UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

HAMILTONIANOS UNIDIMENSIONAIS ASSO-
CIADOS À SIMETRIA $Z(N) \times Z(N)$

Marcia da Costa Pereira Catunda

Dissertação apresentada ao Insti-
tuto de Física e Química de São
Carlos, da Universidade de São
Paulo, para a obtenção do Título
de Mestre em Física Básica

Orientador: Prof.Dr. VALÉRIO KURAK

Departamento de Física e Ciência dos Materiais

1985

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE _____

Marcia da Costa Pereira Catunda

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 25 DE março DE 1985.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. Valério Kurak - Orientador

Dr. Roland Köberle

Dr. Francisco Castilho Alcaraz

Ao Tomaz e a

Victória.

Aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

Agradeço

Ao Valério por sua orientação inigualável.

Ao Sylvio, pelo apoio e incentivo de todas as horas.

*Aos meus colegas e professores, sobretudo à Marisa, o Makoto, o Valter, o Ca
pa, o Pedro, o Drugo, o Lidério, o Djalma, o Luis, o Almir, o Degas, a Cecília e a Nice.*

Aos meus pais, pela amizade e incentivo.

Ao Tomaz por estes três anos.

A Loreni e a Marli pelo trabalho de datilografia.

Ao Fernando da xerox e ao Itálo da gráfica e a Tilde.

*E a todos que de alguma maneira contribuíram para que este trabalho pudesse
ser realizado.*

ÍNDICE

RESUMO	i
ABSTRACT	ii
PREFÁCIO	iii
CAPÍTULO I - DEFINIÇÕES GERAIS E UM EXEMPLO DE QUIRALIDA- DE	1
1.1. INTRODUÇÃO	3
1.2. UM EXEMPLO E DEFINIÇÕES GERAIS DE MECÂNICA ESTATÍSTICA	4
1.3. O EXEMPLO ILUSTRANDO A QUIRALIDADE	11
CAPÍTULO II - MODELOS IRF, VÉRTICES E O MODELO DE BELAVIN SIMETRIA $Z(N) \times Z(N)$	19
2.1. INTRODUÇÃO	21
2.2. O HEXÁGONO DURO. CLASSE DE UNIVERSALI- DADE. PESO ESTATÍSTICO PARA FACES (INTERAÇÕES QUE ENVOLVEM MAIS DE DOIS CORPOS)	21
2.3. MODELO IRF. 8-VÉRTICES ; ISING DOBRADO	26
2.4. MODELO DE 8-VÉRTICES NA LINGUAGEM DE VÉRTICES. SIMETRIA $Z(N)$ E SIMETRIA $Z(N) \times (ZN)$	30
2.5. MODELO DE BELAVIN. SIMETRIA $Z(N) \times Z(N)$	35
2.6. MODELO DE BELAVIN ESCRITO EM TERMOS DE SPINS. SIMETRIA $Z(N) \times Z(N)$ SOB ESTA ÓP- TICA	32

2.7. QUIRALIDADE. CLASSE DE UNIVERSALIDADE: LIGAÇÃO COM O FENÔMENO DE ADSORÇÃO DE Kr EM GRAFITE	41
---	----

CAPÍTULO III - EQUAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA GENERALIZADA E EQUAÇÕES PARA A ENERGIA LIVRE	45
3.1. INTRODUÇÃO	47
3.2. RELAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA GENERALIZADA	49
3.3. RELAÇÃO TRIÂNGULO-ESTRELA	52
3.4. EQUAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA GENERALIZADA SOB O FORMALISMO DE VÉRTICES OU EQUA- ÇÕES DOS TRIÂNGULOS	53
3.5. RELAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA E EQUAÇÕES FUN- CIONAIS PARA A ENERGIA LIVRE	60
3.5.1. Resumindo o Método	68
3.6. EQUAÇÕES FUNCIONAIS PARA A ENERGIA LIVRE DE MODELOS DE VÉRTICES: MÉTODO DE BELAVIN- ZAMOLODCHKOV	69

CAPÍTULO IV - DUALIDADE DO MODELO DE BELAVIN - SOLUBILIDADE E LIMITES DESTES MODELOS. ENERGIA LIVRE PARA $N=3$ - OBTENÇÃO DO HAMILTONIANO QUÂNTICO ASSOCIADO A ESTES MODELOS, PARA QUALQUER N . EXEMPLO DO HAMILTONIANO E CÁLCULO DE SEU ESTADO FUNDAMEN- TAL PARA $N=3$	73
4.1. INTRODUÇÃO	75
4.2. DUALIDADE	76
4.3. SOLUBILIDADE E LIMITES DO MODELO DE BELA- VIN: ENERGIA LIVRE PARA ESTES MODELOS, CASO $N=3$	86

4.3.1. Limites	87
4.3.2. Cálculo do Peso Estatístico do Modelo de Belavin, nestes limi tes. Equivalência destes limi- tes	92
4.3.3. Equações funcionais para a Fun ção de Partição, no limite $q \rightarrow$ 1 ($\tau \rightarrow i0$), caso $N=3$	98
4.3.4. Solução das Equações Funcionais. Cálculo da Energia Livre no limi te $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$), caso $N=3$	99
4.4. HAMILTONIANO QUÂNTICO ASSOCIADO AO MODE LO DE BELAVIN, $Z(N) \times Z(N)$	105
4.4.1. Exemplo $N=3$, no limite $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$): Hamiltoniano e seu Estado Fundamen tal	115
CONCLUSÃO	121
APÊNDICE A - RELAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA GENERALIZADA	127
1. Derivação da Relação Triângulo Estrela Generalizada.....	129
2. Prova de que satisfeita a Equação dos Triângulos (3.13), também teremos satis feita a Relação (3.11), com todos os vértices	131
APÊNDICE B - PROPRIEDADES DAS FUNÇÕES θ_s	135
APÊNDICE C - IDENTIDADES TRIGONOMÉTRICAS	141
APÊNDICE D - RESULTADOS PARA O CAPÍTULO IV	149
1. Peso Estatístico, $N=3$, $q \rightarrow 1$	151
2. Cálculo de ρ , $\tilde{\rho}$ e ξ ($q \rightarrow 1$, $\tau \rightarrow i0$), $N=3$	153

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 163

RESUMO

É mostrada a obtenção do Hamiltoniano Quântico Unidimensional associado a um modelo de Mecânica Estatística Clássica de simetria $Z(N) \times Z(N)$. O cálculo do Estado Fundamental deste Hamiltoniano é feito através do cálculo da Energia Livre do modelo de Mecânica Estatística, sendo que esta, por sua vez, é calculada utilizando-se Equações Funcionais advindas da Equação dos Triângulos (o método de solução é explanado em detalhes). Este tipo de cálculo foi feito originalmente por Baxter para $N=2$, sendo que neste caso o modelo de Mecânica Estatística é conhecido por 8-Vértices e o Hamiltoniano Quântico associado é o XYZ (Heisenberg Completamente Anisotrópico). Neste presente trabalho, o Hamiltoniano é obtido formalmente para as demais simetrias (qualquer N) ao incrementar-se o cálculo feito por Baxter com um novo método que torna possível esta generalização. Como exemplo, são feitos cálculos detalhados para $N=3$, em um limite em que as funções envolvidas na solução do problema de Mecânica Estatística tornam-se trigonométricas. O limite citado é análogo ao que se faz para $N=2$ quando do modelo de 8-Vértices obtém-se o modelo de 6-Vértices e o Hamiltoniano associado torna-se o XXZ (Heisenberg Anisotrópico).

Além da obtenção do Hamiltoniano é mostrada a dualidade do modelo $Z(N) \times Z(N)$. Também aqui este resultado foi obtido pela primeira vez por Baxter, apenas para o caso $N=2$, usando uma maneira gráfica que não permitiria a generalização para as outras simetrias. O método aqui apresentado, além de simplificar o resultado para $N=2$ é feito para todo N .

ABSTRACT

The one-Dimensional Quantum Hamiltonian associated to a Classical Statistical Mechanical Model with $Z(N) \times Z(N)$ symmetry is obtained. The calculation of the Ground State of this Hamiltonian is performed via the calculation of the Free Energy of the Statistical Mechanical Model, which in its turn, is calculated by the Functional Equations originated from the Triangle Equations. This type of calculation has been originally performed by Baxter for $N=2$, in which case the Statistical Mechanical Model is known as the 8-Vertex and the associated Quantum Hamiltonian is the XYZ (Completely Anisotropic Heisenberg Model). In the present work the Hamiltonian is formally obtained for any N upgrading Baxter's calculation by the use of a new method which allows its generalization. As an example, detailed calculations for $N=3$ are performed on a limit in which the functions arising from the Triangle Equations become trigonometric. This limit is analogous to the case $N=2$ when the 6-Vertex Model is obtained from the 8-Vertex and the associated Hamiltonian becomes the XXZ (Anisotropic Heisenberg Model).

Besides the obtention of the Hamiltonian, the duality of the $Z(N) \times Z(N)$ model is also shown. This result was demonstrated by Baxter only for the case $N=2$ by means of a graphic method which does not allow generalization for an arbitrary N . The method present in this work, besides the simplification of the result for $N=2$, is valid for any N .

PREFÁCIO

Em 1925 tivemos um marco na história dos problemas de Mecânica Estatística de redes que é a resolução do modelo de Ising unidimensional⁽¹⁾. Este problema, proposto por Lenz e resolvido por Ising, que era seu orientado, é um problema em que temos associado à cada sítio de uma cadeia linear, variáveis que podem assumir valores $+1$ ou -1 e cujas interações são apenas entre variáveis situadas em sítios vizinhos próximos. Como o interesse nesses problemas era o de se obter uma descrição teórica das transições de fase (gás para líquido, ferromagnético para paramagnético,...) o modelo de Ising unidimensional não se demonstrou adequado devido a ter transição de fase somente à temperatura zero, ou seja, não ter transição de fase à temperatura finita.

Somente quase 20 anos depois, em 1944, é que Onsager⁽²⁾ obteve a solução, deste mesmo problema, em uma rede bidimensional quadrada, sem a presença de um campo externo. Neste caso pode se observar uma transição de fase de segunda ordem, à temperatura finita, abaixo da qual os spins passam a ter um valor preferencial e portanto, neste caso, o modelo apresenta magnetização espontânea. O resultado para esta magnetização foi anunciado por Onsager em 1949 e o seu cálculo foi feito por Yang⁽³⁾ somente em 1952, quase dez anos após o cálculo da energia livre do problema.

Todos esses resultados, mesmo sem a presença do campo, são de difícil derivação e por isto a resolução dada por Onsager foi refeita várias vezes (B. Kaufman⁽⁴⁾, 1949; Schultz, Mattis e Lieb⁽⁵⁾, 1964) na tentativa de simplificá-la, mas com exceção da solução combinatorial feita por Vdovchenko⁽⁶⁾ (1965) e a apresentada por Baxter e Enting⁽⁷⁾, em 1978, não há nenhuma que seja essencialmente diferente da solução de 1944.

Outro problema muito importante, posterior a este, é o problema conhecido por modelo de 8-Vértices e que foi resolvido por Baxter em 1971⁽⁸⁻¹⁰⁾. Este problema é basicamente um modelo de Ising numa rede quadrada, só que envolvendo interações de mais de dois corpos, sendo então o modelo de Ising um caso

particular deste modelo. Sabe-se também que outros problemas além do Ising, como por exemplo o modelo de 8-Vértices⁽¹¹⁻¹³⁾, são casos particulares deste modelo.

Baxter resolveu este problema reativando uma equação mencionada brevemente por Onsager⁽²⁾, chamada Triângulo Estrela, generalizando-a para casos em que o problema leva em conta interações de mais de dois corpos e rebatizando-a então por Relação Triângulo Estrela Generalizada⁽¹⁴⁾. E hoje, é ainda através destas equações que se tem procurado solucionar outros problemas, com outras simetrias que não a do Ising, simetria $Z(2)$ ou a do 8-Vértices, $Z(2) \times Z(2)$. Nosso trabalho segue também esta linha ao fazermos um estudo sobre Hamiltonianos unidimensionais associados a um modelo de Mecânica Estatística Clássica possuidor de simetria $Z(N) \times Z(N)$.

Dividimos este trabalho em quatro capítulos e como cada capítulo possui sua própria introdução onde damos mais detalhadamente o seu conteúdo, vamos mencionar agora, apenas brevemente, o que cada um deles contém:

O Capítulo I consta de definições gerais de Mecânica Estatística introduzidas através de um exemplo físico que é o da adsorção de Kr em grafite. Algumas destas definições tais como Peso Estatístico, Função de Partição, Energia Livre e Quiralidade, serão necessárias em capítulos posteriores.

O Capítulo II é uma discussão mais detalhada sobre o modelo I.R.F.⁽¹⁴⁾ (Interação ao Redor de uma Face), no qual se enquadram por exemplo, o modelo de 8-Vértices de simetria $Z(2) \times Z(2)$ e também o que queremos estudar. Este último, que chamaremos de modelo de Belavin, é possuidor de simetria $Z(N) \times Z(N)$, sendo que para $N=2$ este modelo é o de 8-Vértices. Ainda neste capítulo faremos comentários detalhados sobre a associação de vértices a estes modelos e sobre simetria $Z(N) \times Z(N)$, tanto sob o ponto de vista de vértices como sob o ponto de vista de spins. Chamaremos também atenção para o fato de que para $N>2$ estamos diante de um modelo quiral e que isto não o desconecta da realidade, pois como é mostrado no Capítulo I esta peculiaridade poderá estar ligada a fenômenos de adsorção.

O Capítulo III é sobre a equação Triângulo Estrela Generalizada, já mencionada acima, e sobre a sua importância no cálculo da energia livre de modelos que a satisfazem. Faremos neste sentido uma apresentação detalhada de equações funcionais para a energia livre, advindas desta Equação.

O Capítulo IV, é o capítulo em que apresentamos nossos cálculos. O primeiro deles é sobre dualidade no modelo de Belavin. O segundo é a obtenção do Hamiltoniano Quântico Unidimensional associado ao Modelo de Mecânica Estatística Clássica de simetria $Z(N) \times Z(N)$, genericamente para todo N . O cálculo do Estado Fundamental deste Hamiltoniano é feito via cálculo da energia livre do modelo de Mecânica Estatística. Fizemos, como exemplo, cálculos detalhados para o caso $N=3$, em um determinado limite em que as funções elíticas que aparecem no problema tornam-se trigonométricas.

CAPITULO I

CAPÍTULO I

DEFINIÇÕES GERAIS E UM EXEMPLO DE QUIRALIDADE

1.1. INTRODUÇÃO

Para melhor se entender algumas propriedades de um determinado material (que pode ser um cristal, um gás, ...) tem se procurado construir modelos matemáticos que as simulem à medida do possível. É esta também a idéia básica em Mecânica Estatística: Considerar propriedades microscópicas fundamentais destes materiais (a nível de átomos, moléculas, ...) e com elas, muitas vezes já bem simplificadas construir modelos que nos possibilitem "saber" o que ocorre no mundo macroscópico, ou seja, no material como um todo.

Geralmente estes modelos da Mecânica Estatística, devido a essas simplificações que nos permitem tratá-los formalmente, são bastante rudimentares. Mas, mesmo assim são difíceis de serem resolvidos exatamente*. Tanto é que basta querermos acrescentar-lhes alguma complexidade, como por exemplo, tentarmos explicar materiais não tridimensionais, mas apenas bidimensionais, que a sua resolução se torna em muitos casos impossível. Muitos deles, propostos já há muitos anos, permanecem sem solução até hoje, sendo que, não há nenhuma solução exata de modelos verdadeiramente tridimensionais.

* resolver exatamente está significando encontrar a energia livre do modelo.

A grande vantagem destes modelos, apesar de todas as simplificações, reside no fato de não somente nos dar uma descrição qualitativa^{**}, mas também quantitativa^{***} do que está ocorrendo nos materiais verdadeiros, possibilitando-nos previsões de seus comportamentos.

1.2. UM EXEMPLO E DEFINIÇÕES GERAIS EM MECÂNICA ESTATÍSTICA

Uma maneira atraente de nos inteirarmos de algumas propriedades usualmente calculadas em Mecânica Estatística e também de alguns desses modelos será começarmos por uma situação física que poderá eventualmente ser constatada experimentalmente. Com esta intenção pensemos na situação em que temos um substrato formado por um arranjo periódico de sítios e que nestes substrato seja adsorvido algum tipo de átomo.

Antes de prosseguirmos com este exemplo, é conveniente nos repetirmos frisando que não estamos querendo dar ênfase ao fenômeno de adsorção, nem pretendemos neste momento descrevê-lo. O fenômeno estará sendo usado apenas como uma motivação para as definições de Mecânica Estatística e para introduzirmos, posteriormente, modelos que também estão longe de terem a pretensão de descrevê-lo, mas que possuem uma peculiaridade facilmente encontrada neste fenômeno.

^{**}por exemplo: descrição de uma transição de fase: gás-líquido, ferromagnético-paramagnético, etc.

^{***} temperatura em que ocorre a transição, comportamento de funções termodinâmicas perto desta temperatura, etc.

Um bom exemplo que podemos dar é a adsorção de Kr em grafite. Como se sabe, o substrato formado pelo grafite possui uma estrutura hexagonal, onde os sítios de adsorção são preferencialmente os centros dos hexágonos, e formam uma rede triangular. Um átomo de Kr, quando adsorvido neste substrato, ocupa um espaço ligeiramente maior que cada hexágono, fazendo com que hexágonos adjacentes ao ocupado por este átomo sejam energeticamente desfavoráveis para próximas adsorções (figura 1).

Figura 1a. - Substrato hexagonal formado pelo grafite.

Átomo de Kr adsorvido no substrato.

Figura 1b. - Rede triangular formada pelos sítios de adsorção que são os centros dos hexágonos.

A,B,C três sub-redes também triangulares.

Quando um terço dos sítios de adsorção estão ocupados, a mínima energia (à temperatura zero) é encontrada quando temos uma das sub-redes A, B ou C completamente cheia e as outras duas completamente vazias. À medida que aumentamos a temperatura outras configurações serão possíveis e chegará o momento em que teremos, em média, igual ocupação de cada uma das sub-redes. Por possuímos esta invariança por translação a altas temperaturas, uma Hamiltoniana que descreva este sistema deverá conter tal simetria, e portanto, também o estado fundamental contê-la-á. A suficientemente baixas temperaturas esta simetria será espontaneamente quebrada: O Kr estará adsorvido apenas em uma das sub-redes, A, B ou C. Para um modelo como este (e para qualquer outro que possua alguma simetria) podemos associar uma quantidade que assumirá valor zero quando o sistema estiver desordenado e diferente de zero quando já possuir algum ordenamento. Esta quantidade é convenientemente conhecida por parâmetro de ordem. No exemplo que estamos considerando ela

é uma função das densidades das sub-redes e corresponde à magnetização espontânea quando estamos tratando de sistemas magnéticos.

Quando um sistema passa de uma fase caracterizada por uma determinada ordem para uma outra de ordem diferente, ocorre o que chamamos de Transição de Fase. Será uma transição de fase de 1ª ordem se o parâmetro de ordem mudar descontinuamente e de 2ª ordem caso a mudança seja contínua.

Todas estas quantidades e também outras que podem ser observadas macroscopicamente em um material, podem ser, eventualmente, calculadas. Neste trabalho não nos preocuparemos com todas, e nos dedicaremos entre outros cálculos, a encontrar a energia livre de um modelo que será apresentado no próximo capítulo. Como este cálculo é feito usando-se a função de partição, aproveitaremos ainda o exemplo de adsorção para definir estas duas novas quantidades:

Com o aumento de temperatura nosso sistema poderá ser encontrado em uma configuração diferente daquela do estado fundamental (figura 2) e cada uma dessas novas configurações terá uma probabilidade de existência que dependerá da temperatura.

Figura 2a. - Estado fundamental $T = 0$

Figura 2b. - Estado excitado $T \neq 0$

A função de partição Z para este nosso sistema e tam**ém** para outros de Mecânica Estatística de rede, é dada pela soma de todas as probabilidades de configurações do sistema e é escrita como:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \tilde{\omega}(\sigma, T) \quad (1.1)$$

com

$$\tilde{\omega}(\sigma, T) = e^{-\epsilon(\sigma)/K_B T} \quad (1.2)$$

onde σ : cada configuração do sistema

$\{\sigma\}$: conjunto de todas as configurações

$\epsilon(\sigma)$: energia de cada configuração

K_B : constante de Boltzman

T : temperatura

e $\tilde{\omega}(\sigma, T)$ dada por (1.2) é a função que nos dá a probabilidade de encontrarmos o sistema em uma configuração σ e é conhecida por Peso Estatístico ou Peso de Boltzman.

A energia livre é dada por:

$$F = - K_B T \ln Z \quad (1.3)$$

e a energia livre por sítio é:

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{F}{N} \quad (1.4)$$

onde N é o número de sítios da rede.

1.3. O EXEMPLO ILUSTRANDO A QUIRALIDADE

Vamos prosseguir agora com o objetivo de formalizar o problema da adsorção. Formalização esta que não chegará ao ponto de propormos modelos, mas apenas ao ponto de conseguirmos apresentar um aspecto do fenômeno, o da quiralidade, que também surge nos modelos que queremos estudar, e que nos permitirá mostrar com bastante clareza que este aspecto, aparentemente curioso sob a óptica desses modelos, não os impede de estarem conectados com a realidade.

Com este objetivo vamos supor que os átomos de Kr interagem dois a dois neste substrato sob o potencial de Lennard-Jones⁽¹⁵⁾ mostrado na figura 3. Podemos observar a partir deste potencial que se um átomo é adsorvido em um hexágono (por exemplo no sítio o), é impossível que outra seja adsorvida nos sítios adjacentes que são os sítios vizinhos mais próximos (1ºs.vizinhos) e designados por 1. Este potencial altamente positivo para os sítios 1 (350 vezes a profundidade do poço) é devido, como já dissemos, ao fato do átomo de Kr ser maior do que o hexágono aonde ele é adsorvido, impedindo que o hexágono adjacente seja ocupado (figura 1).

Os primeiros lugares que poderão ser ocupados (e o mais provável porque praticamente coincidem com o fundo do poço) são os dos segundos vizinhos e que são designados pelo número 2. Os de mais terceiros e quartos vizinhos (3 e 4) também estão na região de potencial negativo, mas já próxima de zero.

Feitas estas considerações, que futuramente serão usadas para sabermos quais configurações (disposições dos Kr no substrato) serão mais prováveis, vamos agora introduzir uma proposta existente na literatura⁽¹⁶⁾ usada para resolver este sistema.

Figura 3a. - A disposição dos vizinhos do átomo 0, na rede de sítios de adsorção, está indicada pelo número dentro dos hexágonos. Foi considerado até o quarto vizinho.

Figura 3b. - Potencial de Lennard Jones⁽¹⁵⁾ para um átomo (que pode ser o 1º, 2º, 3º ou 4º vizinho) interagindo com o que está no sítio 0. A profundidade do poço é $\epsilon = K_B 145^\circ K$ e o ponto em que o potencial se torna negativo é 3.6 Å.

