24)}$$

Estas correções aparecem [6] devido ao fato da Hamiltoniana que descreve o modelo, para L finito, desviar-se da Hamiltoniana invariante conforme H^*, da teoria contínua, por termos que envolvem operadores irrelevantes, isto é:

$$H = H^* + \sum_{\beta'} a_\beta \, O_\beta \qquad \textbf{(IV.25)}$$

onde O_β são operadores irrelevantes com dimensão de escala $X_\beta > 2$ e a_β são constantes não conhecidas em princípio.

Aplicando métodos padrões de teoria de perturbação [19,24,66] (até 2ª ordem), as correções $R_\alpha(L)$ na equação (IV.24) podem ser expressas em termos de coeficientes $c_{\alpha,\beta,\gamma}$ da expansão do produto de operadores [62,67]. Assumindo condições periódicas de contorno $R_\alpha(L)$ pode ser escrito como:

$$R_\alpha(L) = 2\pi \sum_\beta a_\beta \, c_{\alpha,\alpha,\beta} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{X_\beta - 2} +$$

$$+ 4\pi^2 \sum_{\beta,\beta',\alpha'}{}^{\backslash} \frac{a_\beta \, a_{\beta'} \, c_{\alpha',\alpha,\beta} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^{X_\beta + X_{\beta'} - 4}}{X_\alpha - X_{\alpha'}} \qquad \textbf{(IV.26)}$$

onde o termo $\alpha' = \alpha$, é excluído do segundo termo da soma acima. Consequentemente podemos entender, da análise dos auto estados para tamanho finito L, quais entre os operadores irrelevantes governam as correções devido ao tamanho finito.

Como o operador identidade sempre existe para qualquer teoria conforme, operadores irrelevantes pertencentes ao seu bloco conforme deverão estar presentes na equação (IV.26) [14]. A correção dominantes destes operadores tem dimensão $X_I = 4$, dando um termo $0(L^{-2})$ em $R_\alpha(L)$. Outros operadores irrelevantes que entram na equação (IV.26) vai depender da particular Hamiltoniana que estamos considerando e das simetrias e regras de seleção que determinam os coeficientes $c_{\alpha,\beta,\gamma}$ da expansão do produto de operadores. A principal questão agora é identificarmos, dos nossos resultados para tamanho finito, os operadores irrelevantes que aparecem em (IV.25).

Vamos inicialmente discutir as correções mencionadas acima para as auto energias derivadas da hipótese de string (veja Apêndice A, ou seção IV.a). Da equação (IV.1a) os primeiros dois termos da correção $R_\alpha(L)$ ($X_0 = 0$ em IV.24), correspondentes ao estado fundamental E_0^{st}, são $0(L^{-2})$, $0(L^{-2/s})$ e $0(L^{-4\gamma/(\pi-2s\gamma)})$. Como já foi discutido, não esperamos que as amplitudes correspondentes a estas potências, sejam as mesmas das energias verdadeiras, obtidas sem admitir qualquer hipótese de string. Por outro lado devido ao fato de a hipótese de string perceber somente a parte Gaussiana (dá $c = 1$ para todo spin s, por exemplo), pode acontecer que mesmo certas potências de L não sejam corretamente estimadas por esta hipótese. Por exemplo a nossa análise numérica das energias corretas, revelam que o termo $0(L^{-4/3})$, para todo γ, predito para o estado fundamental do spin $s = 3/2$ não estão presentes. Por outro lado outros termos não preditos por (IV.1a) e (IV.1b) estão presentes nas correções de tamanho finito, para as energias verdadeiras.

As correções dominantes devido as energias corretas, podem ser estimadas de vários modos. Supondo na equação (IV.24) que:

$$R_\alpha(L) = B_\alpha L^{-\omega_\alpha} \qquad \textbf{(IV.27)}$$

podemos calcular a potência ω_α do comportamento para L grande da sequência:

$$\omega_\alpha(L, L') = \frac{\ln\left(\dfrac{R_\alpha(L)}{R_\alpha(L')}\right)}{\ln\left(\dfrac{(L')}{(L)}\right)} \qquad \textbf{(IV.28)}$$

Na figura (IV.9) mostramos, para vários valores de γ, os valores extrapolados para ω_0 e ω_1, para o estado fundamental e para o estado de energia mais baixa no setor $n = 1$ do spin $s = 1$. Estes resultados numéricos indicam que, para o estado fundamental:

$$W_0 = \begin{cases} \dfrac{4\gamma}{(\pi - 2\gamma)} & \text{se } \gamma < \pi/4 \\ 2 & \text{se } \gamma > \pi/4 \end{cases} \qquad \textbf{(IV.29c)}$$

enquanto que para o estado de mais baixa energia no setor $n = 1$

$$W_1 = \begin{cases} \dfrac{4\gamma}{(\pi - 2\gamma)} & \text{se } \gamma < \pi/6 \\ 1 & \text{se } \gamma > \pi/6 \end{cases} \qquad \textbf{(IV.29b)}$$

Os resultados mencionados até o presente juntamente com as equações (IV.1) induzem-nos a conjectura que o termo de correção $0\,(L^{-4\gamma/(\pi-2s\gamma)})$ está sempre presente nas equações (IV.24). Este termo surge em 2ª ordem na equação (IV.26) devido ao operador irrelevante:

$$X = \frac{\pi}{s(\pi - 2s\gamma)} + \frac{2s - 1}{s} \qquad \textbf{(IV.30)}$$

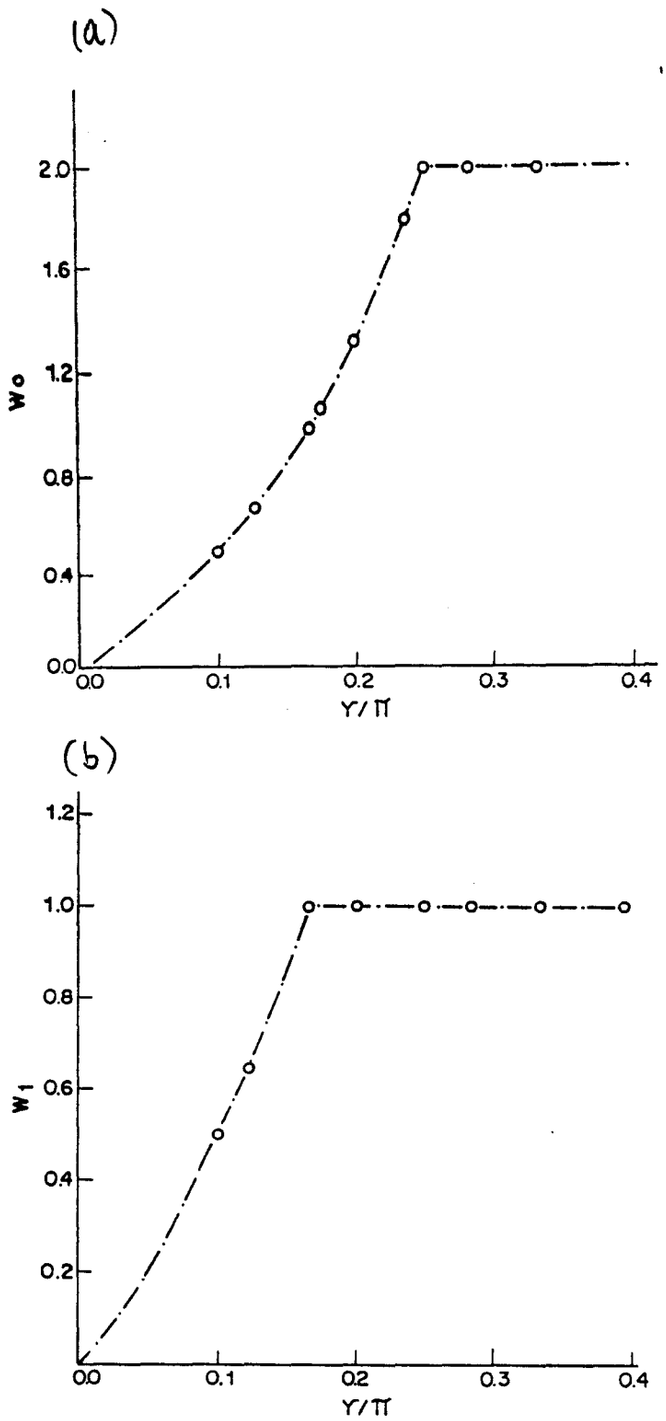

Figura IV.9. Gráfico das potências W_0 (fig. a) e W_1 (Fig. b). Os círculos correspondem aos valores extrapolados da sequência (IV.28) e as linhas quebradas são dadas por (IV.29)

Como no modelo com spin $s = 1/2$ [24] os resultados (IV.29) indicam que a primeira correção na equação (IV.26), devido a este operador, é nula. A dimensão dada pela equação (IV.30) corresponde ao operado primário $\Psi^{0,2}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$ em (IV.10a) para o spin $s = 1$ e $\Psi^{0,2}_{\frac{2}{3},\frac{2}{3}}$ em (IV.15d) para o spin $s = 3/2$. É importante observar que quando $X \to 2$ $Y \to 0$. Este fato implica que ordens maiores de perturbação na equação (IV.26) tornam-se importantes, quando $Y \to 0$. Especificamente no ponto $Y = 0$ um número infinito destes termos em (IV.26) tornam-se igualmente importantes e as correções se somam dando origem a correções logarítmicas, como foi discutido no capítulo III.

A correção $0(L^{-1})$ aparecendo em (IV.29b) foi predida em (IV.1b) e pode surgir em primeira ordem devido a um operador irrelevante com dimensão $X_{\alpha} = 3$. Tal operador ocorre de uma combinação entre o operador marginal (Gaussiano), com dimensões $(\Delta, \bar{\Delta}) = (1, 1)$, e operador (Ising) $(\Delta_I, \Delta_I^-) = (1/2, 1/2)$.

Uma completa descrição das correções devido ao tamanho finito da rede para estes modelos XXZ-S é um ponto interessante para um trabalho futuro. É interessante saber qual a particular combinação de operadores Gaussianos e parafermiônicos com simetria Z(2s) que estarão presentes em (IV.25).