Esta proposta, que será fundamental para a visualização do aspecto curioso que mencionamos, consiste em considerar cada 3 sítios de adsorção adjacentes como um único sítio (figura 4). Estes novos sítios são conhecidos como sítios de Potts pois a eles associa-se uma variável que poderá assumir três valores A, B ou C (ou 0, 1 ou 2) (que designará a posição do Kr no substrato) e o próprio modelo de Potts⁽¹⁷⁾ foi usado para descrever o sistema.

Figura 4a. - Os sítios de Potts formam uma nova rede triangular rodada de 30° em relação à rede formada pelos sítios de adsorção (indicados pelas letras A, B, C) e são indicadas pelos pontos

Figura 4b. - Um sítio de Potts isolado, cuja variável associada pode assumir três valores A, B ou C indicando onde está sendo adsorvido o átomo de Kr.

Vamos agora considerar que estes novos sítios (eles formam uma rede também triangular rodada de 30° em relação à formada pelos sítios de adsorção) interagirão apenas com seus vizinhos mais próximos e as interações serão apenas de dois corpos, i.é. sítio a sítio. Notem que uma das vantagens dos sítios de Potts é justamente o fato de que, usando apenas interações entre primeiros vizinhos, se está na verdade contando até interações de quartos vizinhos na rede de sítios de adsorção. Isto fica mais claro ao olharmos para a figura 5 onde desenhamos um sítio de Potts central, seus vizinhos próximos e colocamos a posição dos vizinhos na rede de adsorção, contando a partir de um sítio que se encontra no sítio de Potts central.

Figura 5 - Um sítio de Potts (o do centro), ladeado por seus seis vizinhos mais próximos. Os números 1, 2, 3, 4 estão indicando os vizinhos na rede de adsorção contados a partir do sítio 0, que pertence ao sítio de Potts central.

Estabelecida a vizinhança e o número de corpos que entram na interação, o próximo passo é fazer uma análise das configurações possíveis para dois sítios vizinhos próximos. Vejamos então o que está ocorrendo entre estes sítios que chamaremos de i e j : Ao sítio i associamos uma variável σ_i que poderá assumir três valores A, B ou C (valor este que indicará o local nos sítios de adsorção em que estará o Kr) e o mesmo para o sítio j e sendo σ_j a variável associada a ele. O valor da interação entre estes dois sítios dependerá da distância entre os átomos de Kr do sítio i e do sítio j (figura 3); i.é., a probabilidade de aparecer uma determinada configuração dependerá da distância dentro da rede de adsorção. A construção de uma tabela facilita-nos a visualização das configurações que aparecem e com qual probabilidade:

TABELA I

ESTAMOS CHAMANDO DE $\tilde{\omega}(r)$ O PESO ESTATÍSTICO DADO EM
RELAÇÃO À DISTÂNCIA ENTRE OS ÁTOMOS PERTENCENTES A
SÍTIOS DE POTTS DIFERENTES. OS NÚMEROS 1,2,3,4 SÃO
OS UTILIZADOS NA FIGURA 3

	<div>i</div> <div>σ_i</div>	<div>j</div> <div>σ_j</div>	Peso Estatístico
A	A	$\tilde{\omega} (2)$
A	B	$\tilde{\omega} (1)$
A	C	$\tilde{\omega} (3)$
B	A	$\tilde{\omega} (4)$
B	B	$\tilde{\omega} (2)$
B	C	$\tilde{\omega} (4)$
C	A	$\tilde{\omega} (3)$
C	B	$\tilde{\omega} (1)$
C	C	$\tilde{\omega} (2)$

A título de exemplo, retiramos o seguinte dado da Ta
bela I:

se $\sigma_i = A$ e $\sigma_j = B$ temos o valor $\tilde{\omega}(1)$ para o peso es-
tatístico;

se $\sigma_i = B$ e $\sigma_j = A$ temos o valor $\tilde{\omega}(4)$,

e voltando à figura 3 notamos que $\tilde{\omega}(1)$ deve ser nulo e portanto mui
to diferente de $\tilde{\omega}(4)$ que deve ter valor não nulo.

E, se vamos um pouco mais além e representamos os va-
lores de σ_i e σ_j por flechas, por exemplo: $A \equiv \nearrow$, $B \equiv \nwarrow$ e $C \equiv \downarrow$ as
duas configurações que acabamos de mencionar tornam-se:

Figura 6 - Duas configurações que diferem entre si
por terem trocado o valor de σ_i pelo σ_j e
o de σ_j pelo de σ_i . Estas configurações a-
presentam Pesos Estatísticos diferentes:
 $\tilde{\omega}(1)$ e $\tilde{\omega}(4)$.

e não poderíamos entender que estas duas configurações sejam ener-
geticamente diferentes se não soubéssemos que o valor destas variá-
veis (σ_i e σ_j) associadas aos sítios de Potts nos dão na verdade

as posições na rede de sítio de adsorção e estão significando distâncias diferentes dentro desta rede, ($r=1$ e $r=4$), i.é., na rede real. Este é o aspecto curioso a que nos referimos anteriormente e que é apresentado por alguns modelos de Mecânica Estatística, alguns dos quais são objetos de estudo neste trabalho. Esta propriedade, que nada mais é do que o valor da interação, depender essencialmente da posição relativa entre as duas variáveis, leva o nome de quiralidade.

CAPÍTULO II

CAPÍTULO II

MODELOS IRF, VERTICES E O MODELO DE BELAVIN.

SIMETRIA $Z(N) \times Z(N)$

2.1. INTRODUÇÃO

No capítulo anterior, na tentativa de formalizar o fenômeno da adsorção de Kr em grafite, apresentamos o esboço de um modelo, cujas interações entre os sítios envolviam apenas dois corpos. Neste capítulo, utilizando uma vez mais este exemplo, introduziremos modelos, cujas Hamiltonianas que os descrevem levam em conta interações que envolvem não mais somente dois corpos. Nesta classe inclui-se o modelo de Belavin que é o modelo com o qual trabalharemos. Este modelo é possuidor de simetria $Z(N) \times Z(N)$ e ainda neste capítulo, discutiremos esta simetria detalhadamente.

2.2. O HEXÁGONO DURO. CLASSE DE UNIVERSALIDADE. PESO ESTADÍSTICO PARA FACES (INTERAÇÕES QUE ENVOLVEM MAIS DE DOIS CORPOS)

Devido a impossibilidade de adsorvermos outro átomo de Kr, em qualquer dos seis sítios de adsorção adjacentes a um já ocupado, propõe-se que este sistema seja descrito por um modelo de hexágonos duros, pois estes seis sítios formam em conjunto a figura de um hexágono (figura 7).

Para formalizar este problema, tendo em vista esta idéia dos hexágonos duros, ao invés de trabalharmos com sítios de Potts, como no capítulo anterior, podemos trabalhar na própria rede de adsorção de maneira que a situação da figura 7b. possa ser

satisfeita. Esta nova maneira de enfrentar o problema, deve levar-nos a um modelo com o mesmo estado fundamental triplamente degenerado (a $T=0$, o sistema deverá ser encontrado com os hexágonos da figura 8c. "empacotados", sem interstícios entre eles, e seus centros podem estar em uma das três posições A, B ou C da figura 1) e como ambas as maneiras (a dos sítios de Potts e esta) são tratamentos bidimensionais, devemos esperar que estes modelos pertençam à mesma classe de universalidade. Mesma classe de universalidade significa que estes modelos perto de temperatura crítica, T_c (temperatura da transição de fase) devem possuir o mesmo comportamento, ou seja, como perto da temperatura crítica, as funções termodinâmicas comportam-se como $(T-T_c)$ elevadas a certos expoentes (conhecidos como expoentes críticos), esses modelos portanto devem possuir os mesmos expoentes críticos.

Continuando com a formalização deste problema, propõem-se⁽¹⁸⁾ que seja formado por um gás na rede de adsorção cada sítio podendo ou não estar ocupado, dependendo apenas da regra de exclusão de vizinhos a um sítio já preenchido. Com isto não se está impondo restrição alguma sobre o número de partículas (sítios ocupados) que cada configuração poderá ter. Assim aparecerão desde configurações sem partículas até configurações com $N/3$ partículas onde N é o número de sítios de adsorção. Deve-se então incluir na função de partição, a ser escrita, a probabilidade de se ter, cada determinado número de partículas, adsorvidas no substrato. Isto é feito através da função Z que leva o nome de atividade e a função de partição é rebatizada como função de grã partição sendo dada por:

$$Z = \sum_{n=0}^{N/3} z^n g(n,N) \quad (2.1)$$

onde $g(n,N)$ é o número de maneiras permitidas que se pode colocar

Figura 7 a. - Átomos de Kr não permitindo a ocupação de 6 sítios adjacentes a cada sítio ocupado.

b. - Rede de adsorção : ---
 Sítios ocupados : •
 Sítios desocupados : 0, formam hexâgonos

c. - Cada um dos hexâgonos formados pelos sítios que devem estar desocupados. Poderão mover-se como um gás de hexâgonos duros.

n átomos em N sítios de adsorção.

Colocando em cada sítio i da rede de adsorção variáveis σ_i que poderão assumir valores 1 ou 0, indicando-nos se o sítio i está ou não ocupado podemos escrever a expressão (2.1) como:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} z^{\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n} \pi(1 - \sigma_i \sigma_j) \quad (2.2)$$

onde $\{\sigma\}$ são todas as configurações da rede, cuja possibilidade de existência já está incluída no termo $\pi(1 - \sigma_i \sigma_j)$, produto este efetuado sobre todas as ligações da rede se sítios de adsorção.

Prosseguiremos agora abandonando a rede de sítios de adsorção e usando no lugar dela, a rede quadrada indicada na figura 8, de maneira a efetuarmos o produto que aparece em (2.2) não mais sobre ligações, mas sim sobre todas as faces da nova rede, onde entende-se por face os menores quadrados que constituem essa rede.

Figura 8a. - Substrato hexagonal e os sítios de adsorção formando uma rede triangular. A rede quadrada aparece ao esquecermos as linhas tracejadas.

Figura 8b. - Rede quadrada: — .

Linhas que juntamente com as da rede quadrada completam a rede triangular: ---.
 $\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d$ são as variáveis de spin (0 ou 1) e na figura estão sobre os vértices de uma face.

Podemos então reescrever a expressão (2.2) como:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \pi \quad z^{\frac{(\sigma_a + \sigma_b + \sigma_c + \sigma_d)}{4}} (1 - \sigma_a \sigma_b) (1 - \sigma_a \sigma_c) \cdot (1 - \sigma_a \sigma_d) (1 - \sigma_b \sigma_d) (1 - \sigma_c \sigma_d) \quad (2.3)$$

onde novamente $\{\sigma\}$ são todas as configurações em que o sistema pode estar e, $\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d$ são variáveis colocadas nos vértices de cada face como mostrado na figura 8, de maneira que agora o produtório é feito sobre todas as faces.

Poderíamos também escrever (2.3) em termos do Peso Estatístico:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \pi \tilde{\omega}(\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d) \quad (2.4)$$

com

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}(\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d) = z^{\frac{\sigma_a + \sigma_b + \sigma_c + \sigma_d}{4}} & (1 - \sigma_a \sigma_b) (1 - \sigma_a \sigma_c) \cdot \\ & \cdot (1 - \sigma_a \sigma_d) (1 - \sigma_b \sigma_d) (1 - \sigma_c \sigma_d) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Onde agora, este peso estatístico definido por (2.5) não mais está sendo dado, como no capítulo anterior, em termos de apenas duas variáveis de spin e sim, em termos de quatro variáveis, cujas interações também não são mais somente duas a duas.

2.3. MODELO IRF. 8 VÉRTICES. ISING DOBRADO

Como dissemos, há outros modelos que podem ser definidos por energias dadas para faces em redes quadradas como a desenhada na figura 8b. Estes modelos são conhecidos por I.R.F., nome que vem do inglês (Interaction-Round-a-Face), mas que pode ser traduzido por "Interação-ao-Redor-de-uma-Face", sem que a sigla se altere.

Há seis desses modelos que já foram resolvidos exatamente, isto é, para estes modelos a energia livre foi calculada. Entre eles temos o hexágono duro⁽¹⁸⁾ já introduzido na seção anterior, o modelo de 8-Vértices⁽⁸⁻¹⁰⁾, o 6-Vértices⁽¹¹⁻¹³⁾, o Ising⁽²⁾ e o 3-spins⁽¹⁷⁾, sendo que estes últimos três são casos limites do modelo de 8-Vértices.

Vamos, em primeiro lugar, definir o modelo de 8-Vértices e estudar algumas de suas peculiaridades. Isto porque, este modelo, como veremos, é caracterizado por possuir simetria $Z(2) \times Z(2)$, sendo neste sentido um caso particular do modelo com o qual trabalharemos, de simetria $Z(N) \times Z(N)$.

Colocando em cada sítio da rede quadrada (figura 8b) variáveis σ_k que assumirão valores ± 1 ou -1 (que podem ser escritas como: $\sigma_k = e^{\frac{2\pi i}{N} k}$, com $N=2$ $k=0,1$), a energia de cada face para o 8-Vértices é escrita como:

$$\varepsilon(\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d) = J \sigma_a \sigma_d + K \sigma_b \sigma_c + M \sigma_a \sigma_b \sigma_c \sigma_d \quad (2.6)$$

onde J e K são os acoplamentos nas diagonais de cada face e M para a interação de 4 spins (4 corpos).

Como cada sítio poderá assumir dois valores, $\sigma = \pm 1$, e cada face terá 4 sítios, temos ao todo $2^4=16$ configurações de spins para cada face. Ao invés de usarmos $\sigma_k = \pm 1$ para designar cada variável, usamos $k=0,1$ (módulo 2) e nesta variável, mostramos abaixo todas as 16 configurações que surgem:

The diagram illustrates two rows of four square faces, each representing a configuration of spins at its four vertices. The vertices are marked by circles, and the edges are marked by either a circle or a '1'. The first row shows configurations where the product of spins on the diagonal is 1, and the second row shows configurations where the product is -1. Each configuration is represented by a square with vertices marked by circles and edges marked by either a circle or a '1'.

$$= A = e^{J' + K' + M'}$$

$$= B = e^{-J' - K' + M'}$$

Onde chamamos A,B,C,D aos pesos de Boltzman que são explicitados em termos de J,K,M através de (2.6). Onde $J' = -J/K_B T$ e o mesmo para K' e M' .

Para fazermos uma visualização gráfica deste modelo, desenharemos as interações diagonais J, como barras duplas (tracejada ou não, se for dupla é J), os K como barras simples (tracejada ou não, se for simples é K) e M como as próprias ligações das faces (figura 9).

Se fazemos $M=0$ (retirando a interação de 4 corpos), o que graficamente corresponde a desaparecer com as faces na figura 9, vemos que o modelo de 8-Vértices se desacopla em dois outros idênticos, mas independentes: um na rede lisa, outro na tracejada. Estes modelos resultantes são conhecidos por modelos de Ising, e a energia dada por:

$$J \sigma_a \sigma_d + K \sigma_b \sigma_c \quad (2.7)$$

é a energia para o chamado modelo de Ising dobrado (pois, como acabamos de mostrar, são dois).

Assim, ao fazermos $M=0$, obtemos novamente um modelo

que possui interações apenas de dois corpos.

Figura 9 - As interações do modelo de 8-Vértices,
 $\epsilon(\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d) = J\sigma_a\sigma_d + K\sigma_b\sigma_c + M\sigma_a\sigma_b\sigma_c\sigma_d$,
 representadas graficamente: As barras du-
 plas representam os acoplamentos Js, as
 simples os Ks, sendo que os quadrados da
 rede original são os Ms. Fazermos $M=0$ e-
 quivale a apagarmos a rede original e fi-
 carmos com duas sub-redes desacopladas
 (os spins de uma rede não interagem com
 os da outra): a tracejada e a lisa.

2.4. MODELO DE 8-VÉRTICES NA LINGUAGEM DE VÉRTICES. SIMETRIA $Z(N)$ E SIMETRIA $Z(2) \times Z(2)$

Modelos I.R.F. cujas variáveis na rede são da forma $\sigma_k = e^{\frac{2\pi i}{N}k}$ (N um número inteiro, $k = 0, 1 \dots N-1$) podem ser formulados de uma outra maneira a qual consiste em associar vértices à cada face, de peso estatístico $\tilde{\omega}(\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d)$, segundo as regras que mostramos abaixo. Nesta nova formulação é usual não mais nos referirmos às variáveis como $\sigma_k = e^{\frac{2\pi i}{N}k}$, mas sim aos próprios k s, não nos esquecendo apenas que esses últimos são variáveis módulo N^* .

Os vértices são associados à cada face da seguinte forma:

$$\sum_{\alpha_1 \alpha_2} \beta_1 \beta_2 \equiv$$

$$\equiv \tilde{\omega}(a, b, c, d) \quad (2.8)$$

* Módulo N , significa que podemos somar ou subtrair N à variável que ela não se altera, isto porque $\sigma_k = e^{\frac{2\pi i}{N}k}$, de maneira que se $k = k+N \rightarrow \sigma_{k \pm N} = e^{\frac{2\pi i}{N}(k \pm N)} = \sigma_k$.

onde $S_{\alpha_1 \alpha_2}^{\beta_1 \beta_2}$ é o peso estatístico escrito em termos das variáveis de vértice $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2$ que são dadas por:

$$\alpha_1 = c - a^*$$

$$\beta_1 = d - b$$

(Mod.N)

$$\alpha_2 = d - c$$

$$\beta_2 = b - a$$

Orientação para as diferenças. (2.9)

Notemos que não são todos os conjuntos de $\alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2$ que correspondem às configurações de spins, pois devido a (2.9) não podem ser escolhidos independentemente. De maneira que os vértices não nulos devem obedecer a:

$$\alpha_1 + \beta_1 = \beta_2 + \alpha_2 \quad (\text{Mod.N}) \quad (2.10)$$

Esta expressão é conhecida como a da conservação de carga (Mod.N), pois se chamamos α_1 e α_2 de variáveis de entrada nos vértices e β_1 e β_2 as de saída, temos, por (2.10), que a soma das variáveis de entrada é igual à de saída (veja exemplo 1).

Outra observação importante que pode ser feita é que ao associarmos vértices da maneira (2.9) automaticamente já estamos pressupondo que este modelo possua uma determinada simetria. Esta simetria é conhecida por simetria $Z(N)$ e é refletida pelo fato de que ao "girarmos" no plano complexo de $2\pi/N$ todos os spins de uma face, o vértice associado a ela através de (2.9) será o mesmo para esta face agora com os spins girados (exemplo 1). Girar a variável

*Obs.: lembrar que $c - a \neq a - c$, por isso impomos uma orientação para as diferenças.

$\sigma_k = e^{\frac{2\pi i}{N} k}$ de $2\pi/N$ é o mesmo que multiplicá-las por $\frac{2\pi}{N}$, ou então somar 1 à variável k. Portanto, devido às variáveis de vértices serem diferenças das variáveis a,b,c,d, quando somamos 1 a essas últimas variáveis, o valor de cada variável de vértice dada por (2.9), não se altera. E mais, devido a esta característica, cada vértice corresponderá a N configurações de spins (se tiver correspondente em spins).

EXEMPLO 1

Para $N = 3$, $\sigma_a = e^{\frac{2\pi i}{3} a}$; $a = 0,1,2 \pmod{3}$

a) o vértice não possui configuração de spins associada a ele, pois $\alpha_1 + \alpha_2 \neq \beta_1 + \beta_2$; $2 \neq 1 \pmod{3}$

b) o vértice possui 3 configurações de spins associada que são:

Simetria $Z(3)$: as 3 configurações de spins acima, possuem o mesmo peso estatístico.

Podemos então perceber, porque no caso $N=2$, o modelo recebe o nome de 8-Vértices: teremos apenas 8 vértices para as 16 configurações de spin.

Prosseguindo com o estudo deste modelo, desenhamos a seguir, novamente, as 16 configurações de spin, os 8 vértices correspondentes e veremos que este modelo possui ainda mais uma simetria $Z(2)$, além da que acabamos de descrever:

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{c} 0 \\ 0 \text{---} 0 \\ 0 \end{array} &= \begin{array}{c} 1 \quad 1 \\ | \quad | \\ 1 \quad 1 \end{array} = \begin{array}{c} 1 \quad 0 \\ | \quad | \\ 0 \quad 1 \end{array} = \begin{array}{c} 0 \quad 1 \\ | \quad | \\ 1 \quad 0 \end{array} = A \\
 & \quad S_{00}^{00} \quad \quad S_{11}^{11}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{c} 1 \\ 0 \text{---} 1 \\ 0 \end{array} &= \begin{array}{c} 1 \quad 0 \\ | \quad | \\ 1 \quad 0 \end{array} = \begin{array}{c} 0 \quad 0 \\ | \quad | \\ 1 \quad 1 \end{array} = \begin{array}{c} 1 \quad 1 \\ | \quad | \\ 0 \quad 0 \end{array} = B \\
 & \quad S_{01}^{01} \quad \quad S_{10}^{10}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{c} 0 \\ 0 \text{---} 0 \\ 1 \end{array} &= \begin{array}{c} 1 \quad 1 \\ | \quad | \\ 1 \quad 0 \end{array} = \begin{array}{c} 1 \quad 1 \\ | \quad | \\ 0 \quad 1 \end{array} = \begin{array}{c} 1 \quad 0 \\ | \quad | \\ 0 \quad 0 \end{array} = C \\
 & \quad S_{01}^{10} \quad \quad S_{10}^{01}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{c} 1 \\ 0 \text{---} 1 \\ 0 \end{array} &= \begin{array}{c} 1 \quad 0 \\ | \quad | \\ 1 \quad 1 \end{array} = \begin{array}{c} 0 \quad 0 \\ | \quad | \\ 1 \quad 0 \end{array} = \begin{array}{c} 1 \quad 1 \\ | \quad | \\ 0 \quad 1 \end{array} = D \\
 & \quad S_{01}^{11} \quad \quad S_{10}^{00}
 \end{aligned}$$

(2.11)

Os demais vértices são nulos, portanto a matriz S para os 8-Vértices cujos elementos são dados usando (2.8) e (2.6) é:

$$S = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 & D \\ 0 & B & C & 0 \\ 0 & C & B & 0 \\ D & 0 & 0 & A \end{bmatrix} * \quad (2.12)$$

*Obs.: Se $D=0$, este modelo é chamado de 6-Vértices.

Por (2.11) podemos ver que há sempre dois vértices para um mesmo Peso Estatístico: Podemos somar 1 a todas as variáveis que o peso estatístico da nova configuração continua sendo o mesmo o que equivale a dizer que:

$$\begin{matrix} \beta_1 & \beta_2 \\ S_{\alpha_1} & \alpha_2 \end{matrix} = \begin{matrix} \beta_1+1 & \beta_2+1 \\ S_{\alpha_1+1} & \alpha_2+1 \end{matrix} \quad (2.13)$$

Agora, em termos das variáveis de spin, esta simetria significa que podemos girar simultaneamente apenas os spins de uma das diagonais da face considerada, deixando a outra inalterada. Esta nova configuração permanece com o mesmo Peso Estatístico. Ou seja:

EXEMPLO 2

Para $N=2$ (modelo de 8-Vértices), $\sigma_a = e^{\frac{2\pi i}{2}a}$, $a=0,1 \pmod{2}$.