IV.g. Comentários e Conclusões

O objetivo central deste capítulo foi o de estudar as propriedades críticas dos modelos XXZ-S. Concluiremos este capítulo com alguns comentários e generalizações.

Os resultados mostrados nas tabelas (IV.4) e (IV.5), para a anomalia conforme, bem como aqueles exibidos nas tabelas (IV.6) - (IV.14), para as dimensões de escala, claramente indicam que as relações (I.9) e (I.1), derivadas assumindo a invariância conforme na criticalidade, são consistentes para todos os valores de γ, mesmo para valores irracionais de $p = \pi/\gamma$. O valor da anomalia conforme é $c = 3s/1+s$, para todos os valores de γ, $0 \leq \gamma \leq \pi/2s$, e as dimensões de escala variam continuamente com anisotropia γ.

Os resultados da seção IV.a-d para o spin $s = 1$ e $s = 3/2$, sugerem nos generalizar estes resultados para o caso de spin s arbitrário. A anomalia conforme

$$c = \frac{3s}{s+1} = 1 + \frac{2(2s-1)}{2s+2} \qquad \textbf{(IV.31)}$$

pode ser decomposta na soma da anomalia conforme de uma álgebra conforme com $c = 1$ (tipo Gaussiana), e na de uma álgebra Z(2s)-Fateev-Zamolodchikov (veja I.5). De (IV.31) esperamos, do mesmo modo como no caso do spin $s = 1$ e $s = 3/2$, que o modelo XXZ-S para s arbitrário, seja descrito em termos de operadores compostos

$$\Psi^{n,m}_{\Delta_{2s},\bar{\Delta}_{2s}} = \sigma_{\Delta_{2s},\bar{\Delta}_{2s}} \; \phi^{n,m}_{\Delta^+,\Delta^-} \qquad \textbf{(IV.32)}$$

formado pelo produto de um operador com simetria Z(2s) $\sigma_{\Delta_{2s},\bar{\Delta}_{2s}}$ com dimensões $\Delta_{2s},\bar{\Delta}_{2s}$ $\left(c = (2s-1)/(s+1)\right)$, por um operador Gaussiano ($c = 1$) descrevendo exitações com número de ondas de spin n e vorticidade m, cujas dimensões são dadas por:

$$\Delta^{\pm} = \frac{\left(n\sqrt{X_p} \pm \dfrac{m}{4s\sqrt{X_p}}\right)^2}{2}, \quad X_p = \frac{\pi - 2s\gamma}{4\pi s} \qquad \textbf{(IV.33)}$$

O conteúdo de operadores, para redes pares, dados por (IV.12) para o spin 1 e (IV.16a) para o spin 3/2, levam-nos a conjecturar que para o caso de spin s geral o conteúdo de operadores toma a forma:

$$\xi_s^e(\gamma) = \sum_{r=0}^{2s-1} \sum_{\delta=0}^{2s-1} Z_{2s}(r,\delta) \otimes \sum_{\substack{n=2sz+r \\ m=2sz+\delta}} \left(\Delta^+, \Delta^-\right)_{k-m} \qquad \textbf{(IV.34)}$$

onde $\left(\Delta^+, \Delta^-\right)_{k-M}$ são as dimensões associadas à álgebra Kac-Moody U(1) e $Z_{2s}(r,\delta)$ refere-se no conteúdo de operadores de um sistema satisfazendo à álgebra Z(2s)-FATEEV-ZAMOLODCHIKOV[39]. Este sistema com simetria Z(2s) é dividido nos setores de carga $\delta = 0, 1, \ldots, 2s-1$ e podem estar sujeitos a $r = 0, 1, \ldots 2s-1$ tipos de condições toroidais de contorno. O conteúdo de operadores $Z_{2s}(r,\delta)$ refere-se ao setor δ do modelo com condições de contorno r.

No caso das redes com um número ímpar de sítios, os resultados (IV.13) para o spin $s = 1$ e (IV.17) para o spin 3/2, implicam na conjectura para o caso de spin s arbitrário:

$$\xi_s^0(\gamma) = \sum_{r=0}^{2s-1} \sum_{\delta=0}^{2s-1} Z_{2s}(r,\delta) \otimes \sum_{\substack{n=2z+r+s \\ m=2z+\delta+s}} \left(\Delta^+, \Delta^-\right)_{k-m} \qquad \textbf{(IV.35)}$$

Estudamos analiticamente (seção IV.a e Apêndice A) e numericamente (seção IV.f) em correções de tamanho finito para as equações (I.9) e (I.11). Destes resultados conjecturamos que, para o modelo XXZ-S com spin s arbitrário, um dos principais operadores que governam estas correções é o operador $\Psi^{0,2}_{\Delta_{2s},\bar{\Delta}_{2s}}$ com $\Delta_{2s} = \Delta_{2s} = {(2s-1)}/{2s}$, cuja dimensão é

$$d^{0,2}_{\Delta_{2s},\bar{\Delta}_{2s}} = \frac{\pi}{s(\pi - 2s\gamma)} + \frac{2s-1}{s} \qquad \textbf{(IV.36)}$$