De (2.13):

$$\begin{matrix} S^0 & 0 \\ 0 & 0 \end{matrix} = \begin{matrix} S^1 & 1 \\ 1 & 1 \end{matrix}$$

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} = \begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}$$

Arrows labeled +1 indicate the transformation of the top and right spins.

$$\begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline 1 & 1 \end{array} = \begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 \end{array}$$

Arrows labeled +1 indicate the transformation of the top and right spins.

$$\begin{matrix} S^0 & 1 \\ 0 & 1 \end{matrix} = \begin{matrix} S^1 & 0 \\ 1 & 0 \end{matrix}$$

$$\begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \hline 0 & 1 \end{array} = \begin{array}{c|c} 1 & 1 \\ \hline 0 & 0 \end{array}$$

Arrows labeled +1 indicate the transformation of the top and right spins.

$$\begin{matrix} S^1 & 0 \\ 0 & 1 \end{matrix} = \begin{matrix} S^0 & 1 \\ 1 & 0 \end{matrix}$$

$$\begin{array}{c|c} 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array} = \begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array}$$

Arrows labeled +1 indicate the transformation of the top and right spins.

EXEMPLO 2 - continuação

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{cc|cc}
 1 & 1 & 0 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 1
 \end{array} \\
 \begin{array}{c} \text{+1} \end{array} \\
 \begin{array}{cc|cc}
 0 & 1 & 1 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 1
 \end{array} \\
 \begin{array}{c} \text{+1} \end{array} \\
 \begin{array}{cc|cc}
 1 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & 1 & 1 & 0
 \end{array} \\
 \begin{array}{c} \text{+1} \end{array}
 \end{array}$$

Diz-se então que este modelo possui simetria $Z(2) \times Z(2)$. Uma $Z(2)$ referente a mexermos em todos os spins de uma face e a outra referente ao mexermos apenas uma diagonal da face, deixando a outra inalterada.

2.5. MODELO DE BELAVIN. SIMETRIA $Z(N) \times Z(N)$

Podemos agora passar ao formalismo de vértices, definindo modelos diretamente através dessas novas variáveis, sem mais nos referirmos à spins. O 8-Vértices, pode portanto, também ser apresentado desta maneira e ao invés de usarmos a expressão (2.6) para defini-lo fazemos por:

$$S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} = \sum_{\alpha, \beta=0}^{N-1} \omega_{\alpha, \beta} \sigma_{\alpha, \beta}^{i_1 j_1} \sigma_{\alpha, \beta}^{* i_2 j_2} \quad (2.14)$$

σ^* é a transposta conjugada.

onde $\sigma_{0,0}$ é a matriz identidade e as demais são as matrizes de

Pauli, com

$$\sigma_{0,1} = \sigma^x$$

$$\sigma_{1,1} = -i\sigma^y$$

$$\sigma_{1,0} = \sigma^z$$

e podemos identificar $\omega_{\alpha,\beta}$ usando (2.11) e (2.12), como sendo:

$$\omega_{00} = \frac{1}{2} (A+B)$$

$$\omega_{10} = \frac{1}{2} (A-B)$$

$$\omega_{01} = \frac{1}{2} (C+D)$$

$$\omega_{1,1} = \frac{1}{2} (C-D) \quad (2.16)$$

variável essa que é conhecida como amplitude da matriz S.

Como já vimos na secção anterior este é um modelo que possui simetria $Z(2) \times Z(2)$. Um modelo mais geral, com simetria $Z(N) \times Z(N)$ foi obtido por Belavin⁽²⁰⁾ e a expressão que o define é uma generalização da expressão (2.14) e é dada abaixo:

$$S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} = \sum_{\alpha, \beta}^{N-1} \omega_{\alpha, \beta}^{(N)} I_{\alpha, \beta}^{i_1 j_1} \bar{I}_{\alpha, \beta}^{i_2 j_2} \quad (2.17)$$

com

$$I_{\alpha, \beta} = \zeta^\alpha R^\beta \quad (2.18)$$

onde

$$\zeta = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & Z & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & Z^{N-1} & \\ & & & & \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

e

$$R = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & . & . & . & . & 0 \\ 0 & 0 & 1 & . & . & . & . & 0 \\ . & . & . & & & & & . \\ . & . & . & & & & & . \\ . & . & . & & & & & . \\ 1 & 0 & 0 & . & . & . & . & 0 \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

onde $Z = e^{\frac{2\pi i}{N}}$ e com a barra em I significando complexo conjugado e $\omega_{\alpha, \beta}$ como veremos mais a frente, deverá ser dada por funções θ_s de Jacobi, para que o modelo seja solúvel.

A simetria $Z(2) \times Z(2)$, quando a discutimos em termos de vértices surgiu através de duas equações, a de conservação de carga (2.10) e de uma outra dada por (2.13). Neste modelo as mesmas equações definem a simetria $Z(N) \times Z(N)$ e podemos resumí-las por:

$$S^{(1)(2)} = R^{(1)} \otimes R^{(2)} S^{(1)(2)} R^{(2)-1} \otimes R^{(1)-1} \quad (2.21a)$$

$$S^{(1)(2)} = \zeta^{(1)} \otimes \zeta^{(2)} S^{(1)(2)} \zeta^{(2)-1} \otimes \zeta^{(1)-1} \quad (2.21b)$$

Onde S é dada por (2.17), ζ e R por (2.19) e (2.20) e os índices (1) e (2) estão significando os conjuntos i_1, j_1 e i_2, j_2 , respec-

tivamente, sobre os quais os R estão atuando; e $\otimes$ é o símbolo para produto direto.

Ao efetuarmos explicitamente as operações indicadas por (2.21a) e (2.21b), obtemos exatamente a condição (2.13) e a equação de conservação de carga, dada por (2.10), respectivamente.

Observamos, além disto, que as duas equações acima estão expressando o mesmo tipo de simetria pois, a matriz ζ é a própria R na base em que esta última torna-se diagonal. Isto significa que podemos passar de uma expressão a outra por transformação de similaridade e desta maneira expressam duas simetria $Z(N)$. Diz-se portanto que este modelo possui simetria $Z(N) \times Z(N)$. (E é este o modelo de Mecânica Estatística com o qual trabalharemos).

2.6. MODELO DE BELAVIN ESCRITO EM TERMOS DOS SPINS. SIMETRIA $Z(N) \times Z(N)$ SOB ESTA ÓPTICA.

O modelo de Belavin é dado diretamente em termos dos vértices. Se quisermos saber como poderá ser formulado em termos das variáveis de spins devemos voltar à associação dada por (2.9), reescrever os vértices dados por (2.17) nestes termos e achar quais são as operações que podemos fazer com estas variáveis que deixam o peso estatístico invariante.

Ao fazermos isto, percebemos (isto será mostrado no Capítulo IV, secção 2.2) que as únicas interações que devem aparecer são as do tipo $b-c$, $a+d-b-c$ e combinações destas duas, onde a, b, c, d são as variáveis das faces dadas por (2.9). Por outro lado, trabalhando com $N=2$, $N=3$ e $N=4$ percebemos também que as configurações de spin que possuam a mesma energia são dadas pela seguinte regra:

$$\begin{array}{c|c} a & b \\ \hline c & d \end{array} = \begin{array}{c|c} a' & b' \\ \hline c' & d' \end{array} \quad \text{com} \quad \begin{aligned} a' &= a+3k+q \\ b' &= b+2k+q \\ c' &= c+2k+q \\ d' &= d+k+q \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde $a, b, c, d, k, q = 0.1 \dots N-1 \pmod{N}$ e esta equação está significando que a configuração de a, b, c, d deve possuir o mesmo Peso Estatístico que de a', b', c', d' , o que é o mesmo que dizer que:

$$\tilde{\omega}(a, b, c, d) = \tilde{\omega}(a', b', c', d') \quad (2.23)$$

com a', b', c', d' , dados por (2.22).

Portanto, para escrevermos $\tilde{\omega}(a, b, c, d)$ explicitamente como função de a, b, c, d , devemos encontrar quais são as operações que satisfazem (2.23). E estas, confirmando a primeira afirmação, são apenas do tipo, $b-c$, $(a+d-b-c)$, combinações destas e seus negativos, pois:

$$b-c = b'-c' \quad (2.24)$$

$$\text{e } a+d-b-c = a'+b'-c'-d'$$

Vejamos, para o caso do 8-Vértices ($N=2$), o que a equação (2.22) significa:

EXEMPLO 3

para $a=0$
 $b=0$
 $c=0$
 $d=0$

}

$q = 0$

$k=0$

0	0
0	0

=

$k=1$

1	0
0	1

$\parallel$ $\parallel$

$q = 1$

$k=0$

1	1
1	1

=

$k=1$

0	1
1	0

= A

onde A é o peso estatístico para estas configurações, ver (2.11).

O peso estatístico como função de (a,b,c,d) para este modelo é dado por $e^{-\epsilon \frac{(a,b,c,d)}{k_B T}}$, onde $\epsilon(a,b,c,d)$ é a dada por (2.6). Se substituirmos nesta última equação as variáveis σ_k por z^k , onde $z = e^{2\pi i/2}$, esta energia é reescrita como:

$$\epsilon(a,b,c,d) = e^{J Z^{(a+d)} + K Z^{(b+c)} + M Z^{(a+b+c+d)}}$$

ou então, como a,b,c,d são variáveis Mod.2:

$$(a,b,c,d) = e^{J Z^{(a+d-b-c)} + K Z^{(b-c)} + M Z^{(a+d-b-c)}}$$

de forma que só aparecem mesmo as operações b-c, a+d-b-c e a soma destas duas.

É interessante usar (2.22) ou (2.23) para que volte-mos novamente à simetria $Z(N) \times Z(N)$, manifestada agora em termos de spins: Podemos somar 1 à todas as variáveis da face (ou seja, girar de $\frac{2\pi}{N}$ os spins $\sigma_a, \sigma_b, \sigma_c, \sigma_d$ desta face) que devido à variável q, (em 2.22) (faço $k=0$) ainda assim o peso estatístico permanece o mesmo. Podemos também deixar b e c invariante ($b=b'$ e $c=c'$, que é fazer $q=-2k$) e somar 1 à variável a e subtrair 1 de d e ainda esta

remos sobre o mesmo Peso Estatístico. (Em termos da variável σ , significa deixarmos σ_b e σ_c invariantes, girar σ_a de $2\pi/N$ e σ_d de $-2\pi/N$). E resumindo estas simetrias, temos:

$$\begin{array}{c|c} a & b \\ \hline c & d \end{array} = \begin{array}{c|c} a+q & b+q \\ \hline c+q & d+q \end{array} \quad (2.25a)$$

$$\begin{array}{c|c} a & b \\ \hline c & d \end{array} = \begin{array}{c|c} a+q & b \\ \hline c & b-q \end{array} \quad (2.25b)$$

$$q = 0, 1 \dots N-1.$$

2.7. QUIRALIDADE. CLASSE DE UNIVERSALIDADE: LIGAÇÃO COM O FENÔMENO DE ADSORÇÃO DE Kr EM GRAFITE

Neste modelo encontramos a presença da quiralidade como foi definida no Capítulo I. Aqui ela é devida a existência de interações que possuem o termo $b-c$ (como constatada na seção anterior), pois se trocarmos o spin b pelo c , obtemos um novo valor para esta função (e portanto, para o novo peso estatístico como os spins trocados), desde que $b-c \neq c-b$, para todo N maior do que 2. Ou seja, estamos diante de um modelo quiral para $N > 2$.

EXEMPLO 4

Para $N=3$

$$\frac{a}{c} \bigg| \frac{b}{d} = \tilde{\omega}(a,b,c,d) = e^{-\frac{\varepsilon(a,b,c,d)}{K_B T}} \quad (1)$$

com $a,b,c,d = 0,1,2$ e $\sigma_a = e^{\frac{2\pi i a}{3}}$

Se quisermos escrever $\varepsilon(a,b,c,d)$ explicitamente como função de a,b,c,d , afirmamos que as únicas operações que poderão a parecer são:

$$\alpha = b - c$$

$$\beta = a + d - b - c, \quad (2)$$

Combinações destas e seus negativos que são, no caso $N=3$:

$$\alpha, -\alpha, \beta, -\beta, \alpha + \beta, -(\alpha + \beta), (\beta - \alpha), -(\beta - \alpha) \quad (3)$$

De maneira que, usando (1), (2) e (3):

$$\varepsilon(a,b,c,d) = J_1 Z^\alpha + J_2 Z^{(\alpha+\beta)} + J_3 Z^{(\beta-\alpha)} + J_4 Z^\beta + \text{C.C.}$$

onde $Z = e^{2\pi i/3}$, com α e β dados por (2); ou então em termos de cossenos, ao escrevermos os acoplamentos J_s como:

$$J_i = K_i e^{\frac{2i\pi}{3}\theta_i} \quad \text{e assim:}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon(a,b,c,d) = & K_1 \cos \frac{2\pi}{3}(\alpha + \theta_1) + K_2 \cos \frac{2\pi}{3}(\alpha + \beta + \theta_2) + \\ & + K_3 \cos \frac{2\pi}{3}(\beta - \alpha + \theta_3) + K_4 \cos \frac{2\pi}{3}(\beta + \theta_4) = \end{aligned}$$

EXEMPLO 4 - continuação

$$= K_1 \cos \frac{2\pi}{3}(b-c+\theta_1) + K_2 \cos \frac{2\pi}{3}(a+d+c+\theta_2) + \\ + K_3 \cos \frac{2\pi}{3}(a+d+b+\theta_3) + K_4 \cos \frac{2\pi}{3}(a+d-b-c+\theta_4)$$

Observações:

1) Temos interações: 1) em apenas uma das diagonais

$$(\alpha): \begin{array}{c} b \\ / \\ c \end{array}$$

2) de 4 corpos $(\beta):$ $\begin{array}{cc} a & b \\ | & | \\ c & d \end{array}$

3) de 3 corpos $(\alpha+\beta)$ e $(\beta-\alpha):$ $\begin{array}{cc} a & b \\ / & \backslash \\ c & d \end{array}$

2) A quiralidade, nesta notação de cossenos, está refletida no aparecimento do parâmetro θ_1 , pois não mais $b=-b$, necessitando do termo complexo.

Agora, já não precisamos mais no espantar com este aspecto curioso e nem mesmo desprezar o modelo, por aparentemente não corresponder a um fenômeno físico, pois como vimos pelo Capítulo I pode existir por detrás um fenômeno como o da adsorção.

E mais ainda, podemos inclusive esperar que para o caso $N=3$, o modelo de Belavim esteja na mesma classe de universalidade que o fenômeno de adsorção de Kr em grafite: Isto se pensarmos agora nos expoentes críticos, não mais como sendo expoentes de $(T-T_c)$ mas sim como da função de correlação ξ , pertode T_c (função esta que pode ser definida como o menor comprimento do sistema que ainda conserva as suas propriedades). Isto porque é sabido que

o modelo $Z(2) \times Z(2)$ (o 8-Vértices), em termos do comprimento de cor relação, possui os mesmos expoentes críticos do modelo de Ising, que possui simetria $Z(2)$. Portanto, podemos esperar o mesmo para o $Z(3) \times Z(3)$ em relação ao fenômeno da adsorção de Kr em grafite, já que este fenômeno está na mesma classe de universalidade do modelo de Potts que possui simetria $Z(3)$.

Com esta discussão finalizamos este capítulo. Como estamos interessados em encontrar o Hamiltoniano Quântico associado a este modelo de simetria $Z(N) \times Z(N)$ e como o Estado Fundamental deste Hamiltoniano é encontrado via energia livre deste modelo, de dicaremos o próximo capítulo a métodos utilizados para resolver mo delos bidimensionais de Mecânica Estatística.

CAPÍTULO III

CAPÍTULO III

EQUAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA GENERALIZADA E EQUAÇÕES
PARA A ENERGIA LIVRE

3.1. INTRODUÇÃO

Um modelo de Mecânica Estatística é dito exatamente solúvel quando se consegue calcular a sua energia livre por sítio, no limite termodinâmico. São poucos os modelos que podem ser incluídos nesta classe e entre esses poucos, muito são problemas unidimensionais, um reduzido número são problemas bidimensionais e, não há nenhum que realmente seja tridimensional. Isto deve ocorrer porque os cálculos necessários para resolver problemas unidimensionais são relativamente simples, sendo que o mesmo já não se passa com problemas bidimensionais e tridimensionais, que exigem métodos de resolução bem mais sofisticados.

Neste capítulo nos ateremos a problemas bidimensionais visando o cálculo da energia livre do modelo de Belavin, $Z(N) \times Z(N)$. Assim sendo, nos direcionaremos mais especificamente aos que se enquadram no modelo de I.R.F. e podem ser descritos em termos de vértices da forma apresentada no capítulo anterior. Para estes problemas, devido às dificuldades encontradas, tem-se procurado por métodos que sistematizem sua resolução. Esses métodos normalmente envolvem a Matriz de Transferência*, pois como se sabe a função de partição, no limite termodinâmico, é dada pelo mais autovalor des-

* A definição de Matriz de Transferência e os cálculos que se seguem, são feitos na próxima secção.

ta matriz.

Será dentro deste contexto, isto é, o de resolução de problemas bidimensionais, que queremos apresentar a Relação Triângulo Estrela Generalizada e chamaremos a atenção para a sua importância na resolução desses problemas, sob o ponto de vista de que possibilita a construção de equações funcionais para a energia livre, de maneira que a possamos calcular no limite termodinâmico. Estas equações funcionais podem ser, ou construídas diretamente para o modelo I.R.F., ou então, para uma sub-classe deste modelo que considera cada face como possuidora de interações apenas nas diagonais. Nesta sub-classe o modelo se desacopla em duas sub-redes quadradas: a tracejada e a lisa, como mostrado na figura 9 do capítulo anterior.

No primeiro caso, tem-se por exemplo, o cálculo feito por Baxter⁽¹⁴⁾ para o 8-Vértices, sendo que será um cálculo semelhante a este o que será feito para o modelo de Belavin para o qual as equações funcionais são propostas por Belavin e Zamolodchikov*.

No segundo caso (quando o modelo de I.R.F. pode se desacoplar em duas sub-redes) há equações funcionais para a energia livre proposta por Pokrovski e Bashilov⁽²¹⁾ e especificamente para o modelo de Ising, Baxter e Enting⁽⁷⁾, conseguiram montar equações e calcular todos os auto-valores (não apenas o maior) da matriz de transferência. Neste segundo caso, é interessante saber que a Relação Triângulo Estrela Generalizada se desacopla em duas idênticas que são conhecidas por Relação-Triângulo-Estrela. É esta relação que foi mencionada brevemente, pela primeira vez, por Onsager⁽²⁾ em seu trabalho de 1944.

*pois neste caso, lembrem-se que não teremos interações apenas nas diagonais, vejam o exemplo 4, no capítulo anterior.

Ainda neste capítulo, veremos que a Relação Triângulo Estrela Generalizada, quando é reescrita, não mais utilizando-se variáveis de spins, mas sim variáveis de vértices (através de (2.9)), é conhecida por Equação dos Triângulos (ou Equação de Fatorização, ou ainda Equação de Yang-Baxter), equação esta que aparece na teoria de espalhamento relativístico, como condição de fatorização de uma matriz S de muitos corpos.

3.2. RELAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA GENERALIZADA (14)

Associando à cada face da rede (figura 10), um peso estatístico dada por $\tilde{w}(\sigma_i, \sigma_{i+1}, \sigma'_{i+1}, \sigma'_i)$ onde agora i está apenas indicando em que sítio encontra-se o spin, a matriz de transferência será dada por:

$$V_{\{\sigma, \sigma'\}} = \prod_{i=1}^n \tilde{w}(\sigma_i, \sigma_{i+1}, \sigma'_{i+1}, \sigma'_i) \quad (3.1)$$

ou seja, por um produto de todos os pesos estatísticos de uma "linha" de faces, onde n é o número de sítios em cada linha da rede e estamos usando condições de contorno: $\sigma_{n+1} = \sigma_1$ e $\sigma'_{m+1} = \sigma'_1$, onde m é o número de linhas.

Figura 10 - Rede quadrada onde colocamos variáveis σ em todos os sítios.

Observação: Se chamamos $\{\sigma_1\}$ ao conjunto de spins da primeira linha da rede, $\{\sigma_2\}$ de segunda, ..., $\{\sigma_m\}$ da última, podemos escrever a função de partição como:

$$Z = \sum_{\{\sigma_1\}} \dots \sum_{\{\sigma_m\}} V_{\{\sigma_1, \sigma_2\}} V_{\{\sigma_2, \sigma_3\}} \dots V_{\{\sigma_m, \sigma_1\}} = \text{traço } V^m \quad (3.2)$$

ou no limite termodinâmico

$$Z = \lambda^m$$

onde λ é o maior autovalor de V .

Continuando e, associando às faces um novo peso estatístico $\tilde{\omega}(\sigma_i, \sigma_{i+1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1})$ onde $\tilde{\omega}'$ possui a mesma dependência funcional dos spins que $\tilde{\omega}$ (apenas com diferentes constantes de acoplamento), teremos uma outra matriz de transferência V' dada por:

$$V'_{\{\sigma, \sigma'\}} = \pi_{i=1} \tilde{\omega}'(\sigma_i, \sigma_{i+1}, \sigma'_i, \sigma'_{i+1}) \quad (3.4)$$

Agora queremos encontrar uma relação entre esses pesos de Boltzman, $\tilde{\omega}$ e $\tilde{\omega}'$, de maneira que quando satisfeita possamos assegurar que as matrizes V e V' comutam. Esta relação que foi deduzida por Baxter⁽¹⁴⁾ (a sua derivação é mostrada no Apêndice A) é conhecida como Relação Triângulo Estrela Generalizada e é dada por

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} \tilde{\omega}(\sigma_1, \mu_2, \sigma, \mu_3) \tilde{\omega}'(\sigma_2, \mu_3, \sigma, \mu_1) \tilde{\omega}''(\sigma_3, \mu_1, \sigma, \mu_2) = \\ = \sum_{\mu} \tilde{\omega}''(\mu, \sigma_2, \mu_3, \sigma_1) \tilde{\omega}'(\mu, \sigma_1, \mu_2, \sigma_3) \tilde{\omega}(\mu, \sigma_3, \mu_1, \sigma_2) \end{aligned} \quad (3.5)$$

para todos os valores de spin $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ e onde $\tilde{\omega}_r(a, b, c, d) = \tilde{\omega}'(d, a, b, c)$ e $\tilde{\omega}''$ é um peso de Boltzman qualquer (com a mesma dependência funcional que os outros) a nossa disposição. Além disto denotamos os spins por μ e σ para diferenciarmos bem os spins que pertencem a uma ou outra diagonal de cada face (não nos esquecendo que os Pesos Estatísticos $\tilde{\omega}$ são para faces).

Para melhor visualizarmos esta relação pode-se fazer o seguinte gráfico:

Figura 11 - Representação gráfica da Relação-Triângulo Estrela Generalizada dada por (3.5).

E a relação (3.5) pode ser interpretada como se impu-
séssemos que a função de partição, (com os spins externos em aber-
to) para as duas redes da figura 11, seja a mesma.

3.3. RELAÇÃO TRIÂNGULO-ESTRELA

Como mencionamos na introdução, quando temos interações apenas entre variáveis nas diagonais de cada face, implicando que os spins μ pertencem a uma sub rede diferente da dos spins σ^* (ou seja, os spins σ nunca interagem com os spins μ), a Relação Triângulo Estrela Generalizada torna-se o que se conhece por Relação-Triângulo Estrela.

Neste caso, portanto, os pesos estatísticos fatoram-se:

$$\tilde{w}(\sigma_i, \mu_{i+1}, \sigma_{i+1}, \mu_i) = w(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \bar{w}(\mu_{i+1}, \mu_i) \quad (3.6)$$

onde $\bar{w}$: pesos apenas para ligações, (não mais para faces) e a relação (3.5) torna-se:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} w(\sigma_1, \sigma) w_r'(\sigma_2, \sigma) w''(\sigma_3, \sigma) \bar{w}(\mu_2, \mu_3) \bar{w}_r'(\mu_3, \mu_1) \bar{w}''(\mu_1, \mu_2) = \\ = \sum_{\mu} w''(\mu, \mu_3) w_r'(\mu, \mu_2) w(\mu, \mu_1) \bar{w}''(\sigma_2, \sigma_1) \bar{w}_r'(\sigma_1, \sigma_3) \bar{w}(\sigma_3, \sigma_2) \end{aligned} \quad (3.7)$$

ou ainda:

$$\sum_{\sigma} w(\sigma_1, \sigma) w_r'(\sigma_2, \sigma) w''(\sigma_3, \sigma) = \lambda \bar{w}''(\sigma_2, \sigma_1) \bar{w}_r'(\sigma_1, \sigma_3) \bar{w}(\sigma_3, \sigma_2) \quad (3.8a)$$

$$\sum_{\mu} w''(\mu, \mu_3) w_r'(\mu, \mu_2) \bar{w}(\mu, \mu_1) = \lambda \bar{w}(\mu_2, \mu_3) \bar{w}_r'(\mu_3, \mu_1) \bar{w}''(\mu_1, \mu_2) \quad (3.8b)$$

onde λ depende apenas das constantes de acoplamento.

* como no esquema da figura 9.

Estas duas equações são as que se conhece por Triângulo Estrela e também podemos fazer uma visualização delas, partindo da figura 11:

Figura 12 - Visualização gráfica da equação (3.8a), conhecida por Relação-Triângulo-Estrela.

E daí o nome Triângulo - Estrela

3.4. EQUAÇÃO-TRIÂNGULO-ESTRELA-GENERALIZADA SOB O FORMALISMO DE VÉRTICES OU EQUAÇÃO DOS TRIÂNGULOS

Podemos associar vértices a todas as faces da rede da figura 10 e trabalharmos com os pesos de Boltzman nestas novas variáveis, passando do formalismo de spins para o de vértices, ou vice-versa, através das regras (2.8) e (2.9). Vamos então escrever a matriz de transferência, agora para uma "linha" de vértices (figura 13).

Figura 13 - "linha" contendo n vértices correspondentes às n faces de uma linha da figura

De maneira que para esta "linha" podemos construir a seguinte matriz:

$$\mathcal{J}_{\gamma_1 \gamma_1'}^{\{\alpha, \alpha'\}} = \begin{matrix} \gamma_2^{\alpha_1'} & \gamma_3^{\alpha_2'} & \gamma_4^{\alpha_3'} & \dots & \gamma_1^{\alpha_n'} \\ S(u) & S(u) & S(u) & \dots & S(u) \\ \gamma_1^{\alpha_1} & \gamma_2^{\alpha_2} & \gamma_3^{\alpha_3} & \dots & \gamma_n^{\alpha_n} \end{matrix} \quad (3.9)$$

onde estamos somando sobre os índices repetidos e a dependência que peso de Boltzman tem das constantes de acoplamento está sendo colocada na variável u , conhecida por parâmetro espectral.

A matriz de transferência T , para a qual temos que $Z = \text{traço } T^m$ (onde m é o número de "linhas") é dada por:

$$\begin{aligned} T_{\{\alpha, \alpha'\}}^{\{\alpha, \alpha'\}} &= \sum_{\gamma_1} \mathcal{J}_{\gamma_1 \gamma_1'}^{\{\alpha, \alpha'\}} = \\ &= \text{traço } \mathcal{J}^{\{\alpha, \alpha'\}} \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde foi usada condição de contorno cíclica.

Agora supondo que as "linhas" de vrtices da figura 13 tenham diferentes parmetros espectrais. A primeira digamos u e a segunda v.

Figura 14 - Duas "linhas" de vrtices representando o produto $\mathcal{T}_{\lambda_1 \lambda_1'}^{\{\alpha, \alpha''\}}(u) \mathcal{T}_{\gamma_1 \gamma_1'}^{\{\alpha'', \alpha'\}}(v)$ (estamos somando sobre α'').

Queremos saber quem a matriz $R(u,v)$ que satisfar a relao abaixo (que uma relao de comutao escrita da maneira mais geral possvel):

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\lambda_1 \lambda_1'}^{\{\alpha, \alpha''\}}(u) \mathcal{T}_{\gamma_1 \gamma_1'}^{\{\alpha'', \alpha'\}}(v) R_{\lambda_1' \gamma_1'}^{\lambda_1'' \gamma_1''}(u,v) = \\ = R_{\lambda_1 \gamma_1}^{\lambda_1'' \gamma_1''}(u,v) \mathcal{T}_{\gamma_1' \gamma_1''}^{\{\alpha, \alpha''\}}(v) \mathcal{T}_{\lambda_1'' \lambda_1'}^{\{\alpha'', \alpha'\}}(u) \end{aligned} \quad (3.11)$$

(ndices repetidos so contrados)

Nada nos impede de associar um vrtice a $R_{\lambda \gamma}^{\lambda' \gamma'}$, chamando-o de $S_{\lambda \gamma}^{\lambda' \gamma'}(u,v)$ de maneira que possamos escrever (3.11) atravs do seguinte desenho:

$$\mathcal{T}_{\lambda_1 \lambda_1''}^{\{\alpha, \alpha''\}}(u) \mathcal{T}_{\gamma_1'' \gamma_1}^{\{\alpha'', \alpha'\}}(v) S_{\lambda_1'' \gamma_1'}^{\lambda_1' \gamma_1''}(u, v) =$$

$$S_{\lambda_1' \gamma_1''}^{\lambda_1'' \gamma_1'}(u, v) \mathcal{T}_{\gamma_1' \gamma_1''}^{\{\alpha, \alpha''\}}(v) \mathcal{T}_{\lambda_1'' \lambda_1'}^{\{\alpha'', \alpha'\}}(u) \quad (3.12)$$

Figura 15 - Representação gráfica da Relação de Comutação (3.12)

Mas, o mais importante agora é notar que se tivermos cada matriz representada apenas por um vértice na relação (3.12) e portanto esta relação for satisfeita com apenas três vértices, a relação inteira, com todos os vértices, também o será. Ou seja, se (3.13), dada por:

$$\begin{array}{c}
 S_{\lambda_1 \alpha_1}^{\lambda_1'' \alpha_1''}(u) \quad S_{\lambda_1' \gamma_1'}^{\lambda_1' \gamma_1''}(u, v) \quad S_{\alpha_1' \gamma_1'}^{\alpha_1' \gamma_1''}(v) = \\
 S_{\alpha_1' \gamma_1'}^{\alpha_1'' \gamma_1''}(v) \quad S_{\lambda_1' \gamma_1'}^{\lambda_1'' \gamma_1''}(u, v) \quad S_{\lambda_1' \alpha_1'}^{\lambda_1'' \alpha_1''}(u)
 \end{array} \quad (3.13)$$

Figura 16 - Representação gráfica da equação (3.13).

Esta equação é conhecida por Equação dos Triângulos (índices repetidos estão contraídos).

for satisfeita, então (3.12) também o será. Isto é provado no Apêndice A e esta nova relação, a (3.13), é conhecida como Equação dos Triângulos⁽²²⁾ (ou Equação de Fatorização ou ainda Equação de Yang-Baxter).

O próximo passo é mostrar que a Equação dos Triângulos é exatamente a nossa conhecida Relação Triângulo Estrela Generalizada. Para isto devemos retornar à linguagem de faces através de (2.8) e usar (2.9) para conectar as variáveis de spins com as

de vértice. De maneira que, associando spins desta forma à figura 16, obtemos a figura 17:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha_1''} \sum_{\gamma_1''} \sum_{\lambda_1''} S_{\lambda_1 \alpha_1}^{\lambda_1'' \alpha_1''}(u) S_{\lambda_1'' \gamma_1}^{\lambda_1' \gamma_1''}(u,v) S_{\alpha_1' \gamma_1}^{\alpha_1'' \gamma_1''}(v) = \\ \sum_{\alpha_1''} \sum_{\gamma_1''} \sum_{\lambda_1''} S_{\alpha_1 \gamma_1}^{\alpha_1'' \gamma_1''}(v) S_{\lambda_1 \gamma_1}^{\lambda_1'' \gamma_1''}(u,v) S_{\lambda_1' \alpha_1}^{\lambda_1'' \alpha_1''}(u) \end{aligned} \quad (3.14)$$

Figura 17 - Faces com variáveis $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma$, associadas aos vértices da equação dos triângulos, dada por (3.14) e representada graficamente pela figura 16.

Identificando cada vértice da equação (3.14) com suas respectivas faces, através da figura 17, temos que:

$$S_{\lambda_1 \alpha_1}^{\lambda_1'' \alpha_1''}(u) \equiv \tilde{\omega}_S(\sigma_1, \mu_2, \sigma, \mu_3) \equiv \tilde{\omega}(\sigma_1, \mu_2, \sigma, \mu_3)$$

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \lambda_1'' \\
 \sigma \\
 \lambda_1'' \\
 \mu_2 \\
 \sigma_3 \\
 \lambda_1'
 \end{array}
 \end{array}
 \equiv S_{\lambda_1' \gamma_1''}^{\lambda_1'' \gamma_1''}(u, v) \equiv \tilde{\omega}_S''(\mu_2, \sigma_3, \mu_1, \sigma) \equiv \tilde{\omega}''(\sigma_3, \mu_1, \sigma, \mu_2)$$

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \lambda_1' \\
 \mu_3 \\
 \sigma_2 \\
 \sigma \\
 \mu_1 \\
 \lambda_1''
 \end{array}
 \end{array}
 \equiv S_{\alpha_1' \gamma_1''}^{\alpha_1' \gamma_1''}(v) \equiv \tilde{\omega}_S'(\sigma, \mu_1, \sigma_2, \mu_3) \equiv \tilde{\omega}_r'(\sigma_2, \mu_3, \sigma, \mu_1)$$

(3.15a)

e

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \lambda_1'' \\
 \sigma_1 \\
 \mu_2 \\
 \sigma_3 \\
 \lambda_1'
 \end{array}
 \end{array}
 \equiv S_{\alpha_1' \gamma_1''}^{\alpha_1'' \gamma_1''}(v) \equiv \tilde{\omega}_S'(\mu_2, \sigma_3, \mu, \sigma_1) \equiv \tilde{\omega}_r'(\mu, \sigma_1, \mu_2, \sigma_3)$$

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \lambda_1'' \\
 \mu_3 \\
 \sigma_2 \\
 \sigma_1 \\
 \mu \\
 \lambda_1'
 \end{array}
 \end{array}
 \equiv S_{\lambda_1' \gamma_1''}^{\lambda_1'' \gamma_1''}(u, v) \equiv \tilde{\omega}_S''(\sigma_1, \mu, \sigma_2, \mu_3) \equiv \tilde{\omega}''(\mu, \sigma_2, \mu_3, \sigma_1)$$

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{c}
 \alpha_1' \\
 \sigma_2 \\
 \mu_1 \\
 \mu \\
 \sigma_3 \\
 \lambda_1''
 \end{array}
 \end{array}
 \equiv S_{\lambda_1'' \alpha_1'}^{\lambda_1' \alpha_1'}(u) \equiv \tilde{\omega}_S(\mu, \sigma_3, \mu_1, \sigma_2) \equiv \tilde{\omega}(\mu, \sigma_3, \mu_1, \sigma_2)$$

(3.15b)

onde estamos dizendo que: $S(u) = \tilde{\omega}_S$, $S(v) = \tilde{\omega}_S'$, $S(u, v) = \tilde{\omega}_S''$ e para reescrevermos (3.14) diretamente na mesma linguagem de (3.5) devemos ter as seguintes correspondências:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\omega}_S(a, b, c, d) &= \tilde{\omega}(a, b, c, d) \\
 \tilde{\omega}_S''(a, b, c, d) &= \tilde{\omega}''(b, c, d, a) \\
 \tilde{\omega}_S'(a, b, c, d) &= \tilde{\omega}_r'(c, d, a, b)
 \end{aligned}$$

(3.15c)

e como por (2.9):

$$\begin{aligned}\alpha_1'' &= \sigma^{-\mu_3} \\ \gamma_1'' &= \mu_1^{-\sigma} \\ \lambda_1'' &= \mu_2^{-\sigma}\end{aligned}\tag{3.16}$$

podemos transformar os somatórios sobre α_1'' , γ_1'' e λ_1'' em somatórios sobre σ (ou μ) de maneira que, usando (3.15a) e (3.15b) (3.14) torna-se

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma} \tilde{\omega}(\sigma_1, \mu_2, \sigma, \mu_3) \tilde{\omega}''(\sigma_3, \mu_1, \sigma, \mu_2) \tilde{\omega}'_r(\sigma_2, \mu_3, \sigma, \mu_1) &= \\ = \sum_{\mu} \tilde{\omega}'_r(\mu, \sigma_1, \mu_2, \sigma_3) \tilde{\omega}''(\mu, \sigma_2, \mu_3, \sigma_1) \tilde{\omega}(\mu, \sigma_3, \mu_1, \sigma_2)\end{aligned}\tag{3.17}$$

que é exatamente a Relação Triângulo Estrela Generalizada, dada por (3.5).

3.5. RELAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA E EQUAÇÕES FUNCIONAIS PARA A ENERGIA LIVRE

A equação dos triângulos dada por (3.13), aparece na teoria de espalhamento relativístico como condição de Fatorização de uma matriz S de muitos corpos. Neste caso, a figura 16 pode ser entendida como trajetórias no plano espaço-tempo de três partículas que carregam carga $\gamma_1, \lambda_1, \alpha_1$ e interagem duas a duas através de uma matriz S . A carga, devido à correspondência dos vértices com spins através de (2.9), é conservada módulo N (conservação esta descrita pela equação (2.10)) e é usual, nesta notação, que o tempo seja colocado na ordenada e o espaço na abcissa (figura 18). Observação: a igualdade dos triângulos neste figura, está significan

do que a amplitude da matriz S (total) deve independer da sequên-
cia de colisão de duas partículas.

A velocidade de cada partícula será dada pela incli-
nação da reta e a velocidade relativa entre cada uma delas será
dada pela diferença de seus ângulos. O parâmetro espectral é visto
agora como esta velocidade relativa, de maneira que, se a primeira
partícula possui inclinação θ_1 , a segunda θ_2 e a terceira θ_3 , o es-
palhamento da primeira com a segunda possui parâmetro espectral $u =$
 $\theta_1 - \theta_2$, o da segunda com a terceira $v = \theta_2 - \theta_3$ e portanto o da pri-
meira com a terceira $u+v = \theta_1 - \theta_3$, de maneira que a equação (3.13) é
reescrita como:

$$\begin{aligned}
 S \begin{matrix} \lambda_1'' \alpha_1'' \\ \lambda_1 \alpha_1 \end{matrix} (u) & S \begin{matrix} \lambda_1' \gamma_1'' \\ \lambda_1'' \gamma_1' \end{matrix} (u+v) S \begin{matrix} \alpha_1' \gamma_1 \\ \alpha_1'' \gamma_1'' \end{matrix} (v) = \\
 &= S \begin{matrix} \alpha_1'' \gamma_1'' \\ \alpha_1 \gamma_1' \end{matrix} (v) S \begin{matrix} \lambda_1'' \gamma_1 \\ \lambda_1 \gamma_1'' \end{matrix} (u+v) S \begin{matrix} \lambda_1' \alpha_1' \\ \lambda_1'' \alpha_1'' \end{matrix} (u) \quad (3.18)
 \end{aligned}$$

Figura 18 - Representação gráfica da equação (3.18),
ou (3.13), onde cada linha representa a
trajetória de uma partícula no plano es-

paço-tempo, sendo θ_1 , θ_2 e θ_3 suas velocidades e as matrizes S que representam este espalhamento dependem apenas das diferenças das velocidades: $u = \theta_1 - \theta_2$, $v = \theta_2 - \theta_3$ e $u+v = \theta_1 - \theta_3$.

Quando a velocidade relativa entre duas partículas é zero obtemos a chamada Condição Inicial⁽²¹⁾:

$$S_{\alpha_1 \alpha_2}^{\beta_1 \beta_2}(0) = \delta_{\alpha_1, \beta_2} \delta_{\beta_1, \alpha_2} \quad (3.19)$$

δ : delta de Kronecker

Usando esta condição em (3.17) pode-se obter a Condição de Unitariedade dada por:

$$S_{\alpha_1 \alpha_2}^{\gamma_1 \gamma_2}(u) S_{\gamma_2 \gamma_1}^{\beta_2 \beta_1}(-u) = \delta_{\alpha_1, \beta_1} \delta_{\alpha_2, \beta_2} \rho(u) \quad (3.20)$$

(índices repetidos estão contraídos) e $\rho(u)$ é uma função par de u independente de α e β .

E é com o auxílio destas duas condições que Pokrovsky e Bashilov⁽²¹⁾ encontram equações funcionais para a energia livre de modelos que possuem interações apenas em diagonais de cada face, isto é, quando o modelo de I.R.F. se desacopla nas sub-redes lisas e tracejadas (figura 19). Para descrevermos o método utilizado por eles, teremos pois de retornar à linguagem de spins e saber como são as equações (3.19) e (3.20) nesta linguagem, preservando da linguagem de vértices apenas o parâmetro espectral.

O peso estatístico para cada face (com interações apenas nas diagonais) é dado por (3.6) e o uso do parâmetro espectral possibilita-nos escrever que:

$$\bar{w}(u) = w(\pi - u) \quad (3.21)$$

onde w é o peso estatístico para uma das diagonais e $\bar{w}$ o para a outra (figura 19).

(a)

(b)

(c)

Figura 19 a. - quando s3o temos intera33es nas diagonais de cada face os spins σ n3o interagem com os μ de maneira que a rede original se desacopla em duas sub-redes independentes e id4nticas; a tra-

cejada e a lisa. Barras duplas e simples estão significando diferentes constantes de acoplamento.

- b. Uma das sub-redes resultantes (a que contem somente spins σ). A probabilidade de existência de uma barra dupla é dada por $\bar{w}$, e a da simples por w .
- c. Pode-se substituir a anisotropia da rede por u e $\pi-u$ e deixar de lado as barras duplas e simples.

De forma que (3.6) é reescrita como:

$$\tilde{w}_{\sigma_i, u_{i+1}, \sigma_{i+1}, u_i}^{(u)} = w_{\sigma_i, \sigma_{i+1}}^{(u)} w_{\mu_{i+1}, \mu_i}^{(\pi-u)} \quad (3.22)$$

Assim usando (3.22) e a relação que existe entre $\tilde{w}$ e S dadas por (2.8) e (2.9) obtemos as condições equivalentes a (3.19) e (3.20) agora diretamente para os pesos estatísticos para a diagonal, $w(u)$. Assim a Condição Inicial é dada por:

$$w_{\sigma_1 \sigma_2}^{(0)} = v \delta_{\sigma_1, \sigma_2} e^{w_{\sigma_1, \sigma_2}^{(\pi)}} = v^{-1} \quad (3.23)$$

E a Condição de Unitariedade agora é dada por duas equações:

$$\sum_{\sigma} w_{\sigma_1 \sigma}^{(u)} w_{\sigma_2 \sigma}^{(-u)} = f(u) \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \quad (3.24)$$

e

$$w_{\sigma_1 \sigma_2}^{(\pi-u)} w_{\sigma_1 \sigma_2}^{(\pi+u)} = g(u) \quad (3.25)$$

com $g(u)$ e $f(u)$ são funções pares.

Quanto a equação (3.18), neste caso em que as sub-re-des se desacoplam, sabemos que é a Relação-Triângulo-Estrela dada por (3.8a). Esta relação é uma condição da comutação de matrizes de transferência de diferentes parâmetros espectrais, matrizes estas não mais referentes à "linhas" de faces, mas sim à linhas como na figura 19b. Esta matriz de transferência é agora dada formalmente por:

$$T_{\{\sigma', \sigma\}}(u) = \prod_{i=1}^n w_{\sigma_i \sigma'_i}(u) w_{\sigma_{i+1} \sigma'_i}(\pi-u) \quad (3.26)$$

onde estamos usando condições de contorno cíclica.

Se formamos uma rede contendo $2m$ "linhas" como as da figura 19b, a função de partição será dada por:

$$Z = \text{traço} \left[\tilde{T}(\pi-u) T(u) \right]^m \quad (3.27)$$

e no limite termodinâmico $Z = [k(u)]^{2m}$, onde $[k(u)]^2$ é o maior auto valor da matriz $[\tilde{T}(\pi-u) T(u)]$. Sendo $\tilde{T}(u)$ a transposta de $T(u)$ e uma pode ser relacionada com a outra através do operador de translação P :

$$T(\pi-u) = P \tilde{T}(u) \quad (3.28)$$

onde

$$P_{\{\sigma, \sigma'\}} = \prod_{i=1}^n \delta_{\sigma'_{i+1}, \sigma_i}, \quad \sigma_{n+1} = \sigma_1 \quad (3.29)$$

Precisamos pois de uma maneira para se calcular os auto-valores da matriz $\tilde{T}(\pi-u) T(u)$, para que possamos calcular Z . Sabemos já que obedecendo à Triângulo Estrela encontramos toda uma família de matrizes de transferência que, com diferentes parâmetros espectrais, comutam. Devido a isto, podemos diagonalizá-las simultâ

neamente e, seus autovetores, ϕ , devem, portanto, independender da variável u .

Como o operador P também comuta com as matrizes $T(u)$ e $\tilde{T}(\pi-u)$ e estas entre si, podemos encontrar autovetores ϕ comuns a todos eles de forma que:

$$T(u) \phi = \lambda(u) \phi \quad (3.30)$$

$$\tilde{T}(\pi-u) \phi = \lambda^*(\pi-u) \phi \quad (3.31)$$

$$P \phi = p \phi, \quad p^n = 1 \quad (3.32)$$

Com estes dados podemos usar a relação (3.28) para obtermos a primeira equação funcional:

$$\lambda(u) = \lambda^*(\pi-u) p \quad (3.33)$$

Devido a (3.27) estamos na verdade interessados em equações funcionais para $k(u)$ dado por:

$$k^2(u) = \lambda^*(\pi-u) \lambda(u) \quad (3.34)$$

De maneira que a equação (3.33) em termos destes $k(u)$ torna-se:

$$\boxed{k(u) = k^*(\pi-u)} \quad (3.35)$$

* de (3.33) temos $\lambda(u) = \lambda^*(\pi-u) p, (1)$, e $\lambda^*(\pi-u) = \lambda(u) p^{-1}, (2)$. Para reescrever (3.33) em termos de $k(u)$, devemos reescrever $\lambda(u)$ e $\lambda^*(\pi-u)$ como função de $k(u)$, o que é feito usando-se (1) e (2) e (3.34), de maneira que por exemplo: $k^2(u) = \lambda^*(\pi-u) \lambda(u)$, usando (1) tem-se que $k^2(u) = \lambda^{*2}(\pi-u) p$, ou seja que: $\lambda^*(\pi-u) = k(u) p^{-1/2}$.