Finalizando, na seção (IV.e) discutimos os efeitos de condições especiais de contorno (veja Eq. II.26) nos estados de mais baixa energia em dado setor n. Os resultados (IV.20) e (IV.23) indicam que o efeito da fase ϕ, que define a condição de contorno, aparece apenas na parte Gaussiana. Mais especificamente este efeito aparece nas exitações do tipo vórtice, substituindo a vorticidade m por $m + \frac{s\phi}{\pi}$. Vimos também que fixando relações entre ϕ e γ, geramos a anomalia conforme (IV.21) de álgebras conformes gerais, recentemente propostas [17]. Este fato não significa que o conteúdo de operadores dado por (IV.34), considerando a substituição de m por $m + \frac{s\phi}{\pi}$, seja idêntico ao destas álgebras recentemente propostas (veja equação I.8). De fato o conteúdo de operadores (IV.34), com m substituído por $m + \frac{s\phi}{\pi}$, é maior que o dado pela equação (I.8). Este fato foi observado por ALCARAZ, GRIM e RITTEMBERG [68] no caso do $S = 1/2$, onde mostrou-se que através de subtrações de espectros é possível gerar toda a série minimal ($c < 1$) dada pela equação (I.2). No momento estamos estudando a possibilidade de generalizar tal feito para o caso dos modelos com spin s arbitrário estimulados pelos nossos resultados numéricos.

Capítulo V

Conclusão

Neste trabalho analisamos generalizações dos modelos de Heisenberg isotrópicos e anisotrópicos com spin s arbitrário. No Capítulo III estudamos as propriedades críticas do modelo isotrópico e verificamos a conjectura de que o modelo σ-não linear Wess-Zumino-Witten com carga topológica $k = 2s$ é a teoria de campos conforme que governam as flutuações críticas destes modelos de spin.

No caso dos modelos anisotrópicos, com condições periódicas de contorno, mostramos que o conteúdo de operadores destes modelos pode ser representado por uma combinação de operadores Gaussiano ($c = 1$) e de operadores que satisfazem à álgebra $Z(2s)$ $\left(c = \frac{2s - 1}{s + 1} \right)$ - Fateev Zamolodchikov. Observamos também, que ao considerarmos estes modelos com condições especiais de contorno toroidais, é possível gerar uma nova família de álgebras conformes com $c > 1$.

Sob o ponto de vista da Topologia dos zeros das equações do Bethe ansatz associadas a estes modelos XXZ-S, mostramos que a hipótese de string, usualmente aceita, é violada com o aparecimento de estruturas defeituosas.

A continuidade deste trabalho, na minha opinião, é muito vasta. Podemos tentar entender estes modelos XXZ-S fora da criticalidade [70], bem como estudar modelos críticos com uma simetria de Lie arbitrária [71].

Referências Bibliográficas

[1] WILSON, K. (1971) Phys. Rev. 84, 3184.

[2] LUTHER, A. & PESCHEL, I (1974) Phys. Rev. B9, 2911.

[3] BAXTER, R. J. (1982) Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. Academic Pres.

[4] THIRRING, W. (1958) Ann. of Phys. 3, 91.

[5] CUNNINGHAM, E. (1909) Proc. London Math. Soc. 8, 77.
BATEMAN, H. (1910) Proc. London Math. Soc. 8, 223.

[6] Para uma revisão ver: CARDY, J. L. (1987) Phase transitions and Critical Phenomena Vol. 11, ed. C. DOM e J. L. LEBOWITZ.

[7] TODOROV, I. T. (1913) em Cargése Lectures in Physics.

[8] POLYAKOV, A. M. (1970) Zh. Eksper Teor. Fiz. 57, 271 (Sov. Phys. - JETP 30, 151).

[9] VIRASORO, M. A. (1970) Phys. Rev. D1, 2933.

[10] KAC, V. G. (1979) Lecture Notes in Phys. 94, 441.

[11] BELAVIN, A. A., POLYAKOV, A. M. & ZAMOLODCHIKOV, A. B. (1984) J. Stat. Phys. 34, 763; Nucl. Phys. B241, 333.

[12] FRIEDAN, D., QIU, Z. & SHENKER, S. (1984). Phys. Rev. Lett. 52, 1575.

[13] ALCARAZ, F. C. & BARBER, M. N. (1986) J. Phys. A: Math. Gen. 20, 179.
ALCARAZ, F. C. & BARBER, M. N. (1987) J. Stat. Phys. 46, 435.

[14] FRIEDAN, D.; QIU, Z. & SHENKER, S. (1985) Phys. Lett. 151B, 37.

BERSHADSKY, M. A.; KNIZNIK, V. G. E TEITELMAN, M. G. (1985). Phys. Lett. 151B, 31.

[15] ZAMOLODCHIKOV, A. B. & FATEEV, V. A. (1985). Zh. Eksper Teor. Fiz. 89, 370 (Sov. Phys. - JETP 62, 215).

[16] KNIZHNIK, V. & ZAMOLODCHIKOV, A. B. (1984). Nucl. Phys. B247, 83.

[17] KASTOR, D., MARTINEC, E. E QIU, Z. (1988) Phys. Lett. 200B, 434.
BAGGER, J.; NEMECHANSKY, D. N. & YANKIELOWICZ, S. (1988). Phys. Rev. Lett. 60 (389).
RAVANINI, F. (1988). Mod. Phys. Lett. A3, 271.