Somente uma equação não é suficiente para calcularmos $k(u)$. A segunda equação funcional é conseguida através da condição de unitariedade (3.24) e (3.25) ao considerarmos o produto $\tilde{T}(\pi-u) T(u)$ para $u'=\pi+u$, que é dado por:

$$\begin{aligned} [\tilde{T}(-u) T(u)]_{\{\sigma, \sigma'\}} &= \sum_{\{\lambda\}} [\omega_{\sigma'_1 \lambda_1}(u) \omega_{\sigma_1 \lambda_1}(-u)] \cdot \\ &\quad \cdot [\omega_{\sigma'_2 \lambda_2}(\pi-u) \omega_{\sigma_2 \lambda_2}(\pi+u)] \dots \\ &\quad \dots [\omega_{\sigma'_n \lambda_n}(u) \omega_{\sigma_n \lambda_n}(-u)] \cdot \\ &\quad \cdot [\omega_{\sigma'_{n+1} \lambda_n}(\pi-u) \omega_{\sigma_{n+1} \lambda_n}(\pi+u)] \quad (3.36) \\ &\quad \uparrow \qquad \qquad \uparrow \end{aligned}$$

Para que possamos utilizar (3.24) e (3.25) na expressão acima, é preciso modificar ligeiramente as condições de contorno da rede, escrevendo $\sigma'_{n+1} = \sigma_{n+1}$, o que no limite termodinâmico não deve alterar o valor do maior autovalor desta matriz*. Com estas novas condições de contorno (3.36) resume-se a:

$$[\tilde{T}(-u) T(u)]_{\{\sigma, \sigma'\}} = [f(u) g(u)]^n \delta_{\sigma'_1, \sigma_1} \dots \delta_{\sigma'_n, \sigma_n} \quad (3.37)$$

ou então:

$$\tilde{T}(-u) T(u) = [f(u) g(u)]^n I \quad (3.38)$$

onde I é a matriz identidade.

De maneira que aplicando (3.38), ambos os lados, a ϕ tem-se a segunda equação funcional:

* temos de fazer obrigatoriamente $n \rightarrow \infty$

$$\lambda^*(-u)\lambda(u) = [f(u)g(u)]^n \quad (3.39)$$

ou ainda em termos do k_s :

$$k^*(\pi+u)k(u) = [f(u)g(u)]^n \quad (3.40)$$

Essas equações, a (3.35) e a (3.40) possibilitam-nos calcular um dos autovalores da matriz $\tilde{T}(\pi-u)T(u)$. Como esta matriz deve ser definida positiva, num certo intervalo de u (pois nada mais é do que um produtório de pesos de Boltzman) o teorema de Perron-Frobenius garante que ela deve ter um autovalor real positivo e não degenerado $k_m(u)$ que excede em módulo a todos os demais. Podemos usar o mesmo argumento para $\lambda_m(u)$, de maneira que se temos $\lambda_m(u)$ e $\lambda_m(\pi-u)$ ambos reais positivos, isto nos fixa $p=1$ na equação (3.33). Assim, com esta observação, podemos escrever nossas equações funcionais como:

$$k_m(u) = k_m(\pi-u) \quad (3.41)$$

$$k_m(\pi+u)k_m(u) = [f(u)g(u)]^n \quad (3.42)$$

que nos permitem calcular o maior autovalor deste modelo, o que no limite termodinâmico é o mesmo que calcular a função de partição.

3.5.1. RESUMINDO O MÉTODO (Este método serve somente para modelos cujas interações são apenas nas diagonais de cada face, ou seja, interações a penas nas ligações)

1º) Acha-se a solução da equação Triângulo-Es

trela para o modelo específico que se estiver tratando. Isto faz com que os pesos de Boltzman possam ser escritos explicitamente como funções de u (Aqui usa-se as Condições Iniciais para (3.23) para fixar a solução);

29) Coloca-se estes pesos de Boltzman, já escritos explicitamente como funções de u na Condição de Unitariedade de (3.24), (3.25) e $f(u)$ e $g(u)$ são desta maneira determinadas;

39) Para os encontrados $g(u)$ e $f(u)$ basta agora calcular-se o maior autovalor da matriz de transferência usando (3.41) e (3.42).

3.6. EQUAÇÕES FUNCIONAIS PARA A ENERGIA LIVRE DE MODELOS DE VÉRTICES: MÉTODO DE BELAVIN-ZAMOLODCHIKOV⁽²²⁾

Como já foi dito, o método de Pokrovski e Bashlov não pode ser utilizado no modelo de Belavin porque este é um modelo cuja energia tem de ser dada para toda uma face (ver Exemplo 4 no Capítulo II). Além da interação de dois corpos, tem também de três e quatro corpos, i.é., não apenas nas diagonais da face).

Vamos então agora descrever um método que nos permitirá calcular a energia livre de modelos mais gerais, que não necessariamente exibem interações apenas nas diagonais de cada face e que portanto servirá para que calculemos a energia livre do modelo de Belavin. Esse método, que foi proposto por Belavin e Zamolodchikov⁽²³⁾, também consiste em encontrar duas Equações Funcionais para a Função de Partição (maior autovalor da matriz de transferência). A diferença é que neste caso, volta-se ao formalismo de vértices e a equação que permitirá a solubilidade do modelo não é mais

um caso particular da Equação dos Triângulos, (não é mais a Relação Triângulo Estrela), mas sim a própria dada por (3.18).

Como este novo procedimento apresenta maiores dificuldades, não entraremos em muitos detalhes técnicos e o entendimento do método de Pokrovski-Bashilov, introzido na secção anterior, será o bastante para tornar este mais intuitivo, visto que em linhas gerais não diferem muito um do outro.

Três das equações que serão necessárias ao presente método já foram apresentadas: A Equação dos Triângulos, a Condição Inicial e a Condição de Unitariedade dadas por (3.18) e (3.19) e (3.20), respectivamente. Como na secção anterior, as duas primeiras ao serem resolvidas, nos darão as funções explícitas com que os pesos de Boltzman podem ser escritos e, a última nos fornecerá uma das procuradas equações funcionais para a função de partição.

Para realmente se determinar a função de partição, é necessário mais uma equação funcional. Esta equação é obtida a partir da equação dos triângulos colocando-se $u=\eta+u$ e $v=\eta-u$, onde η é determinado por:

$$\sum_k S^k \gamma_1'' (2\eta) = 0 \quad (3.43)$$

Condição esta que vem de:

$$\sum_{j_1, i_3} S^{j_1 \gamma_1''} (2\eta) \psi_{i_3}^{j_1} = 0 \quad (3.44)$$

com

$$\psi_{i_3}^{j_1} = \delta_{i_3, j_1} \quad (3.45)$$

De maneira que aplicando ambos os dados da equação dos triângulos (3.18) a $\psi_{i_3}^{j_1}$ dado por (3.45) obtemos a nova condi-

ção dada por:

$$\sum_{k_1, k_2} S_{i_1 k_2}^{k_1 j_2}(\eta+u) S_{i_2 k_1}^{k_2 j_1}(\eta+u) = \delta_{i_1, j_2} \delta_{i_2, j_1} \tilde{\rho}(u) \quad (3.46)$$

$\tilde{\rho}(u)$ uma função par em u .

Podemos então usando (3.20) e (3.46) escrever as duas equações funcionais para a função de partição.

A primeira, que vem da Condição de Unitariedade (3.20) é:

$$\boxed{Z(u)Z(-u) = \rho(u)} \quad (3.47)$$

e a segunda advém da nova condição (3.46) e é dada por:

$$\boxed{Z(\eta+u)Z(\eta-u) = \tilde{\rho}(u)} \quad (3.48)$$

Será com estas duas equações para a função de partição que a energia livre do modelo de Belavin $(Z(N) \times Z(N))$ será calculada*. Faremos isto no capítulo seguinte, lembrando aqui que este é um dos objetivos deste trabalho.

* Obs.: $f = -K_B T \ln Z$ (onde f é a energia livre por sítio).

CAPÍTULO IV

CAPÍTULO IV

- DUALIDADE DO MODELO DE BELAVIN ($o\ Z(N) \times Z(N)$)
- SOLUBILIDADE E LIMITES DESTE MODELO. ENERGIA LIVRE PARA $N=3$
- OBTENÇÃO FORMAL DO HAMILTONIANO QUÂNTICO AS
SOCIADO A ESTE MODELO, PARA QUALQUER N . EXEM
PLO DO HAMILTONIANO E CÁLCULO DE SEU ESTADO
FUNDAMENTAL PARA $N=3$

4.1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo mostraremos alguns dos resultados que obtivemos para o modelo de Belavin, o qual foi definido no Capítulo II, secção 2.5, como possuidor de simetria $Z(N) \times Z(N)$:

O primeiro desses resultados é sobre dualidade: Escrevemos os Pesos Estatísticos para este modelo (em termos de novas variáveis que, como veremos, não serão mais as de vértices e nem as de spin), fazemos uma transformação de dualidade nestes pesos e mostramos que a Função de Partição em termos dos Pesos Duais é a mesma que em termos dos pesos originais, anteriores à transformação. Baxter⁽²⁴⁾ demonstrou esta dualidade para o caso $N=2$, sendo que seu método não permite a generalização para um N genérico. Os nossos cálculos simplificam o resultado obtido por Baxter e são para qualquer N .

Os demais resultados são referentes à obtenção do Hamiltoniano Quântico Unidimensional associado ao modelo de Belavin e ao cálculo do Estado Fundamental deste Hamiltoniano. Como estes cálculos estão fundamentalmente ligados à solução do Modelo de Mecânica Estatística (por exemplo, o Estado Fundamental é obtido da energia livre do modelo) nos dedicaremos inicialmente a um

estudo mais detalhado do modelo de Belavin, chegando ao cálculo da energia livre, para $N=3$, usando as equações de Belavin e Zamdodch-koc apresentadas no capítulo anterior. Trabalharemos em um limite no qual as funções que aparecem são trigonométricas.

Este tipo de cálculo foi feito inicialmente por Baxter⁽⁸⁻¹⁰⁾ para o modelo de 8-Vértices ($N=2$) e o Hamiltoniano encontrado é o XYZ (Heisenberg-Completamente-Anisotrópico). Seguir o método proposto por Baxter, para $N=2$, implica para os demais N , em algo equivalente a encontrarmos a inversa de uma matriz $N^2 \times N^2$ e seria praticamente impossível de se fazer formalmente se não tivéssemos encontrado uma maneira de trabalhar, não com a matriz inteira, mas sim apenas com seus elementos.

Neste trabalho, mostramos assim, que é possível obter-se este Hamiltoniano para todo N e damos como exemplo o caso $N=3$. Os cálculos deste exemplo, Hamiltoniano e Estado Fundamental, são feitos no limite já citado acima, limite este análogo ao em que o 8-Vértices torna-se o modelo de 6-Vértices e o XYZ torna-se o XXZ (Heisenberg Anisotrópico).

4.2. DUALIDADE

Vamos mostrar agora como podemos escrever os pesos de Estatística para o modelo de Belavin em termos de variáveis de spins, usando a regra (2.9) e como a partir daí escreveremos estes pesos apenas em termos de duas novas variáveis α e β .

O modelo, já definido no Capítulo II, é dada por:

$$S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} = \sum_{v, \mu=0}^{N-1} \omega_{v\mu} I_{v\mu}^{i_1 j_1} I_{v\mu}^{i_2 j_2} \quad (2.17)$$

onde

$$I_{\nu\mu} = \xi^\nu R^\mu \quad (2.18)$$

Sendo que:

$$\zeta = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & Z & & \\ & & \ddots & \\ & & & Z^{N-1} \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

com $Z = e^{2\pi i/N}$ e

$$R = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

e $\bar{I}_{\nu\mu}$ é a transposta conjugada de $I_{\nu\mu}$.

De maneira que:

$$\begin{aligned} S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} &= \sum_{\nu, \mu=0}^{N-1} \omega_{\nu\mu} (\zeta^\nu R^\mu)_{i_1 j_1} (R^{-\mu} \zeta^{-\nu})_{i_2 j_2} = \\ &= \sum_{\nu, \mu=0}^{N-1} \omega_{\nu\mu} (Z^{i_1 \nu} \delta_{i_1 + \mu, j_1}) (Z^{-j_2 \nu} \delta_{i_2 - \mu, j_2}) = \\ &= \sum_{\nu, \mu=0}^{N-1} \omega_{\nu\mu} Z^{-\nu(j_2 - i_1)} \delta_{\mu, j_1 - i_1} \delta_{\mu, i_1 - j_2} \end{aligned} \quad (4.1a)$$

ou efetuando a soma sobre μ :

$$S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} = \sum_{\nu=0}^{N-1} \omega_{\nu, j_1 - i_1} Z^{-\nu(j_2 - i_1)} \delta_{i_1 + i_2, j_1 + j_2} \quad (4.1b)$$

Queremos agora reescrever estes Pesos Estatísticos, $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$ em termos de variáveis de spin (apenas os pesos não nulos, que obedecem $i_1 + i_2 = j_1 + j_2$), usando a seguinte regra, vista no Capítulo II:

$$\tilde{\omega}(a, b, c, d) = i_1 \begin{array}{c} j_2 \\ \hline \begin{array}{cc} a & b \\ c & d \end{array} \\ \hline i_2 \end{array} j_1 = S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} \quad (2.8)$$

com

$$\begin{aligned} i_1 &= c-a \\ j_1 &= d-b \\ i_2 &= d-c \\ j_2 &= b-a \end{aligned} \quad (\text{Mod. } N) \quad \text{Orientação das diferenças} \quad (2.9)$$

Podemos observar, por (4.1b) que as únicas operações das variáveis de vértices que aparecem para o peso estatístico $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$ (já considerando $i_1 + i_2 = j_1 + j_2$) são $j_1 - i_1$ e $j_2 - i_2$, e estas operações escritas em termos de spins, usando (2.9) tornam-se:

$$j_1 - i_1 = a + d - b - c \quad (4.2a)$$

$$j_2 - i_2 = b - c \quad (4.2b)$$

De maneira que, podemos reescrever os Pesos Estatísticos dado por (4.1b) (os não nulos) totalmente em termos das variáveis de spins. Assim usando a associação (2.8) e substituindo (4.2) em (4.1b) ficamos com:

$$\tilde{\omega}(a, b, c, d) = \tilde{\omega}(b - c, a + d - b - c) =$$

$$= \sum_{v=0}^{N-1} Z^{-v(b-c)} \omega_{v, a+d-b-c} \quad (4.3)$$

Como as únicas operações, nas variáveis de spin, que aparecem em (4.2) são $b-c$ e $a+d-b-c$, podemos chamá-las de α e β , sendo que:

$$\alpha = b-c \quad (4.4a)$$

$$\beta = a+d-b-c \quad (4.4b)$$

e assim, o peso de Boltzman (4.3) pode ser totalmente reescrito em termos destas novas variáveis:

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}(a,b,c,d) &= \tilde{\omega}(b-c, a+d-b-c) = \\ &= \tilde{\omega}(\alpha, \beta) = \sum_{v=0}^{N-1} Z^{-v\alpha} \omega_{v\beta} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Devido à dependência destes pesos estatísticos apenas desses dois números, α e β , podemos pensar em escrever a função de partição Z , para estes modelos, totalmente em função desses números. Para tal consideremos a rede da figura 18, onde os pesos estatísticos atribuídos à cada face são os $\tilde{\omega}(\alpha, \beta)$ dados por (4.5).

A função de partição para este modelo é dada por:

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{a,b,c,d\}} \pi \tilde{\omega}(b-c, a+d-b-c) = \\ &= \sum_{\{a,b,c,d\}} \pi \tilde{\omega}(\alpha, \beta) \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde $\tilde{\omega}(\alpha, \beta)$ é dado por (4.5), α e β por (4.4) e o produtório é efetuado sobre todas as faces da figura 18, sendo que o somatório é sobre todos os spins, que podem assumir valores $0, 1, \dots, N-1$.

Figura 18 - Rede quadrada onde à cada face associamos variáveis de spin, a, b, c, d .

Vamos agora reescrever Z totalmente em termos de α e β , isto é, ao invés de efetuarmos a soma em (4.6) sobre os spins, podemos efetuá-la diretamente sobre os α e β , da seguinte maneira:

$$Z = N^2 \sum_{\alpha, \beta}' \pi \tilde{\omega}(\alpha, \beta) \quad (4.7)$$

onde a restrição ' no somatório é devido a nem toda configuração de α, β corresponder a uma de spin e o N^2 vem de que toda configuração de α, β possível (isto é, as que possuem correspondente em spin) existe N^2 de spins.

A restrição acima pode ser traduzida em termos algébricos:

Consideremos uma "sub-rede" da figura 18 constituída por 4 faces como na figura 19. Cada face agora possui associado um conjunto de α e β . Para que estes α_s e β_s correspodam a alguma configuração de spins é necessário que satisfaçam a seguinte relação:

$$\alpha_2 - \alpha_1 + \alpha_3 - \alpha_4 + \beta_2 - \beta_3 = 0 \tag{4.8}$$

e isto para todas as sub-redes iguais a esta na rede toda.

Figura 19 - Sub-rede da rede da figura 18, contendo 4 faces adjacentes juntas e à cada uma dessas faces temos variáveis α_s e β_s associadas. Essas variáveis sô possuem configuração de spin correspondente se satisfazem a condição (4.8).

Podemos ir além com estes cálculos e estender o procedimento de Wu e Wang⁽²⁵⁾ para este modelo. Este procedimento citado foi feito inicialmente para modelos cujos pesos estatísticos são dados para as ligações da rede e agora é nossa intenção generalizá-lo para o modelo de Belavin, cujo peso estatístico é dado para faces.

Com esta intenção, tomemos a transformada de Fourier

de $\tilde{\omega}(\alpha, \beta)$:

$$X(\nu, \mu) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha, \beta=0}^{N-1} Z^{\mu\alpha + \nu\beta} \tilde{\omega}(\alpha, \beta) \quad (4.9)$$

ou

$$\tilde{\omega}(\alpha, \beta) = \frac{1}{N} \sum_{\mu, \nu=0}^{N-1} Z^{-\mu\alpha - \nu\beta} X(\nu, \mu) \quad (4.10)$$

com $Z = e^{2\pi i/N}$, de maneira que, usando (4.10) podemos reescrever a função de partição dada por (4.6) em termos dos pesos $X(\nu, \mu)$, que são conhecidos como pesos duais aos $\tilde{\omega}(\alpha, \beta)$. Podemos efetuar então a soma sobre os spins em (4.6), observando que cada um deles está ladeado por 4 faces e que cada face, por sua vez, contribui com um termo $X(\nu, \mu) Z^{-\mu\alpha - \nu\beta}$.

Façamos, em primeiro lugar, a soma sobre o spin genérico a_i mostrado na figura 20.

Figura 20 - Maneira gráfica para se efetuar a soma sobre um spin a_i genérico em (4.6) ao substituímos os pesos $\tilde{\omega}_s$ pelos X_s . As

linhas tracejadas indicam que a_i está em um termo tipo α e as lisas em um β . O sinal com que a_i aparece neste termo é dado pelo sentido da flexa: (+) se estiver entrando em a_i e (-) se estiver saindo.

Lembrando que $\alpha=b-c$ e $\beta=a+d-b-c$, podemos fazer a seguinte convenção gráfica (figura 20):

1º) As setas lisas são referentes ao fato do spin a_i estar em um termo do tipo β e as tracejadas do tipo α ;

2º) O sinal com que a_i aparecerá em cada termo é indicado pela direção da seta. (+) se estiver entrando em a_i , (-) se estiver saindo.

Usando estas convenções, olhando para a figura 20 podemos inferir que a_i aparecerá no seguinte termo:

$$z^{-\mu_2 \alpha_2 - \mu_3 \alpha_3 - \nu_1 \beta_1 - \nu_2 \beta_2 - \nu_3 \beta_3 - \nu_4 \beta_4} \quad (4.11)$$

Agora, usando a regra número 2 e isolando na expressão acima (4.11) apenas os termos que contenham a_i ficamos com:

$$z^{(\mu_2 - \mu_3 - \nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_4) a_i} \quad (4.12)$$

Podemos então efetuar a soma sobre este spin genérico:

$$\sum_{\substack{N-1 \\ a_i=0}} z^{(\mu_2 - \mu_3 - \nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_4) a_i} = N \delta_{\mu_2 - \mu_3 - \nu_1 + \nu_2 + \nu_3 - \nu_4, 0} \quad (4.13)$$

Assim, voltando à função de partição, (dada por (4.6)) e já tendo substituído $\tilde{\omega}$ por X através de (4.10) devemos, pois, efetuar a soma sobre todos os spins.

Efetuada primeiro a soma sobre todos os spins internos (deixando de lado os da superfície) temos que cada uma delas contribuirá para o resultado final com um termo do tipo de (4.13). Assim, se construirmos uma rede para os μ_s e ν_s igual à que tínhamos para os α_s e β_s , cada conjunto de 4 faces, desta nova rede, que contenha um ponto comum a todas (como na figura 20, só que com μ_s e ν_s) tem de ter a seguinte restrição a ser satisfeita:

$$\mu_2^{-} \mu_3^{-} \nu_1^{+} \nu_2^{+} \nu_3^{-} \nu_4^{-} = 0 \quad (4.14)$$

E portanto, se pensarmos nos μ_s como fazendo o mesmo papel dos β_s e os ν_s dos α_s , esta restrição (4.14) é a mesma dada por (4.8) (sobre o somatório para Z quando este foi feito sobre α e β em (4.7)).

Temos ainda os spins da superfície, que quando somados fixam para a nossa rede uma condição de contorno peculiar mostrada na figura 21:

Figura 21 - a) Mostramos nesta figura quais são os

Figura 21 - a) Mostramos nesta figura quais são os spins da superfície que tem de ser iguais entre si.

b)c) Mostramos que é equivalente a termos esta folha dobrada na diagonal e colando as superfícies. Devido a este formato chamaremos esta condição de "condição envelope".

Este problema é resolvido se colocarmos, no nosso problema original (já na rede usada para a função de partição (4.6)) esta condição de contorno, que estamos chamando envelope. Surge aí um problema adicional: A restrição sobre os α s e β dadas por (4.8) deixa de ser suficiente (embora ainda seja necessária), precisando adicionar mais condições. Mas isto também é facilmente resolvido ao verificarmos que estas condições adicionais que surgem aparecem também em termos dos μ s e ν s, justamente quando somamos sobre os spins da superfície. Assim podemos escrever Z dado por (4.6), após substituirmos os $\tilde{\omega}$ s por X s e efetuado o somatório sobre os spins, exatamente como:

$$Z = N^2 \sum_{\mu, \nu} \pi X(\nu, \mu) \quad (4.15)$$

onde π está indicando a restrição dada por (4.14) e também as que aparecem quando somamos sobre os spins da superfície.