[18] GODDARD, P.; KENT, A. & OLIVE, D. (1982) Comm. Math. Phys. 103, 105.

[19] CARDY, J. L. (1986) Nucl. Phys. B270, 186.

[20] GEHLEN, G. V. & RITTENBERG, V. (1986) J. Phys. A. Math. Gen. 19 L625.

[21] BLÖTE, H. W. J.; CARDY, J. L. & NIGHTINGALE, M. P. (1986) Phys. Rev. Lett. 56, 742.

[22] AFFLECK, I. (1986) Phys. Rev. Lett. 56, 746.

[23] ROOMANY, H. H.; WILD, H. W. & HOLLOWAY, L. E. (1980) Phys. Rev. D21, 1557.
HAMER, C. J. & BARBER, M. N. (1981) J. Phys. A: Math. Gen. 14, 2009.
ALCARAZ, F. C.; DRUGOWICH DE FELICIO, J. R. (1985) Rev. Bras. Fis. 15, 128.
GAGLIANO, R. G.; DAGOTTO, E.; MOREO, A. & ALCARAZ, F. C. (1986) Phys. Rev. B34, 1687.

[24] ALCARAZ, F. C.; BARBER, M. N. & BATCHELOR, M. T. (1987) Phys. Rev. Lett 8, 771.

ALCARAZ, F. C.; BARBER, M. N. & BATCHELOR, M. T. (1988) Ann. Phys. 182, 280.

[25] ALCARAZ, F. C.; BARBER, M. N.; BATCHELOR, M..; BAXTER, R. J. & QUISPEL, H. W. J. (1987) J. Phys. A: Math. Gen. 20, 5677.

[26] SKLYANIN, E. K.; TAKHTADZHYAN, L. A. & FADDEEV, L. D. (1979) Teor. Mat. Fiz. 40, 194

TAKHTDZHYAN, L. A. & FADDEEV, L. D. (1979) Russian Math. Surveys 34, 11

DÖRFEL, B. D. (1988) Fortschr. Phys. 36, 281.

THACKER, H. B. (1981) Rev. Mod. Phys. 53, 253.

[27] ALCARAZ, F. C. & MARTINS, M. J. (1988) J. Phys. A: Math. Gen. 21 L381.

[28] ALCARAZ, F. C. & MARTINS, M. J. (1988) J. Phys. A: Math. Gen - to appear.

[29] ALCARAZ, F. C. & MARTINS, M. J. (1988) Phys. Rev. Lett. 3, 1529.

[30] ALCARAZ, F. C. & MARTINS, M. J. (1988) J. Phys. A: Math. Gen. - to appear.

[31] ALCARAZ, F. C. & MARTINS, M. J. (1988) Submetido à publicação.

[32] ALCARAZ, F. C. & MARTINS, M. J. (1988) Em preparação.

[33] WITTEN, E. (1984) Comm. Math. Phys. 92, 455.

[34] BETHE, H. (1931) Z. Phys. 71, 205.

[35] LIEB, E. H. & WU, F. Y. (1968) Phys. Rev. Lett. 20, 1445.

[36] TSVELICK, A. M. & WIEGMANN, P. B. (1983) Advances in Physics 37, 453.

[37] FADDEEV, L. D. (1980) Soviet Sci. Review C1, 107.
KULISH, P. P. & SKLYANIN, E. K. (1981) in Tvärminne lecture, Springer Lectures in Physics, Vol. 151.
DE VEGA, H. J. Integrable QFT and Statistical Models, LPTHE preprint 85.54.

[38] TARASOV, V. O. (1984) Teor. Mat. Fiz. 61, 1211.

[39] ZAMOLODCHIKOV, A. B. & FATEEV, V. A. (1980) Sov. J. Nucl. Phys. 32, 298.

[40] SOGO, K. (1984) Phys. Lett. 104A, 51.

[41] SOGO, K.; AKUTSU, Y. & ABE, T. (1983) Progr. Theor. Phys. 70, 730.

[42] KIRILLOV, A. N. E RESHETIKHIN, N. YU (1987) J. Phys. A: Math. Gen. 20, 1565 e 1586.

[43] BABUJIAN, J. (1983) Nucl. Phys. B215, 317.
BABUJIAN, J. (1982) Phys. Lett. 90A, 479.

[44] TAKHTAJAN, L. (1982) Phys. Lett. 87A, 479.

[45] DE VEGA, H. J. (1986) preprint CERN - TH.4625.

[46] AFFLECK, I. (1986b) Phys. Rev. Lett. 56, 2763.

[47] AFFLECK, J. & HALDANE, F. D. M. (1987) Phys. Rev. B36, 5291.

[48] BLÖTE, H. W. J. & BONNER, J. C. (1987) Phys. Rev. B36, 2337.
BLÖTE, H. W. J. & CAPEL, H. W. (1986) Physica A139, 387.
BONNER, J. C.; PARKINSON, J. B.; OITMAA, J. E BLÖTE, J. W. J. (1987) J. App. Phys. 61, 4432.

[49] DE VEGA, H. & WOYNAROVICH, F. (1985) Nucl. Phys. B251, 439

[50] HAMER, C. J. (1986) J. Phys. A: Math. Gen. 19, 3335.

[51] WOYNAROVICH, F. (1987) Phys. Rev. Lett. 59, 259.
WOYNAROVICH, F. & ECKLE, H. P. (1987) J. Phys. A: Math. Gen. 20, L443.

[52] HAMER, C. J.; QUISPEL, G. R. W. & BATCHELOR, M. T. (1988) J. Phys. A: Math. Gen. (to appear).

[53] VAN DEN BROECK, J. M. & SCHWARTZ, L. W. (1979) SIAM J. Math. Anal. 10, 658.

[54] HAMER, C. J. & BARBER, M. N. (1981) J. Phys. A: Math. Gen. 14, 2009.

[55] ALCARAZ, F. C. (1987) J. Phys. A: Math. Gen. 2511.

[56] DES CLOIZEAUX, J. & PEARSON, J. J. (1962) Phys. Rev. 128, 2131.

[57] GRIEGER, W. (1984) Phys. Rev. B30, 344.

[58] BORYSOWICZ, J.; KAPLAN, T. A. & HORSCH, P. (1985) Phys. Rev. B31, 1590.

[59] AVDEEV, L. V. & DÖRTEL, B. D. (1987) Theor. Mat. Fiz. 71, 598.

[60] BABUDJIAN, H. & TSVELICK, A. (1986) Nucl. Phys. 265B, 24.

[61] JOHANNESSON, H. (1988) Göteborg - preprint.

[62] KADANOFF, L. & BROWN, A. C. (1979) Ann. Phys. (N. Y.) 121, 318.

[63] CARDY, J. L. (1986) Nucl. Phys. B275, 200.

[64] DI FRANCESCO, P.; SAULER, H. & ZUBER, J. B. (1988) (Saclay - preprint).

[65] GEHLEN, G. V. & RITTENBERG, V. (1986) J. Phys. A: Math. Gen. 19, L625.

[66] GEHLEN, G. V.; RITTENBERG, V. & RUEGG, H. (1986) J. Phys. A: Math. Gen. 19, 107.

[67] KADANOFF, L. (1979) Ann. Phys. (N.Y.) 120, 39.

[68] ALCARAZ, F. C.; BAAKE, M.; GRIMM, V. & RITTENBERG, V. (1988) J. Phys. A: Math. Gen. - to appear.

ALCARAZ, F. C.; GRIMM, V. & RITTENBERG, V. (1988) Submetido à publicação.

[69] MORSE, D. M. & FEHBACH, H. (1953) "Methods of Theoretical Physics" McGraw-Hill, p. 978.

[70] ITOYAMA, H. & THACKER, H. B. (1987) Phys. Rev. Lett. 14, 1395.

[71] SUZUKI, J. (1988) Universit of Tokyo preprint.

Apêndice A. Correções devido ao tamanho finito da rede

Neste Apêndice derivaremos, baseado na hipótese de string (III.13), as correções devido ao tamanho finito da rede para os autoestados do modelo XXZ-S. Nossos cálculos serão baseados nos métodos desenvolvidos por DE VEGA [49], HAMER [50] E WOYNAROVICH [51].

Calcularemos as correções de tamanho finito para estados com energia mais baixa em dado setor $n = 0, 1, 2, \ldots$, destes modelos XXZ-S. Primeiramente vamos abordar o caso anisotrópico ($\gamma = 0$). Para uma dada distribuição de strings (υ_k) é conveniente definir a densidade de zeros $\sigma_L^n(\lambda)$ de strings de tamanho 2s no setor n, do sistema finito por:

$$\sigma_L^n(\lambda) = \frac{d\, z_L^n}{d\lambda} \tag{A.1a}$$

onde

$$z_L^n\left(\lambda_j^{2s}\right) = \frac{Q_L^n}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\left[\psi_{2s,2s}\left(\lambda_j\right) - \frac{1}{L}\sum_{k=1}^{+\infty}\sum_{i=1}^{\upsilon_k} \Xi_{2s,k}\left(\lambda_j^{2s} - \lambda_i^k\right)\right] \tag{A.1b}$$

onde as funções ψ e Ξ foram definidas nas equações (II.14). Quando $L \to \infty$ as raízes tendem a se aproximar de uma distribuição contínua com densidade dada por:

$$\sigma_\infty(\lambda) = \frac{1}{2\pi}\left\{\psi'_{2s,2s}(\lambda) - \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_\infty(u)\, \Xi'_{2s,2s}(\lambda - u)\, du\right\} \tag{A.2}$$

onde o símbolo linha ('), conforme é usual, indica a derivada. Esta equação integral tem como solução[40]:

$$\sigma_{\infty}(\lambda) = \frac{1}{2\gamma \cosh(\pi\lambda/\gamma)} \tag{A.3}$$

e de (II.11) a energia por sítio é dada por:

$$\sigma_{\infty} = -\frac{\operatorname{sen}\theta}{2s} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_{\infty}(\lambda)\, \psi'_{2s,2s}(\lambda)\, d\lambda \tag{A.4}$$

onde $\theta = 2s\gamma$. Usando-se as expressões (II.14) e (A.1) - (A.4) e depois de várias manipulações podemos expressar a diferença da energia e da densidade de raízes em relação aos seus valores no limite termodinâmico por:

$$\frac{E_n}{L} - e_{\infty} = -\frac{\operatorname{sen}\theta}{2s} \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma_{\infty}(u)\, S(u)\, du \tag{A.5}$$

e

$$\sigma_L^n - \sigma_{\infty} = -\frac{1}{L}\, \Xi'_{2s,2s-n} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\lambda - u)\, S(u)\, du \tag{A.6}$$

respectivamente, onde:

$$S(u) = \frac{1}{L} \sum_j \delta(\lambda_j - u) - \sigma_L^n(u) \tag{A.7}$$

$$\rho(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\lambda\omega)\, K(\omega)\, d\omega \tag{A.8}$$

$$\left[1 - K(\omega)\right]^{-1} = G_+(\omega)\, G_-(\omega) \qquad \textbf{(A.9)}$$

$$G_+(\omega) = G_-(-\omega) = \frac{4s(\pi-\theta)\, e^{\phi(\omega)}\, \Gamma\left(1 - \frac{i\omega}{2}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i\gamma\omega}{2\pi}\right)}{\Gamma\left(1 - i(\pi-\theta)\frac{\omega}{2\pi}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{i\gamma\omega}{2\pi}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i\theta\omega}{2\pi}\right)} \qquad \textbf{(A.10)}$$

com:

$$\phi(\omega) = \frac{i\omega}{2}\left(\ln\left(\frac{\pi}{\pi-\theta}\right) + \frac{\theta}{\pi}\ln\left(\frac{\pi-\theta}{\theta}\right)\right) \qquad \textbf{(A.11)}$$

As correções devido ao tamanho finito, para L grande, são dadas por: [51]

$$\frac{E_n}{L} - e_\infty = 2\pi \int_\Lambda^{+\infty} \sigma_\infty(\lambda)\, \sigma_L^n(\lambda)\, d\lambda - \frac{1}{2L}\sigma_\infty(\lambda) - \frac{\sigma_\infty(\lambda)}{12L^2\, \sigma_L^n(\lambda)} \qquad \textbf{(A.12)}$$

$$\sigma_L^n(\lambda) - \sigma_\infty(\lambda) = \frac{1}{2\pi}\int_\Lambda^{+\infty} \sigma_L^n(u)\, \rho(\lambda-u)\, du - \frac{\rho(\lambda-\Lambda)}{2\pi L} + \frac{\rho'(\lambda-\Lambda)}{12L^2\, \sigma_L^n(\lambda)}$$

$$+ \int_{-\infty}^{-\Lambda} \sigma_L^n(u)\, \frac{\rho(\lambda-u)}{\pi}\, du - \frac{\rho(\lambda+\Lambda)}{2\pi L} - \frac{\rho'(\lambda+\Lambda)}{12L^2\, \sigma_L^n(\Lambda)} - \frac{1}{L}\, \Xi'_{2s,2s-n} \qquad \textbf{(A.13)}$$

onde Λ é a maior raiz determinada pelas condições de fronteira:

$$\int_\Lambda^{+\infty} \sigma_L^n(\lambda)\, d\lambda = \frac{1}{2L}\left(1 - \frac{2s\gamma}{\pi}\right)\frac{n}{L} \qquad \textbf{(A.14)}$$

$$\int_{\Lambda}^{+\infty} \sigma_L^n(\lambda)\, d\lambda = \frac{1}{2L}\left(1 - \frac{2s\gamma}{\pi}\right)\frac{n}{L} \qquad \textbf{(A.14)}$$

A correção de primeira ordem $0\left(\frac{1}{L^2}\right)$ são calculadas desprezando-se os termos dentro do parênteses da equação (A.14), responsáveis por correções de ordem superior.

Definindo-se

$$R(\lambda) = \frac{\rho(\lambda)}{2\pi}\ ,\ f(\lambda) = \sigma_\infty(\lambda + \Lambda) \qquad \textbf{(A.15)}$$

$$\chi^n(\lambda) = \sigma_L^n(\lambda + \Lambda)\ ,\ t = \lambda - \Lambda \qquad \textbf{(A.16)}$$

podemos escrever (A.13) como:

$$\chi^n(t) = f(t) + \int_0^{+\infty} \chi^n(u)\, R(t-u)\, du - \frac{R(t)}{L} + \frac{R'(t)}{12L^2\,\sigma_L^n(\Lambda)} \qquad \textbf{(A.17)}$$

o que é precisamente a forma padrão da equação integral de WIENER-HOPF [69]. Esta equação é resolvida introduzindo-se as transformadas de Fourier:

$$\tilde{\chi}_\pm^n = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\omega t)\, \chi_\pm^n(t)\, dt \quad ; \quad \chi_\pm^n(t) = \begin{cases} \chi^n(t) & t < 0 \\ 0 & t > 0 \end{cases} \qquad \textbf{(A.18)}$$

e os correspondentes pares $f(t) \Leftrightarrow \tilde{f}(\omega)$, $R(t) \Leftrightarrow \tilde{R}$. Depois de algumas manipulações $\tilde{\chi}_+^n(\omega)$ pode ser expressa por:

$$\tilde{\chi}_+^n(\omega) = c^n(\omega) + G_+(\omega)\left[Q_+(\omega) + \rho(\omega)\right] \qquad \textbf{(A.19)}$$

onde:

$$c^n(\omega) = \frac{1}{2L} - \frac{i\omega}{12L^2\,\sigma_L^n(\Lambda)}\ ,\ Q_+(\omega) = \frac{G_-(i\pi/\gamma)\,\exp(-\Lambda\pi/\gamma)}{\pi - i\gamma\omega} \qquad \textbf{(A.20)}$$