Assim podemos escrever, usando (4.7) e (4.15), já
 com as novas condições de contorno que:

$$Z(\tilde{\omega}) = N^2 \sum_{\alpha, \beta} \pi \tilde{\omega}(\alpha, \beta) = N^2 \sum_{\nu, \mu} \pi X(\nu, \mu) \quad (4.16)$$

E, se pensarmos nos vértices como sobre a nova rede que
 por sua vez possui spins a', b', c', d' , e dissermos que:

$$\begin{aligned} \nu &= b' - c' \\ \mu &= a' + d' - b' - c' \end{aligned} \quad (4.17)$$

Podemos dizer que, (de 4.16)):

$$Z(\tilde{\omega}) = Z_D(X) \quad (4.18)$$

onde estamos chamando $Z_D(X)$ à função de partição para a rede com
 spins a', d', c', d' (a rede dual) com pesos $X(\nu, \mu)$ associados à cada
 face.

4.3. SOLUBILIDADE E LIMITES DO MODELO DE BELAVIN. ENERGIA LIVRE PARA ESTE MODELO, CASO $N=3$

O modelo de Belavin, definido por:

$$S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(u) = \sum_{\alpha, \beta=0}^{N-1} \omega_{\alpha, \beta}(u) I_{\alpha, \beta}^{i_1 j_1} \bar{I}_{\alpha \beta}^{i_2 j_2} \quad (2.17)$$

com $I_{\alpha \beta}$ dada por (2.18) e $\bar{I}_{\alpha \beta}$ sua transposta conjugada

é solúvel se os $\omega_{\alpha, \beta}(\mu)$ forem escritos⁽²⁰⁾ como:

$$\omega_{\alpha, \beta}(u) = \frac{\theta_{\alpha, \beta}(u+\eta)}{\theta_{\alpha, \beta}(\eta)} \quad (4.19)$$

onde

$$\theta_{\alpha, \beta}(u) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i\pi i(m+\beta/N)^2 + 2\pi i(m+\beta/N)(u+\alpha/N)} \quad (4.20)$$

e

$$\text{Im}\tau > 0 \text{ e } \tau = ik'/k \quad (4.21)$$

(k', k integrais elípticas)

Pois com os $\omega_{\alpha, \beta}$ escritos desta forma, os pesos $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(u)$ são solução da Equação dos Triângulos*, dada por (3.17) e a partir desta Equação podemos escrever equações funcionais para a energia livre deste modelo, usando as equações propostas por Belavin e Zamolodchka no capítulo anterior.

4.3.1. Limites

Não trabalharemos com estas funções definidas por (4.20), mas sim, com determinados limites, em que suas razões, ou seja, os $\omega_{\nu\mu}$, tornam-se funções trigonométricas. Basicamente existem dois limites em que isto ocorre: ou $\tau \rightarrow i\infty$, o que equivale a fazer $k \rightarrow 0$ (onde k é chamado de módulo da função elíptica - Apêndice B), ou então $\tau \rightarrow i0$, que é o mesmo que $k \rightarrow 1$. Como estas funções,

*pode ser mostrado que para $N=2$, (4.19) é a mesma solução encontrada por Baxter, após fazer algumas mudanças de variáveis.

θ_{vu} , são definidas de maneira diferente para $k > 1$ e $k < 1$, ou seja, situação física diferente dependendo se estamos acima ou abaixo de $k=1$, pode-se tirar a conclusão que neste ponto, $k=1$, estejamos na região crítica do modelo e daí que k (ou τ) esteja fazendo papel de temperatura. De maneira que quando fazemos o limite para funções trigonométricas ($\tau \rightarrow i0$ ou $\tau \rightarrow i\infty$) estamos de certa forma perdendo a temperatura neste modelo, ela tendo então de ser introduzida através de algum outro parâmetro. No 8-Vértices quando fazemos o limite $\tau \rightarrow i\infty$ este modelo torna-se o chamado modelo de 6-Vértices, que é um modelo não físico no sentido de que, por exemplo, o seu estado fundamental ferromagnético está "congelado" até a temperatura crítica. O fato de que para os demais N , nestes limites, talvez não tenhamos modelos fisicamente aceitáveis, não os impedem de serem bons exemplos para os cálculos que queremos mostrar.

Para fazermos estes limites, vamos em primeiro lugar, escrever a função $\theta_{\alpha,\beta}(u)$ dada por (4.20) em termos de uma das funções θ s de Jacobi. Usando do Apêndice B, a fórmula B.3, temos que:

$$\theta_{\alpha,\beta} = q^{\beta^2/N^2} e^{2\pi i\beta/N(u+\alpha/N)} \theta_3\left(u + \frac{\alpha}{N} + \frac{\beta}{N} \cdot \tau\right) \quad (4.22)$$

$$\text{onde } q = e^{i\pi\tau} \quad (4.23)$$

portanto; $\omega_{\alpha,\beta}(u)$ dada por (4.19) torna-se:

$$\omega_{\alpha,\beta}(u) = e^{\frac{2\pi i\beta u}{N}} \frac{\theta_3\left(u+\eta+\alpha/N + \frac{\beta}{N}\tau\right)}{\theta_3\left(\eta+\alpha/N + \frac{\beta}{N}\tau\right)} \quad (4.24)$$

Para que os limites que queremos obter, $\tau \rightarrow i0$ e $\tau \rightarrow \infty$ ($q \rightarrow 1$ e $q \rightarrow 0$) não sejam independentes de η , devemos redefinir estes η como:

$$\eta = \eta' - 1/2 - \tau/2 \quad (4.25)$$

Assim, usando a Tabela B.1 do Apêndice B, podemos reescrever (4.24) como:

$$\omega_{\alpha, \beta}(u) = e^{\frac{2\pi i u \beta}{N} + i\pi u} \frac{\theta_1(u + \eta' + \alpha/N + \frac{\beta}{N}\tau)}{\theta_1(\eta' + \alpha/N + \frac{\beta}{N}\tau)} \quad (4.26)$$

E agora podemos fazer o limite. Vamos, abaixo detalhar apenas o procedimento do limite $\tau \rightarrow i0$ ($q \rightarrow 1$) por ser um pouco mais complicado que o outro.

Neste caso, $\tau \rightarrow i0$, as funções θ s tem de ser escritas de uma outra maneira, pois a fórmula (4.20) é definida para $\text{Im}\tau > 0$. Esta outra maneira é através da fórmula de Poisson, dada no Apêndice B, por (B.13), de forma que $\omega_{\alpha, \beta}$ dada por (4.26) torna-se:

$$\omega_{\alpha, \beta}(u) = e^{i\pi u - \frac{i\pi u^2}{\tau} - 2\pi \frac{i u}{\tau}(\eta' + \alpha/N)} \cdot \frac{\theta_1(u/\tau + \eta'/\tau + \alpha/N\tau + \beta/N; -1/\tau)}{\theta_1(\eta'/\tau + \alpha/N\tau + \beta/N; -1/\tau)} \quad (4.27)$$

como agora $\tau \rightarrow -1/\tau$, quando necessitamos de alguma fórmula do Apêndice B, devemos utilizá-las não mais com $q = e^{i\pi\tau}$, mas sim com:

$$q' = e^{-i\pi/\tau} \quad (4.28)$$

de forma que fazer $\tau \rightarrow i0$ é o mesmo que fazer $q' \rightarrow 0$, sendo este o limite que teremos de fazer em (4.27).

Outro detalhe importante é que devemos impor que:

$$\lim_{\tau \rightarrow i0} \frac{\eta'}{\tau} = \eta'' \quad (4.29a)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow i0} \frac{u}{\tau} = u' \quad (4.29b)$$

onde η'' , e u' são finitos, i.ê., η'/τ e u/τ neste limite são parâmetros que devem permanecer bem comportados.

Esta última imposição implica que:

$$\eta' \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad \tau \rightarrow i0 \quad (4.30a)$$

$$u \rightarrow 0 \quad \text{quando} \quad \tau \rightarrow i0 \quad (4.30b)$$

Assim usando (4.29) e (4.30), podemos escrever que $\omega_{\alpha, \beta}(u)$ (4.27), neste limite $\tau \rightarrow i0$, ($q \rightarrow 1$), como:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \omega_{\alpha, \beta} = e^{\frac{-2i\pi u' \alpha}{N}} \lim_{q' \rightarrow 0} \frac{\theta_1(u' + \eta'' + \frac{\alpha}{N\tau} + \frac{\beta}{N}; q')}{\theta_1(\eta'' + \frac{\alpha}{N\tau} + \frac{\beta}{N}; q')} \quad (4.31)$$

Para completarmos o limite, facilitará se usarmos a fórmula (B.6) em que θ_1 está escrito em termos de sen 0s. trocar, nesta fórmula q por q' , substituí-la em (4.31) e observar que quando $q' \rightarrow 0$ o termo dominante é o que possui $m=0$, no numerador e no denominador.

De maneira que para $\alpha=0$, temos:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \omega_{0, \beta} = \frac{\sin \pi (u' + \eta'' + \beta/N)}{\sin \pi (\eta'' + \beta/N)} \quad (4.32)$$

E para $\alpha \neq 0$

$$\lim_{q \rightarrow 1} \omega_{\alpha, \beta} = \lim_{q' \rightarrow 0} e^{\frac{-2\pi i u' \alpha}{N}} \frac{e^{i\pi(u' + \eta'' + \frac{\alpha}{N\tau} + \frac{\beta}{N})} - e^{-i\pi(u' + \eta'' + \frac{\alpha}{N\tau} + \frac{\beta}{N})}}{e^{i\pi(\eta'' + \alpha/N\tau + \beta/N)} - e^{-i\pi(\eta'' + \frac{\alpha}{N\tau} + \beta/N)}} \quad (\tau \rightarrow i0) \quad (4.33)$$

Trabalhando com $\alpha > 0$, os termos dominantes neste limite são os que possuem $e^{\frac{i\pi\alpha}{N\tau}}$, de maneira que desprezando os outros termos, obtemos que:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \omega_{\alpha, \beta} = e^{-2i\pi u' \frac{\alpha}{N} + i\pi u'} \quad , \quad \alpha > 0 \quad (4.34a)$$

Se tivéssemos trabalhando com $\alpha < 0$, este limite seria dado por:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \omega_{\alpha, \beta} = e^{2i\pi u' \alpha/N - i\pi u'} \quad (4.34b)$$

Incorporando o π às variáveis u' e η'' e chamando-as novamente de u e η , reescrevemos (4.32) e (4.33) como:

$$\lim_{q \rightarrow 1} \omega_{\alpha, \beta} = \frac{\sin(u + \eta + \beta\pi/N)}{\sin(\eta + \beta\pi/N)} \quad \text{para } \alpha = 0 \quad (\tau \rightarrow i0) \quad (4.35a)$$

$$= e^{-2iu \frac{\alpha}{N} \pm iu} \quad \text{para } \alpha \neq 0 \quad (4.35b)$$

onde o sinal $\pm$ em (4.35b) é referente a se $\alpha > 0$ ou < 0 .

O limite para $q \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow i\infty$) é mais simples que o para $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$), por não precisarmos da Fórmula de Poisson e poder

mos fazer o limite diretamente sobre os $\omega_{\alpha, \beta}$ dados por (4.26). Este limite é dada por:

$$\lim_{\substack{q \rightarrow 0 \\ (\tau \rightarrow i\infty)}} \omega_{\alpha, \beta} = e^{iu} \frac{\sin(u + \eta + \alpha\pi/N)}{\sin(\eta + \alpha\pi/N)}, \text{ para } \beta = 0 \quad (4.36a)$$

$$= e^{2i\beta u/N} \quad \text{para } \beta \neq 0 \quad (4.36b)$$

se $\beta > 0$

ou

$$e^{2i\beta u/N + 2iu} \quad \text{para } \beta < 0 \quad (4.36c)$$

4.3.2. Cálculo dos Pesos Estatísticos do Modelo de Belavin, nestes limites. Equivalência destes limites.

Os pesos $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(u)$ não nulos podem ser calculados através de $\tilde{\omega}_{\alpha, \beta}$ dada por (4.5) relacionando um com outro através de (4.4) e (4.2), de maneira que:

$$\alpha = j_2 - i_1 = i_2 - j_1 \quad (4.37)$$

$$\beta = j_1 - i_1 = i_2 - j_2$$

e de (2.8) e (4.5)

$$\begin{aligned} S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} &= \tilde{\omega}(j_2 - i_1, j_1 - i_1) = \tilde{\omega}(\alpha, \beta) = \\ &= \sum_{v=0}^{N-1} z^{-v\alpha} \omega_{v\beta}(u) \quad (4.38) \\ &\quad , \quad z = e^{\frac{2\pi i}{N}} \end{aligned}$$

$$\text{com } i_1 + i_2 = j_1 + j_2$$

E os demais vértices (os que possuem $i_1 + i_2 \neq j_1 + j_2$) são nulos.

Como estamos lidando com dois limites distintos, $q \rightarrow 1$ e $q \rightarrow 0$, vamos usar a seguinte notação para distingui-los:

$\tilde{\omega}_{(\alpha, \beta)}^{(0)}$ refere-se ao Peso Estatístico calculado no limite $q \rightarrow 0$

$\tilde{\omega}_{(\alpha, \beta)}^{(1)}$ refere-se ao Peso Estatístico calculado no limite $q \rightarrow 1$

Antes de calcular explicitamente $\tilde{\omega}_{(\alpha, \beta)}^{(0)}(u)$ e $\tilde{\omega}_{(\alpha, \beta)}^{(1)}(u)$ substituindo os limites obtidos para $\omega_{\alpha, \beta}$, na fórmula (4.38), vamos mostrar a equivalência destes dois limites. Para tal tomemos o peso dual $\tilde{\omega}_{(\alpha, \beta)}^{(1)}(u)$, que chamaremos $\tilde{\omega}_{D(1)}^{(1)}(\alpha, \beta)$ e é definido através de (4.10) como:

$$\tilde{\omega}_{D(1)}^{(1)}(\alpha, \beta)(u) = \frac{1}{N} \sum_{\nu, \mu=0}^{N-1} Z^{-\nu\alpha - \mu\beta} \tilde{\omega}_{\mu\nu}^{(1)}(u)$$

$$(4.38) \quad \sum_{\nu=0}^{N-1} Z^{-\nu\alpha} \omega_{(1)-\beta, \nu}^{(1)}(u) \quad (4.39)$$

e escrevendo também $\tilde{\omega}_{(0)}^{(1)}(\alpha, \beta)(u)$ usando (4.38) (este não estamos pegando o dual):

$$\tilde{\omega}_{(0)}^{(1)}(\alpha, \beta)(u) = \sum_{\nu=0}^{N-1} Z^{-\nu\alpha} \omega_{(\alpha, \beta)}^{(1)}(u), \quad Z = e^{\frac{2\pi i}{N}} \quad (4.40)$$

Agora substituindo os limites obtidos para $\omega_{(1)\alpha, \beta}(u)$ e para $\omega_{(\alpha, \beta)}^{(1)}(u)$ nas equações acima, obtemos que:

Substituindo (4.35) em (4.39):

$$\tilde{\omega}_{D(1)\alpha,\beta} = \sum_{v=0}^{N-1} \frac{\sin(u+\eta+v\pi/N)}{\sin(\eta+v\pi/N)} z^{-v\alpha}, \text{ para } \beta=0 \quad (4.41a)$$

$$= \sum_{v=0}^{N-1} e^{2iu\frac{\beta}{N}-iu} z^{-v\alpha}, \text{ para } \beta \neq 0 \quad (4.41b)$$

E substituindo (4.36) em (4.40):

$$\tilde{\omega}_{(0)(\alpha,\beta)} = e^{iu} \sum_{v=0}^{N-1} \frac{\sin(u+\eta+v\pi/N)}{\sin(\eta+v\pi/N)} z^{-v\alpha}, \text{ para } \beta=0 \quad (4.42a)$$

$$= e^{iu} \sum_{v=0}^{N-1} e^{2iu\beta/N-iu} z^{-v\alpha}, \text{ para } \beta \neq 0 \quad (4.42b)$$

E assim, comparando (4.41) com (4.42), notamos que para qualquer N:

$$\tilde{\omega}_{D\alpha,\beta}^{(u)} = e^{-iu} \tilde{\omega}_{(0)\alpha,\beta}^{(u)} \quad (4.43)$$

E assim, devido a (4.18) temos que:

$$Z(\tilde{\omega}_{(1)}) = Z(\tilde{\omega}_{(0)}) \quad (4.44)$$

(a menos do fator e^{-iu} que pode ser incorporado no próprio peso estatístico).

Então os limites $q \rightarrow 0$ e $q \rightarrow 1$ nos dão a mesma função de partição.

Vamos calcular agora $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$ e $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$, explicitamente apenas para $N=3$, usando (4.38) e os limites dados por (4.35) e (4.36):

Então para $q \rightarrow 1$, $N=3$, os Pesos Estatísticos são:

$$S_{00}^{00} = -4 \frac{\sin(u/3+\eta)\sin(u/3+\pi/3)\sin(u/3-\pi/3)}{\sin\eta} \quad (1)$$

$$S_{01}^{01} = -4 \frac{\sin(u/3+\eta+\pi/3)\sin u/3\sin(u/3-\pi/3)}{\sin\eta} \quad (1)$$

$$S_{02}^{02} = -4 \frac{\sin(u/3+\eta-\pi/3)\sin u/3\sin(u/3+\pi/3)}{\sin\eta} \quad (1)$$

$$S_{20}^{02} = -4 \frac{\sin(u/3+\eta+\pi/3)\sin(u/3+\pi/3)\sin(u/3-\pi/3)}{\sin(\eta+\pi/3)} \quad (4.45)$$

$$S_{21}^{00} = +4 \frac{\sin(u/3+\eta-\pi/3)\sin u/3\sin(u/3-\pi/3)}{\sin(\eta+\pi/3)} \quad (1)$$

$$S_{22}^{01} = -4 \frac{\sin(u/3+\eta)\sin u/3\sin(u/3+\pi/3)}{\sin(\eta+\pi/3)} \quad (1)$$

$$S_{10}^{01} = -4 \frac{\sin(u/3+\eta-\pi/3)\sin(u/3+\pi/3)\sin(u/3-\pi/3)}{\sin(\eta-\pi/3)} \quad (1)$$

$$S_{11}^{02} = -4 \frac{\sin(u/3+\eta)\sin u/3\sin(u/3-\pi/3)}{\sin(\eta-\pi/3)} \quad (1)$$

$$S_{12}^{(1)}(u) = + 4 \frac{\sin(u/3+\eta+\pi/3)\sin u/3\sin(u/3+\pi/3)}{\sin(\eta-\pi/3)} \quad (4.45)$$

Sendo que os $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$, para os quais $i_1 + i_2 \neq j_1 + j_2$, são nulos. E lembrando de (2.13) que $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} = S_{i_1+1 i_2+1}^{j_1+1 j_2+1}$, listamos assim todos os Pesos Estatísticos para $N=3$, no limite $q \rightarrow 1 (\tau \rightarrow i0)$. Fazemos, como exemplo, o cálculo de $S_{21}^{(1)}(u)$ no Apêndice D, usando propriedades de funções trigonométricas listados no Apêndice C.

E para $q \rightarrow 0$, os Pesos Estatístico são:

$$S_{00}^{(0)} = 3 e^{iu} \frac{\sin(u+3\eta)}{\sin 3\eta}$$

$$S_{01}^{(0)} = 3 e^{iu-i} \frac{\sin u}{\sin 3\eta}$$

$$S_{02}^{(0)} = 3 e^{iu+i\eta} \frac{\sin u}{\sin 3\eta} \quad (4.46)$$

$$S_{20}^{(0)} = 3 e^{iu-\frac{1}{3}iu}$$

$$S_{10}^{(0)} = 3 e^{iu+\frac{1}{3}iu}$$

$$S_{21}^{(0)} = S_{11}^{(0)} = S_{12}^{(0)} = S_{22}^{(0)} = 0$$

Onde estes resultados são encontrados fazendo uso das propriedades trigonométricas do Apêndice C.

Mais algumas observações podem ser feitas, a

respeito destes dois limites:

A primeira delas é que não existem valores para u e η , simultaneamente, que consigam deixar todos os pesos, no limite $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$), dados por (4.45) todos positivos.

A segunda, é que este problema pode ser solucionado ao trabalharmos no limite $q \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow i\infty$), pois basta colocarmos $u = iu$ e $\eta = i\eta$ em (4.46), que estes pesos, tornam-se todos reais e positivos para u e $\eta > 0$ (ou então u e $\eta < 0$). Portanto, também para $q \rightarrow 1$, com esta substituição, a função de partição será real e positiva, pois como acabamos de mostrar por (4.44), neste limite, ela será a mesma para ambos os casos.

Uma outra observação, é que no limite $q \rightarrow 0$, os pesos que conservam carga estritamente módulo 3 ($i_1 + i_2 = j_1 + j_2$, estritamente módulo 3) são nulos. O vértice S_{02}^{01} , que também é nulo é o único que conserva carga, sem precisarmos recorrer ao módulo, sendo que aparece junto com os outros devido à simetria do problema. Os demais vértices, os que são não nulos, todos indistintamente conservam carga independente do módulo. Para $N=2$, quando fazemos este limite, $q \rightarrow 0$, o 8-Vértices torna-se o 6-Vértices e seus pesos estatísticos conservam carga estritamente módulo 2, no caso o peso $D = S_{00}^{11} = S_{11}^{00}$, é zero.

A última observação é também quanto a um resultado já conhecido para $N=2$, que é o fato de que o modelo de 6-Vértices é equivalente a um modelo de 8-Vértices crítico, um indo no outro por transformação de similaridade. Isto pode ser visto aqui através de (4.44) que mostra que a função de partição para $q \rightarrow 0$ e para $q \rightarrow 1$ é a mesma, sendo que para $N=2$, $q \rightarrow 0$, é o modelo de 6-Vértices e $q \rightarrow 1$ é o 8-Vértices crítico.

Feitas estas observações, já tendo calculado os pesos estatísticos neste limite, falta-nos agora encontrar a

função de partição e por conseguinte, a energia livre deste problema, caso $N=3$. Faremos isto a seguir.

4.3.3. Equações Funcionais para a Função de Partição no limite $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$) para o caso $N=3$

O método que utilizaremos para encontrar a energia livre deste modelo, no limite $q \rightarrow 1$, caso $N=3$, será através das equações funcionais discutidas no Capítulo III. As equações que são próprias para este modelo são as propostas por Belavin-Zamolodchikov, isto devido a este modelo possuir interação, não apenas nas diagonais de cada face, mas também ligações de 4 e 3 spins desta face, como foi mostrado no Exemplo 4 do Capítulo II.

Estas equações são as dadas por (4.46) e (3.47) e a reescrevemos abaixo:

$$Z(u) Z(-u) = \rho(u) \quad (3.46)$$

$$Z(\xi+u) Z(\xi-u) = \tilde{\rho}(u) \quad (3.47)$$

onde $\rho(u)$, ξ e $\tilde{\rho}(u)$ são dadas por (3.19), (3.42) e (3.45) ou:

$$\rho(u) = S_{i_1 i_2}^{k_1 k_2}(u) S_{k_2 k_1}^{i_2 i_1}(-u) \quad (4.47)$$

$$S_{i_1 k}^{k i_2}(2) = 0 \quad (4.48)$$

$$\tilde{\rho}(u) = S_{i_1 k_2}^{k_1 i_2}(\xi+u) S_{i_2 k_1}^{k_2 i_1}(\xi-u) \quad (4.49)$$

(os índices repetidos, nestas expressões, estão somados)

Portanto, para encontrarmos $\rho(u)$, ξ e $\tilde{\rho}(u)$, de vemos substituir nas expressões (4.47), (4.48) e (4.49), os pesos estatísticos $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$ dado por (4.45), pois estamos interessados no limite $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$), $N=3$. Efetuando as somas que aí aparecem, encontramos que (estas contas são efetuadas em detalhes no Apêndice D):

$$\rho(u) = 9 \frac{\sin(3\eta+u)\sin(3\eta-u)}{\sin^2 3\eta} \quad (4.50)$$

$$\tilde{\rho}(u) = 9 \frac{\sin(\xi+u)\sin(\xi-u)}{\sin^2 3\eta} \quad (4.51)$$

onde $2\xi = -9\eta + 3k\pi$ k um inteiro.

De maneira que as equações funcionais que temos de resolver são; de (3.46) e (3.47):

$$Z(u)Z(-u) = 9 \frac{\sin(3\eta+u)\sin(3\eta-u)}{\sin^2 3\eta} \quad (4.53a)$$

$$Z(\xi+u)Z(\xi-u) = 9 \frac{\sin(\xi+u)\sin(\xi-u)}{\sin^2 3\eta} \quad (4.53b)$$

$$\text{com } 2\xi = -9\eta + 3k\pi \quad (4.53c)$$

4.3.4. Solução das Equações Funcionais. Cálculo da Energia Livre no limite $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$), caso $N=3$

Para resolvermos as equações dadas por (4.53) vamos antes mostrar o método para resolver um conjunto de equações mais simples do que estas, mas que, como veremos, é exatamente através deste método que encontraremos a solução desejada.

Seja pois o seguinte conjunto de equações:

$$Z(u)Z(-u) = (1+u)(1-u) \quad (4.54a)$$

$$Z(-\xi+u)Z(-\xi-u) = (\xi+u)(\xi-u) \quad (4.54b)$$

Para resolvê-lo, escolhe-se uma função que satisfaça a equação a sem nos preocuparmos com b:

$$Z(u) = (1+u) \quad (4.55)$$

E esta função não satisfaz a equação b. Para que isto ocorra, devemos multiplicar a função acima, (4.55), por um novo termo, de maneira:

$$Z(u) = (1+u) \frac{(2\xi+u)}{(1-2\xi-u)} \quad (4.56)$$

E agora este $Z(u)$, satisfaz a equação b mas deixou de satisfazer a a. Podemos prosseguir com este procedimento acrescentando um termo e satisfazendo uma das equações, mas não satisfazendo outra, e vice-versa, indefinidamente. Com isto obtêm-se o seguinte produtório:

$$Z(u) = (1+u) \prod_{k=1}^{\infty} \frac{(2k\xi+u)(1-2k\xi+u)}{(1-2k\xi-u)(2k\xi-u)} \quad (4.57)$$

e identificamos este produtório com função Γ , onde:

$$\frac{1}{\Gamma(x)} = x e^{yx} \prod_{k=1}^{\infty} \frac{(k+x)}{k} e^{-x/k} \quad (4.58)$$

(onde y é o número de Euler)

ou melhor, com o seguinte quociente:

$$\frac{\Gamma(Z)\Gamma(y)}{\Gamma(x)\Gamma(w)} = \frac{xw}{Zy} \prod_{k=1}^{\infty} \frac{(k+x)(k+w)}{(k+Z)(k+y)} \quad (4.59)$$

onde já estamos supondo (no nosso produtório é assim) que $x+w = z+y$.

Assim, usando (4.59), encontramos que:

$$Z(u) = (1-u) \frac{\Gamma(1-u/2\xi)\Gamma(-1/2\xi+u/2\xi)}{\Gamma(1+u/2\xi)\Gamma(-1/2\xi-u/2\xi)} \quad (4.60)$$

Sendo que esta função satisfaz (4.54a) e (4.54b) simultâneamente*.

Para que possamos aplicar este método às equações funcionais do modelo de Belavin, (4.53), devemos reescrevê-las usando a seguinte propriedade dos senos:

$$\sin \pi x = \pi x \prod_{m=1}^{\infty} \frac{(m+x)(m-x)}{m^2} \quad (4.61)$$

Usando (4.61) podemos reescrever as equações dadas por (4.53) como:

$$Z(u)Z(-u) = \frac{(3\eta+u)(3\eta-u)}{(3\eta)^2} \prod_{m=1}^{\infty} \frac{[m-(3\eta+u)][m+(3\eta+u)]}{(m-3\eta)^2(m+3\eta)^2} \quad (4.62a)$$

$$Z(\xi+u)Z(\xi-u) = \frac{(\xi+u)(\xi-u)}{(3\eta)^2} \prod_{m=1}^{\infty} \frac{[m-(\xi+u)][m+(\xi+u)]}{(m-3\eta)^2(m+3\eta)^2} \quad (4.62b)$$

* uma propriedade importante para provar este resultado é que $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$

$$\text{com } 2\xi = -9\eta + 3k\pi \quad k \text{ um inteiro} \quad (4.62c)$$

E chamando

$$A^2_{(\eta)} = \frac{1}{(3\eta)^2 \prod_{m=1}^{\infty} (m-3\eta)^2 (m+3\eta)^2} \quad (4.63)$$

Reescreveremos estas equações como:

$$Z(u)Z(-u) = A^2_{(\eta)} (3\eta+u)(3\eta-u) \prod_{m=1}^{\infty} (m-3\eta-u)(m-3\eta+u) \cdot (m+3\eta-u)(m+3\eta+u) \quad (4.64a)$$

$$Z(\xi+u)Z(\xi-u) = A^2_{(\eta)} (\xi+u)(\xi-u) \prod_{m=1}^{\infty} (m-\xi-u)(m-\xi+u) \cdot (m+\xi-u)(m+\xi+u) \quad (4.64b)$$

$$\text{com } 2\xi = -9\eta + 3k\pi \quad k \text{ um inteiro} \quad (4.64c)$$

Podemos agora resolver separadamente as seguintes equações funcionais:

$$z(u)z(-u) = (3\eta+u)(3\eta-u) \quad (4.65)$$

$$z(\xi+u)z(\xi-u) = (\xi+u)(\xi-u)$$

$$k_m(u)k_m(-u) = (m-3\eta-u)(m-3\eta+u) \quad (4.66)$$

$$k_m(\xi+u)k_m(\xi-u) = (m+\xi-u)(m+\xi+u)$$

e

$$\ell_m(u) \ell_m(-u) = (m+3\eta-u)(m+3\eta+u) \quad (4.67)$$

$$\ell_m(\xi+u) \ell_m(\xi-u) = (m-\xi-u)(m-\xi+u)$$

de maneira que, $Z(u)$ será:

$$Z(u) = A(\eta) z(u) \prod_{m=1}^{\infty} K_m(u) \ell_m(u) \quad (4.68)$$

E as equações (4.65), (4.66) e (4.67) são resolvidas seguindo o método utilizado para o nosso exemplo, cujas equações são dadas por (4.54). Os resultados são:

$$z(u) = (3\eta-u) \frac{\Gamma(\frac{3\eta}{2\xi} - u/2\xi) \Gamma(1 + u/2\xi)}{\Gamma(\frac{3\eta}{2\xi} + u/2\xi) \Gamma(1 - u/2\xi)} \quad (4.69)$$

$$k_m(u) = (m-3\eta-u) \frac{\Gamma(\frac{m}{2\xi} - \frac{3\eta}{2\xi} - \frac{u}{2\xi}) \Gamma(\frac{m}{2\xi} + 1 + \frac{u}{2\xi})}{\Gamma(\frac{m}{2\xi} - \frac{3\eta}{2\xi} + \frac{u}{2\xi}) \Gamma(\frac{m}{2\xi} + 1 - \frac{u}{2\xi})} \quad (4.70)$$

$$\ell_m(u) = (m+3\eta-u) \frac{\Gamma(\frac{m}{2\xi} + \frac{3\eta}{2\xi} - \frac{u}{2\xi}) \Gamma(\frac{m}{2\xi} + \frac{u}{2\xi})}{\Gamma(\frac{m}{2\xi} + \frac{3\eta}{2\xi} + \frac{u}{2\xi}) \Gamma(\frac{m}{2\xi} - \frac{u}{2\xi})} \quad (4.71)$$

E assim substituindo estes resultados em (4.68) a Função de Partição para o modelo de Belavin é dado por:

$$Z(u) = \frac{(3\eta-u)}{3\eta} \frac{\Gamma(\frac{3\eta}{2\xi} - u/2\xi) \Gamma(1+u/2\xi)}{\Gamma(\frac{3\eta}{2\xi} + u/2\xi) \Gamma(1-u/2\xi)} \cdot \prod_{m=1}^{\infty} \frac{(m-3\eta-u)(m+3\eta-u)}{(m-3\eta)(m+3\eta)} \frac{\Gamma(\frac{m}{2\xi} - \frac{3\eta}{2\xi} - \frac{u}{2\xi}) \Gamma(\frac{m}{2\xi} + 1 + \frac{u}{2\xi})}{\Gamma(\frac{m}{2\xi} - \frac{3\eta}{2\xi} + \frac{u}{2\xi}) \Gamma(\frac{m}{2\xi} + 1 - \frac{u}{2\xi})}$$

$$\cdot \frac{\Gamma(\frac{m}{2\xi} + \frac{3}{2\xi} - u/2\xi) \Gamma(\frac{m}{2\xi} + u/2\xi)}{\Gamma(\frac{m}{2\xi} + \frac{3}{2\xi} + u/2\xi) \Gamma(\frac{m}{2\xi} - u/2\xi)} \quad (4.72)$$

com $2\xi = -9\eta + 3k\pi$, k um inteiro.

Estamos interessados na energia livre por sítio, que é dada por $f = -K_B T \ln Z$, assim, tomando o logarítmo de $Z(u)$ dada por (4.72) e usando que:

$$\ln \frac{\beta}{\alpha} = \int_0^\infty \frac{dx}{x} (e^{-\alpha x} - e^{-\beta x}) \quad (4.73)$$

$$\alpha > 0, \beta > 0$$

para deixar f sob forma integral, obtemos que:

$$\begin{aligned} f(u) = & \int_0^\infty \frac{dx}{x} \left\{ e^{-3\eta x} (1 - e^{ux}) + \frac{2}{(e^x - 1)} \left[\cosh 3\eta x \cdot \right. \right. \\ & \left. \cdot (1 - e^{ux}) + \left(e^{-\frac{3\eta x}{2\xi}} - e^{-x} \right) \sinh \frac{ux}{2\xi} \right] + \\ & \left. + \frac{2}{(e^x - 1)(e^{x/2\xi} - 1)} \sinh \frac{ux}{2\xi} (2 \cosh \frac{3\eta u}{2\xi} - e^{-x} - 1) \right\} \end{aligned} \quad (4.74)$$

com $2\xi = -9\eta + 3k\pi$, k um inteiro

Quanto ao modelo de Mecânica Estatística, atingimos nosso objetivo com este cálculo. Nossa meta agora é obter, formalmente o Hamiltoniano Quântico associado ao modelo de Belavin, $Z(N) \times Z(N)$, para qualquer N . Como dissemos faremos explicitamente para $N=3$, $q \neq 1$, o cálculo do Hamiltoniano e do seu Estado Fundamental, sendo que este último é derivado deste resultado (4.74) que acabamos de obter para a energia livre. Caso $N=3$, $q \neq 1$. Assim, as próxi-

mas secções deste capítulo serão dedicadas ao Hamiltoniano.

4.4. HAMILTONIANO QUÂNTICO ASSOCIADO AO MODELO DE BELAVIN

$$Z(N) \times Z(N)$$

Para encontrarmos o Hamiltoniano Quântico, associado ao modelo de Belavin vamos generalizar a maneira como foi calculado o Hamiltoniano associado ao 8-Vértices, que é o XYZ, sendo nosso procedimento mostrado a seguir:

Com a intenção de termos uma sequência mais clara deste procedimento, vamos novamente definir o modelo de Mecânica Estatística:

$$S_{i_1 j_1 i_2 j_2}^{j_1 j_2}(u) = \sum_{v, \mu=0}^{N-1} \omega_{v\mu}(u) I_{v\mu}^{i_1 j_1} \bar{I}_{v\mu}^{i_2 j_2}, \quad (2.17)$$

onde $I_{v\mu}$ é dada por (2.18), $\bar{I}_{v\mu}$ é sua transposta conjugada e $\omega_{v\mu}(u)$ para que o modelo seja solúvel é dada por (4.19).

Podemos escrever a matriz de Transferência T para este modelo. Considerando uma linha da rede, constituída por n vértices temos:

$$T_{\{\mu, \mu'\}}(u) = \sum_{\lambda_1} \dots \sum_{\lambda_n} \prod_{i=1}^n S_{\lambda_i \mu_i}^{\lambda_{i+1} \mu'_i}(u) = \sum_{\lambda_1} \sum_{\lambda_n} \prod_{i=1}^n e^{-\frac{H(\lambda_i, \lambda_{i+1}, \mu_i, \mu'_i)}{K_B T}} \quad (4.75)$$

onde $H(i_1, j_1, i_2, j_2)$ é a energia de uma configuração de vértices.

Podemos escrever o operador T , (não mais os elementos de T e sim o próprio T) como:

$$T(u) = T(o) e^{-u H_1 - u^2 H_2 - u^3 H_3 - \dots} \quad (4.76)$$

e calcular agora o operador H_1 , que é dado, derivando a fórmula acima, por:

$$H_1 = - T(o)^{-1} \left. \frac{d}{du} T(u) \right|_{u=0} \quad (4.77)$$

Sendo que para $N=2$, é este o operador que Baxter encontrou ser o XYZ (Heisenberg Completamente Anisotrópico), portanto, é neste operador que estamos interessados, embora os demais H_2, H_3 , também possam ser calculados e são dados por derivadas superiores da Matriz de Transferência*.

Para obtermos H_1 , dado por (4.77), vamos em primeiro lugar calcular o operador $[T(o)]^{-1}$, usando, para tal, a expressão (4.1b) para calcularmos os $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(u)$ (por esta expressão já possuir as matrizes $I_{\nu \mu}^{i_1 j_1}$ explicitada em termos de i_1, j_1, ν e μ):

$$S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(u) = \sum_{\nu=0}^{N-1} \omega_{\nu, j_1 - i_1} z^{-\nu(j_2 - i_1)} \delta_{i_1 + i_2, j_1 + j_2} \quad (4.1b)$$

$$z = e^{2\pi i / N}$$

Assim, colocando $u=0$, nesta expressão, e usando (4.19) para $\omega_{\alpha, \beta}$ (expressão esta que nos dá que $\omega_{\alpha, \beta}(0)=1$), obtemos, como deveríamos esperar, a Condição Inicial:

* Por exemplo: $H_2 = \frac{1}{2} H_1^2 - \frac{1}{2} T(o)^{-1} \left. \frac{d^2 T(u)}{du^2} \right|_{u=0}$

$$S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(0) = N \delta_{i_1, j_2} \delta_{i_2, j_1} \quad (3.18)$$

já obtida no Capítulo anterior.

Substituindo este resultado em (4.75) ficamos com:

$$\begin{aligned} T(0) &= \sum_{\{\mu, \mu'\}} \dots \sum_{\lambda_1} \sum_{\lambda_n} \prod_{i=1}^n S_{\lambda_i \mu_i}^{\lambda_{i+1} \mu'_i}(0) = \\ &= \sum_{\lambda_1} \sum_{\lambda_n} \prod_{i=1}^n N^{\lambda_i} \delta_{\lambda_i, \mu'_i} \delta_{\mu_i, \lambda_{i+1}} \end{aligned}$$

e efetuando os somatórios, obtemos que:

$$T(0) = N^n \delta_{\mu_1, \mu'_2} \delta_{\mu_2, \mu'_3} \dots \delta_{\mu_n, \mu'_1} \quad (4.78)$$

Sendo que este operador, $T(0)$, é conhecido como operador de deslocamento (ou de Ingles, operador de shift"). E $T^{-1}(0)$ é simplesmente a transposta desta matriz, sendo dada por:

$$T^{-1}(0) = N^{-n} \delta_{\mu'_1, \mu_2} \delta_{\mu'_2, \mu_3} \dots \delta_{\mu'_n, \mu_1} \quad (4.79)$$

Obtido $T^{-1}(0)$, o próximo passo é calcular $\left. \frac{dT}{du} \right|_{u=0}$. Novamente, usando a expressão (4.75), para $T(u)$, obtemos que:

$$\begin{aligned} \frac{d}{du} T \Big|_{u=0} &= \sum_{\{\mu, \mu'\}} \sum_{\lambda_1} \sum_{\lambda_n} \left[S_{\lambda_1 \mu_1}^{\lambda_2 \mu'_1}(u) S_{\lambda_2 \mu_2}^{\lambda_3 \mu'_2}(u) \dots S_{\lambda_n \mu_n}^{\lambda_1 \mu'_n}(u) + \right. \\ &\quad \left. + S_{\lambda_1 \mu_1}^{\lambda_2 \mu'_1}(u) S_{\lambda_2 \mu_2}^{\lambda_3 \mu'_2}(u) \dots S_{\lambda_n \mu_n}^{\lambda_1 \mu'_n}(u) + \dots + \right] \end{aligned}$$

$$+ \left[\begin{array}{cccc} S_{\lambda_1 \mu_1}^{\lambda_2 \mu'_1}(u) & S_{\lambda_2 \mu_2}^{\lambda'_1 \mu'_2}(u) & \dots & S_{\lambda_n \mu_n}^{\lambda_1 \mu'_n}(u) \end{array} \right]_{u=0} \quad (4.80)$$

↑

onde $S'(u)$ é a derivada deste em relação a u .

↑

Efetuada a soma sobre os λ e usando a Condição Inicial (3.18), (4.80) torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{dT}{du} \Big|_{u=0} \{ \mu, \mu' \} &= N^{n-1} \sum_{j=1}^n \{ \delta_{\mu_1, \mu'_2} \delta_{\mu_2, \mu'_3} \dots \\ &\dots \delta_{\mu_{j-2}, \mu'_{j-1}} S_{\mu_j \mu_{j-1}}^{\mu'_j \mu'_{j+1}}(u) \Big|_{u=0} \cdot \\ &\cdot \delta_{\mu_{j+1}, \mu'_{j+2}} \dots \delta_{\mu_n, \mu'_1} \} \end{aligned} \quad (4.81)$$

E se substituirmos S , por sua expressão em termos das matrizes $I_{\nu\mu}$, dada por (2.17) temos que:

$$\begin{aligned} \frac{dT}{du} \Big|_{u=0} \{ \mu, \mu' \} &= N^{n-1} \sum_{j=1}^n \{ \delta_{\mu_1, \mu'_2} \delta_{\mu_2, \mu'_3} \dots \\ &\dots \delta_{\mu_{j-2}, \mu'_{j-1}} \left[\sum_{\nu} \omega'_{\nu, \mu}(u) \right]_{u=0} I_{\nu\mu}^{\mu_j \mu'_j} I_{\nu\mu}^{\mu_{j-1} \mu'_{j+1}} \} \\ &\cdot \delta_{\mu_{j+1}, \mu'_{j+2}} \dots \delta_{\mu_n, \mu'_1} \} \end{aligned} \quad (4.82)$$

onde $\omega'(u)$ é a derivada de ω em relação a u .

Agora, aplicando $T^{-1}(0)$ a $\frac{dT}{du} \Big|_{u=0}$, obtemos que:

$$\begin{aligned}
T(0) \frac{dT}{du} \Big|_{u=0} \{ \mu, \mu' \} &= N^{-1} \sum_{j=1}^n \{ \delta_{\mu_1, \mu'_1} \delta_{\mu_2, \mu'_2} \dots \\
&\dots \delta_{\mu_{j-1}, \mu'_{j-1}} \mid \sum_{v, \mu} \omega'_{v\mu}(u) \underset{\uparrow}{I_{v\mu}^{\mu_{j+1} \mu'_j}} \underset{\uparrow}{\bar{I}_{v\mu}^{\mu_j \mu'_{j+1}}} \mid \\
&\delta_{\mu_{j+2}, \mu'_{j+2}} \dots \delta_{\mu_n, \mu'_n} \} \quad (4.83)
\end{aligned}$$

A definição de produto direto é (aqui dando como exemplo o produto direto de três matrizes):

$$[A \otimes B \otimes C]_{\{i_1 i_2 i_3; j_1 j_2 j_3\}} = A_{\{i_1, j_1\}} B_{\{i_2, j_2\}} C_{\{i_3, j_3\}} \quad (4.84)$$

Olhando para esta definição e para a fórmula (4.83), vemos que esta última encaixa-se quase completamente nesta definição a não ser pelas matrizes $I_{v\mu}$ que aparecem com os índices misturados. Se ao invés de $\underset{v\mu}{I}^{\mu_{j+1} \mu'_j} \underset{v\mu}{\bar{I}}^{\mu_j \mu'_{j+1}}$ como aparece em (4.83), tivermos $\underset{v\mu}{I}^{\mu_j \mu'_j} \underset{v\mu}{\bar{I}}^{\mu_{j+1} \mu'_{j+1}}$, poderemos então escrever cada termo do somatório em j ($v\mu$ fixos) como o produto direto dada a seguir:

$$1 \otimes 1 \otimes \dots \otimes \underset{v\mu}{I} \otimes \underset{v\mu}{\bar{I}} \otimes 1 \otimes \dots \otimes 1 = \underset{v\mu}{I}^j \underset{v\mu}{I}^{j+1} \quad (4.85)$$

onde 1 é a Matriz Identidade e $\underset{v\mu}{I}^j \underset{v\mu}{I}^{j+1}$ é a maneira sucinta de se escrever este produto.