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{2L} + \frac{ig}{12L^2\,\sigma_L^n(\Lambda)} - \frac{i\omega}{12L^2\,\sigma_L^n(\Lambda)}\ ,$$

$$,\ g = \frac{i}{12}\left(2 - \frac{2\pi}{\pi - 2s\gamma} + \frac{\pi}{\gamma}\left(3 - \frac{1}{s}\right)\right) \qquad \textbf{(A.21)}$$

De (A.17) e das definições (A.15) e (A.16), obtemos

$$G_+(i\omega)\,\exp\left(-\frac{\pi\Lambda}{\gamma}\right) = +\frac{1}{2L} + \frac{(\pi - 2s\gamma)n}{4\pi G_+(0)} - \frac{ig}{12L^2\,\sigma_L^n(\Lambda)} \qquad \textbf{(A.22)}$$

$$\sigma_L^n(\Lambda) = \frac{g^2}{24L^2\,\sigma_L^n(\Lambda)} + \frac{ig}{L} + \frac{G_-(i\pi/\gamma)\,e^{\left(-\pi\Lambda/\gamma\right)}}{2\gamma} \qquad \textbf{(A.23)}$$

Finalmente, usando-se (A.19), (A.22) e (A.23) em (A.12) e aproximando (A.3), $\sigma_\infty(\Lambda) = \exp\dfrac{(-\pi\Lambda/\gamma)}{\gamma}$, obtemos a primeira ordem da correção devido ao tamanho finito no setor n:

$$\frac{E_n}{L} - e_\infty = \frac{\pi^2}{4 s \gamma L^2} \operatorname{sen}(2 s \gamma) \left(-\frac{1}{6} + 2 X_p n^2 \right), X_p = \frac{\pi - 2 s \gamma}{4 s \pi} \qquad \textbf{(A.24)}$$

As próximas correções para (A.24) são obtidas usando (A.22) e (A.23) e incluindo-se o termo do parêntesis da equação (A.13). Estes termos introduzem correções da ordem de $0\left(\frac{P(2\Lambda)}{L}\right)$ em $\sigma_L^n(\Lambda)$ e $\exp\left(-\frac{\pi\Lambda}{\gamma}\right)$. Para spins $s > 1$, obtemos para o estado fundamental ($n = 0$) as correções:

$$\frac{E_0}{L} - e_\infty = \frac{\pi^2 \operatorname{sen}(2 s \gamma)}{4 s \gamma L^2} \left(-\frac{1}{6} + 0\left(L^{-2}\right) + 0\left(L^{-4\gamma/(\pi - 2 s \gamma)}\right) + 0\left(L^{-2/s}\right) \right) \qquad \textbf{(A.25)}$$

enquanto que as correções correspondentes a setores $n = 0$, são dadas por:

$$\frac{E_n}{L} - \frac{E_0}{L} = \frac{\pi^2 \operatorname{sen}(2 s \gamma)}{4 s \gamma L^2} \left\{ X_p n^2 + 0\left(L^{-1}\right) + 0\left(L^{-2}\right) + 0\left(L^{-2/s}\right) + \right.$$

$$\left. + 0\left(L^{-4\gamma/(\pi - 2 s \gamma)}\right) \right\} \qquad \textbf{(A.26)}$$

onde X_p é definido em (A.24).

No caso isotrópico, $\gamma = 0$, as expressões para $G_\pm(\omega)$ são:

$$G_\pm(\omega) = \frac{\sqrt{\pi/s}\ \Gamma\left(\pm \frac{i\omega}{2}\right) \left(e^{\pm i \pi/2} \frac{s \omega}{e \pi} \right)^{\frac{\pm i s |\omega|}{2}}}{\Gamma\left(\pm \frac{i s \omega}{\pi}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} \mp \frac{i \omega}{2 \pi}\right)} \qquad \textbf{(A.27)}$$

e procedendo da mesma maneira como no caso anterior ($\gamma = 0$), encontramos que as correções para o estado fundamental são dadas por:

$$\frac{E_0}{L} - \varepsilon_\infty = \frac{\pi^2}{12\,L^2}\left(-1 + 0\left(\frac{1}{(\ln L)^3}\right) + 0\left(\frac{\ln(\ln L)}{(\ln L)^4}\right)\right) \qquad \textbf{(A.28)}$$

$$\frac{E_n}{L} - \frac{E_0}{L} = \frac{\pi^2}{12\,L^2}\left(\frac{n^2}{4\,s} + 0\left(\frac{1}{\ln L}\right) + 0\left(\frac{\ln(\ln L)}{(\ln L)^2}\right)\right) \qquad \textbf{(A.28)}$$