Então, para que possamos reescrever (4.83) com $\underset{v\mu}{I}^{\mu_j \mu'_j}$ ao invés do termo obtido, precisamos encontrar $p_{v\mu}(u)$ tal que S dada por (2.17) possa ser redefinida como:

$$\begin{aligned}
 S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(u) &= \sum_{\nu \mu=0}^{N-1} \omega_{\nu \mu}(u) I_{\nu \mu}^{i_1 j_1} \bar{I}_{\nu \mu}^{i_2 j_2} = \\
 &= \sum_{\nu \mu=0}^{N-1} p_{\nu \mu}(u) I_{\nu \mu}^{i_2 j_1} \bar{I}_{\nu \mu}^{i_1 j_2} \quad (4.86)
 \end{aligned}$$

Ou seja, precisamos encontrar $p_{\nu \mu}$ que satisfaça:

$$\sum_{\nu, \mu=0}^{N-1} p_{\nu \mu}(u) I_{\nu \mu}^{i_2 j_1} I_{\nu \mu}^{i_1 j_2} = \sum_{\nu', \mu'=0}^{N-1} \omega_{\nu', \mu'}(u) I_{\nu', \mu'}^{i_1 j_1} \bar{I}_{\nu', \mu'}^{i_2 j_2} \quad (4.87)$$

o que usando a fórmula (4.1b), já com os elementos $I_{\nu \mu}^{i, j}$ explicitados em termos de i e j , ν e μ , torna-se:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\nu=0}^{N-1} p_{\nu, j_1-i_2}(u) Z^{-\nu(j_2-i_2)} \delta_{i_1+i_2, j_1+j_2} &= \\
 = \sum_{\nu'=0}^{N-1} \omega_{\nu', j_1-i_1}(u) Z^{-\nu'(j_2-i_1)} \delta_{i_1+i_2, j_1+j_2} \quad (4.88)
 \end{aligned}$$

$$\text{com } Z = e^{2\pi i/N}$$

Chamando $k = j_1 - i_1$ e $m = j_2 - i_2$ (4.88) pode ser reescrita:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\nu=0}^{N-1} p_{\nu-m} Z^{\nu k} \delta_{i_1+i_2, k+m} &= \\
 \sum_{\nu'=0}^{N-1} \omega_{\nu', k} Z^{-\nu' m} \delta_{i_1+i_2, k+m}
 \end{aligned}$$

E lembrando que $\sum_{k=0}^{N-1} Z^{(v-1)k} = N \delta_{v,1}$ para $Z = e^{2\pi i/N}$, podemos encontrar $p_{\nu \mu}$ da expressão acima, multiplicando ambos os lados desta expressão por Z^{-1k} e somando sobre k , de maneira que:

$$p_{\nu\mu} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \sum_{\beta=0}^{N-1} \omega_{\alpha,\beta} Z^{\alpha\mu-\beta\nu} \quad (4.89)$$

Portanto usando estes ps como amplitude de S (o que significa trocar ω por p , e μ_{j+1} por μ_j em (4.83)), o operador $T^{-1}(0)$.

$\left. \frac{dT}{du} \right|_{u=0}$ fica sendo dado por:

$$\begin{aligned} T^{-1}(0) \left. \frac{dT}{du} \right|_{u=0} \{ \mu, \mu' \} &= N^{-1} \sum_{j=1}^n \delta_{\mu_1, \mu'_1} \delta_{\mu_2, \mu'_1} \dots \\ &\quad \delta_{\mu_{j-1}, \mu'_{j-1}} \left| \sum_{\nu, \mu} p'_{\nu\mu}(u) \right|_{u=0} I_{\nu\mu}^{\mu_j \mu'_j} \bar{I}_{\nu\mu}^{\mu_{j+1} \mu'_{j+1}} \\ &\quad \delta_{\mu_{j+2}, \mu'_{j+2}} \dots \delta_{\mu_n, \mu'_n} \end{aligned} \quad (4.90)$$

onde $p'(u)$ é a derivada de p em relação a u .

e portanto usando a notação compacta dada por (4.85):

$$T^{-1}(0) \left. \frac{dT}{du} \right|_{u=0} = N^{-1} \sum_{j=1}^n \left\{ \sum_{\nu, \mu} p'_{\nu\mu}(u) \right|_{u=0} I_{\nu\mu}^j \bar{I}_{\nu\mu}^{j+1} \} \quad (4.91)$$

e $H_1 = - T^{-1}(0) \left. \frac{dT}{du} \right|_{u=0}$, dada por (4.77), é portanto:

$$H_1 = - N^{-1} \sum_{j=1}^n \left\{ \sum_{\nu, \mu} p'_{\nu\mu}(u) \right|_{u=0} I_{\nu\mu}^j \bar{I}_{\nu\mu}^{j+1} \} \quad (4.92)$$

Onde este H_1 é um Hamiltoniano para uma cadeia linear de n sítios, onde cada sítio interage com seus vizinhos mais próximos através do operador $I_{\nu\mu}$.

EXEMPLO 5

Para $N=2$, $I_{\nu\mu}$ são as Matrizes de Pauli, onde:

$$I_{01} = \sigma^x$$

$$I_{1,1} = -i\sigma^y$$

$$I_{1,0} = \sigma^z$$

de maneira que,omitindo o termo da identidade, I_{00} , o Hamiltoniano para $N=2$ é dado por:

$$H_1 = - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \{ p'_{01}(u) \Big|_{u=0} \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + p'_{11}(u) \Big|_{u=0} \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + p'_{10}(u) \Big|_{u=0} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \} \tag{4.93}$$

cujos p_s são calculados de (4.89). Quando os $\omega_{\alpha,\beta}$ que aparecem nesta expressão (4.89), são dados por (4.19), diretamente em termos das funções elíticas, este Hamiltoniano é conhecido por XYZ (Heisemberg Completamente Anisotrópico). Agora quando fazemos $q \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow i\infty$) nestas funções e trabalhamos com $\omega_{\alpha,\beta}$ dados por (4.36), este Hamiltoniano torna-se o XXZ (Heisemberg Anisotrópico), pois neste caso dois de seus coeficientes, $p_{\nu\mu}$, tornam-se iguais em (4.93).

Para $N=3$

Escrevendo $I_{\nu\mu}$ em termos das matrizes ζ e R , dadas por (2.19) e (2.20) respectivamente. o Hamiltoniano, dado por (4.92) é agora escrito como:

$$H_1 = - \frac{1}{3} \sum_{j=1}^n \{ p'_{10}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j \zeta_{j+1}^+ + p'_{20}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j^+ \zeta_{j+1}^+ \}$$

$$\begin{aligned}
& + p'_{01}(u) \Big|_{u=0} R_j R_{j+1}^+ + p'_{02}(u) \Big|_{u=0} R_j^+ R_{j+1} + \\
& + p'_{11}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j R_j R_{j+1}^+ \zeta_{j+1}^+ + p'_{22}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j^+ R_j^+ R_{j+1} \zeta_{j+1} + \\
& + p'_{21}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j^+ R_j R_{j+1}^+ \zeta_{j+1} + p'_{12}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j R_j^+ R_{j+1} \zeta_{j+1}^+ \} \quad (4.94)
\end{aligned}$$

onde

$$\zeta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & Z & 0 \\ 0 & 0 & Z^2 \end{pmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.95)$$

$$Z = e^{2\pi i/3}$$

Sendo, este o Hamiltoniano, para o qual calcularemos, como exemplo, explicitamente os $p_{v\mu}$, no limite $q \rightarrow 1$. Após este cálculo veremos que este operador H_1 é Hermitiano e também não completamente anisotrópico, sendo neste sentido análogo a XXZ. Será também para este Hamiltoniano, $N=3$, $q \rightarrow 1$, que calcularemos o Estado Fundamental.

O Estado Fundamental do Hamiltoniano, dado por (4.92) (para qualquer N) é obtido da seguinte forma:

Como vimos, de (4.76) e (4.77)

$$T(u) = T(0) e^{-\mu H_1 - \mu^2 H_2} - \dots \quad (4.76)$$

$$\text{com } H_1 = - T(0) \left. \frac{d}{du} T(u) \right|_{u=0} \quad (4.77)$$

Como os demais H_s são derivadas de ordem superior da Matriz de Transferência no ponto $u=0$, todos eles comutam entre si. Assim, quando substituímos em (4.76) os operadores $H_1, H_2 \dots$ por seus respectivos mínimos auto-valores, $T(u)$ assume seu valor máximo, λ_m . De maneira que, se chamamos de E_1 ao menor auto-valor de H_1 , i.é., a energia do seu Estado Fundamental, ele deve ser calculado de:

$$E_1 = - \lambda_m(0) \left. \frac{d}{du} \lambda_m(u) \right|_{u=0} = - \left. \frac{d}{du} \ln \lambda_m(u) \right|_{u=0} \quad (4.96)$$

onde λ_m , é o maior auto-valor da Matriz de Transferência.

Como, a energia livre por sítio do modelo de Mecânica Estatística* é:

$$f = - \frac{1}{n} \ln \lambda_m \quad n \rightarrow \infty \quad (4.97)$$

podemos escrever (4.96) como:

$$E_1 = n \left. \frac{d}{du} f(u) \right|_{u=0} \quad (4.98)$$

ou então, definindo ε_1 como sendo a Energia do Estado Fundamental, por sítio, no limite termodinâmico, temos que:

$$\varepsilon_1 = \left. \frac{d}{du} f(u) \right|_{u=0} \quad (4.99)$$

*ver definição de energia livre por sítio, Capítulo I (1.4) com $N = n m$ para uma rede quadrada com n colunas e m linhas e ver expressão $\mathcal{Z} = \lambda_{\max}^m$, no limite termodinâmico (3.3).

Portanto, se quisermos saber a energia do Estado Fundamental de H_1 , basta calcularmos a Energia Livre do Modelo de Mecânica Estatística, o que no caso $N=3$, $q \rightarrow 1$ foi calculado nas secções precedentes.

Assim, concluindo esta secção, o que observamos até aqui, foi um método para obter o Hamiltoniano H_1 , para todo N (método este que pode ser estendido para os demais Hamiltonianos de (4.76)), que consiste fundamentalmente em encontrar a relação dos coeficientes $p_{\nu\mu}$ deste Hamiltoniano com as antigas amplitudes $\omega_{\alpha,\beta}$, relação esta dada por (4.89). É importante observar, que esta tarefa (encontrar a relação (4.89) entre os p_s e ω_s) seria impossível de se cumprir para qualquer N , se tivéssemos de encontrá-la diretamente de (4.87), sem escrever $I_{\nu\mu}^{i_1 j_1} \bar{I}_{\nu\mu}^{i_2 j_2}$ (sendo que $I_{\nu\mu}^0 \bar{I}_{\nu\mu}$ tem dimensão $N^2 \times N^2$) explicitamente como função de i_1, j_1, i_2, j_2, μ e ν , como fizemos. Baxter para $N=2$, trabalha com a matriz inteira (4x4), o que não pode ser se quisermos obter o resultado geral como foi feito em nosso trabalho.

Sabemos também como calcular o Estado Fundamental H_1 , via energia livre do Modelo de Mecânica Estatística. Aproveitando o cálculo já feito nas secções anteriores de energia livre para $N=3$, $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$) faremos, na próxima sub-secção, este caso como exemplo.

4.4.1. Exemplo, $N=3$, no limite $q \rightarrow 1, (\tau \rightarrow i0)$. Hamiltoniano e seu Estado Fundamental

O Hamiltoniano para $N=3$ nós o escrevemos no exemplo 5, na secção anterior e é dado por:

$$\begin{aligned}
 H_1 = & - \frac{1}{3} \sum_{j=1}^n \{ p'_{10}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j \zeta_{j+1}^+ + p'_{20}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j^+ \zeta_{j+1}^+ \\
 & + p'_{01}(u) \Big|_{u=0} R_j R_{j+1}^+ + p'_{02}(u) \Big|_{u=0} R_j^+ R_{j+1}^+ + \\
 & + p'_{11}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j R_j R_{j+1}^+ \zeta_{j+1}^+ + p'_{22}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j^+ R_j^+ R_{j+1}^+ \zeta_{j+1}^+ + \\
 & + p'_{21}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j^+ R_j R_{j+1}^+ \zeta_{j+1}^+ + p'_{12}(u) \Big|_{u=0} \zeta_j R_j^+ R_{j+1}^+ \zeta_{j+1}^+ \} \quad (4.94)
 \end{aligned}$$

onde

$$\zeta_j = \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes \begin{bmatrix} 1 & \\ & z \\ & & z^2 \end{bmatrix} \otimes \mathbb{1} \dots \otimes \mathbb{1} \quad (4.95)$$

$$\begin{aligned}
 R_j = & \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \dots \mathbb{1} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes \mathbb{1} \dots \otimes \mathbb{1} \\
 & \downarrow \\
 & j \text{ é sima posição}
 \end{aligned}$$

com $z = e^{2\pi i/3}$

Temos então de calcular estes coeficientes p_s usando para tal a fórmula (4.85), com $N=3$,

$$\begin{aligned}
 p_{\nu\mu}(u) = & \frac{1}{3} \sum_{\alpha=0}^2 \sum_{\beta=0}^2 \omega_{\alpha,\beta}(u) z^{\alpha\mu-\beta\nu} \quad (4.89) \\
 z = & e^{2\pi i/3}
 \end{aligned}$$

e usando para $\omega_{\alpha,\beta}(u)$, as funções encontradas no limite $q \rightarrow 1$ e dada por (4.35) encontramos que (estas contas são feitas para um dos p_s em detalhes no Apêndice D):

$$p_{10} = -4 \frac{\sin(u/3+\pi/3)\sin(u/3-\pi/3)\sin(u/3+\pi)}{\sin 3\eta}$$

$$p_{01} = -4 \frac{\sin(u/3 + \pi/3) \sin u / 3 \sin(u/3 + 3\eta - \pi/3)}{\sin 3\eta} \quad (4.100)$$

$$p_{02} = -4 \frac{\sin(u/3 - \pi/3) \sin u / 3 \sin(u/3 + 3\eta + \pi/3)}{\sin 3\eta}$$

$$p_{10} = p_{11} = p_{12} = \frac{\sin u}{\sin 3\eta} e^{-i\eta}$$

$$p_{20} = p_{21} = p_{22} = p_{10}^+ = \frac{\sin u}{\sin 3\eta} e^{i\eta}$$

E derivando estes p_s em relação a u , e fazendo $u=0$ nesta derivada, obtemos os coeficientes do Hamiltoniano.

$$p'_{00}(u) \Big|_{u=0} = \frac{\cos 3\eta}{\sin 3\eta}$$

$$p'_{01}(u) \Big|_{u=0} = -2 \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{\sin(3\eta - \pi/3)}{\sin 3\eta} \quad (4.101)$$

$$p'_{02}(u) \Big|_{u=0} = \frac{2\sqrt{3}}{3} \frac{\sin(3\eta + \pi/3)}{\sin 3\eta}$$

$$p'_{10}(u) \Big|_{u=0} = p'_{11}(u) \Big|_{u=0} = p'_{12}(u) \Big|_{u=0} = \frac{e^{-i\eta}}{\sin 3\eta}$$

$$p'_{20}(u) \Big|_{u=0} = p'_{21}(u) \Big|_{u=0} = p'_{22}(u) \Big|_{u=0} = p_{10}^{+\prime}(u) \Big|_{u=0} = \frac{e^{i\eta}}{\sin 3\eta}$$

De maneira que o Hamiltoniano para $N=3$, neste limite de $q \rightarrow 1$, $\tau \rightarrow i0$ é dado por:

$$\begin{aligned}
H_1 = & - \frac{1}{3} \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{e^{-i\eta}}{\sin 3\eta} \left[\zeta_j \zeta_{j+1}^+ + \zeta_j R_j R_{j+1}^+ \zeta_{j+1}^+ + \right. \right. \\
& + \left. \zeta_j R_j^+ R_{j+1} \zeta_{j+1} \right] - \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{\sin(3\eta - \pi/3)}{\sin 3\eta} R_j R_{j+1}^+ + \\
& + \frac{\sqrt{3}}{3} \frac{\sin(3\eta + \pi/3)}{\sin 3\eta} R_j^+ R_{j+1} \left. \right\} + \text{h.c.} \quad (4.102)
\end{aligned}$$

E a energia do Estado Fundamental, por sítio, no limite termodinâmico, deste Hamiltoniano, é calculada usando-se (4.99).

$$\epsilon_1 = \frac{d}{du} f(u) \Big|_{u=0} \quad (4.99)$$

onde $f(u)$ é a energia livre do Modelo de Mecânica Estatística, o modelo de Belavin, no limite em $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow i0$), que calculamos na secção anterior e é dada pela fórmula (4.74). Derivando esta fórmula em relação a u e colocando neste resultado $u=0$ obtemos que:

$$\begin{aligned}
\epsilon_1 = & \int_0^\infty \frac{dx}{2\xi \sin \frac{x}{2} \sin \frac{x}{4\xi}} \left\{ e^{-x/2} \cosh \left[\frac{x}{2\xi} (3\eta - 1/2) - \right. \right. \\
& - e^{x/4} \cosh \left[\frac{x}{2} \left(\frac{1}{2\xi} - 1 \right) \right] - \\
& \left. \left. - 2\xi \sinh \frac{x}{4\xi} \left[x(3\eta - 1/2) \right] \right\} \quad (4.103)
\end{aligned}$$

Podemos agora notar, de (4.102) que o operador H_1 , obtido neste limite $N=3$, $q \rightarrow 1$ é um operador Hermitiano. Além disto não é completamente anisotrópico no sentido que vários coeficientes são iguais entre si. Este último resultado, já era esperado, uma vez que este é um limite análogo ao que se faz para obter o XXZ no caso $N=2$.

Com estes resultados, o H_1 e o do seu Estado Fundamental, no limite citado, $N=3$, atingimos nosso último objetivo, que era o de exemplificar o método de cálculo destes Hamiltonianos, associados ao Modelo de Belavin, para $N=2$. Estes cálculos podem ser feitos também fora deste limite, trabalhando com as funções elípticas mesmo, obtém-se então um Hamiltoniano completamente anisotrópico, além de que é neste caso que se espera eventualmente tirar informações dos exemplos de modelos realmente físicos sem patologias, que talvez sejam encontradas no limite citado, em analogia com o 6-Vértices.

CONCLUSÃO

CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentamos alguns dos resultados que obtivemos para um modelo de Mecânica Estatística Clássica, possuidor de simetria $Z(N) \times Z(N)$, que estamos chamando de modelo de Belavin. Essencialmente, estes resultados constam da obtenção do Hamiltoniano no Quântico Unidimensional (para uma cadeia linear de n sítios) associado a este modelo e do cálculo do Estado Fundamental, por sítio, deste Hamiltoniano, com $n \rightarrow \infty$. Estes cálculos, o do Hamiltoniano e do seu Estado Fundamental, são feitos via solução da Equação dos Triângulos e servem também de exemplo de cálculo da energia livre, o que é feito usando equações funcionais derivadas desta Equação (foi mostrado que o cálculo do Estado Fundamental advém da energia livre).

Este tipo de cálculo foi feito originalmente por Baxter quando da resolução do modelo de 8-Vértices, simetria $Z(2) \times Z(2)$, mostrou que o Hamiltoniano associado era o XYZ (Heisenberg Completamente Anisotrópico) e obteve o Estado Fundamental deste Hamiltoniano, até então desconhecido.

Mostramos, neste trabalho, que é possível generalizar estes cálculos para as demais simetrias, sendo que esta generalização para ser efetuada necessita que seja calculado o equivalente a inversa de uma matriz $N^2 \times N^2$. Isto não teria sido possível, para N arbitrário, se não tivéssemos encontrado uma maneira de trabalhar formalmente apenas com os elementos desta matriz e não com a matriz toda como foi feito no trabalho de Baxter (sendo que neste caso a matriz era 4×4).

Fazemos, como exemplo, o cálculo deste Hamiltoniano e do seu Estado Fundamental, para $N=3$, no limite em que as funções elípticas que aparecem na solução do Modelo de Mecânica Estatística, o $Z(3) \times Z(3)$, tornam-se trigonométricas. Este limite é análogo ao que

pode ser feito no 8-Vértices, quando deste obtém-se o modelo de 6-Vértices (o limite é do mesmo tipo) e o Hamiltoniano associado é o XXZ (Heisenberg Anisotrópico).

Estes cálculos, relativos ao Hamiltoniano, foram feitos neste trabalho no sentido de, partindo do modelo de Mecânica Estatística chegar ao Hamiltoniano, e através do maior autovalor da Matriz de Transferência deste modelo (a energia livre) encontrar o menor do Hamiltoniano (o Estado Fundamental). Pode-se entretanto, pensar, como proposta, no sentido contrário: tentar através do cálculo numérico dos outros autovalores deste Hamiltoniano obter os outros auto-valores da Matriz de Transferência (não só o maior). Isto porque se, por exemplo, não existe nenhuma indicação de que este Hamiltoniano possa ter uma interpretação física direta, o mesmo já não ocorre com o Modelo de Mecânica Estatística, o $Z(N) \times Z(N)$, do qual advém, sendo então a obtenção deste Hamiltoniano bastante importante no sentido de que este contém informações sobre o modelo de Mecânica Estatística.

Quanto à importância do modelo $Z(N) \times Z(N)$, podemos citar, por exemplo, que o fenômeno de adsorção de Kr em grafite é esperado estar na mesma classe de universalidade que o modelo de Potts, de simetria $Z(3)$. Assim, da mesma forma como o 8-Vértices, $Z(2) \times Z(2)$, contém informações sobre o modelo de Ising, $Z(2)$, (os expoentes críticos são os mesmos quando medidos em termos do comprimento de correlação) talvez também o $Z(3) \times Z(3)$ possa trazer informações sobre o $Z(3)$. É importante frisar que quando nos referimos ao $Z(3) \times Z(3)$, não estamos nos referindo ao cálculo efetuado no limite de funções trigonométricas como os que foram feito neste trabalho, pois o novo modelo que advém deste limite pode apresentar patologias análogas às do modelo de 6-Vértices, que por exemplo, apresenta o Estado Fundamental ferroelétrico "congelado" até T_c , sendo neste sentido não físico. Ficam portanto, por serem feitos, os cálculos

fora deste limite.

Além da obtenção do Hamiltoniano Quântico, obtivemos também outro resultado, agora sobre dualidade do modelo de Belavin $Z(N) \times Z(N)$. Em nosso trabalho nós a obtivemos para qualquer N usando um método diferente do método gráfico que Baxter utilizou em seu cálculo para $N=2$. Nosso método, não só simplifica o resultado para $N=2$, como é através dele que a obtenção do resultado para qualquer N se fez possível. É também devido a este resultado que pudemos mostrar que os dois limites que podem ser feitos nas funções e líticas (que são soluções do problema), para função trigonométricas ($q \rightarrow 1$ ou $q \rightarrow 0$) resultam em modelos equivalentes. Este último resultado para $N=2$ é a já conhecida equivalência do modelo de 6-Vértices com o 8-Vértices crítico.

APÊNDICE A

APÊNDICE A

RELAÇÃO TRIÂNGULO ESTRELA GENERALIZADA

1. Derivação da Relação Triângulo Estrela Generalizada⁽⁹⁾

Queremos mostrar como é derivada a relação (3.5), que as matrizes V e V' , definidas no Capítulo III, por (3.1) e (3.4) de vem satisfazer para comutar. Assim, usando as definições citadas, temos que:

$$V_{\{\sigma, \sigma'\}} = \prod_{j=1}^n \tilde{\omega}(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \sigma'_{j+1}, \sigma'_j) \quad (3.1)$$

$$V'_{\{\sigma, \sigma'\}} = \prod_{j=1}^n \tilde{\omega}'(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \sigma'_{j+1}, \sigma'_j) \quad (3.4)$$

$$\text{com } \sigma_{n+1} = \sigma_1$$

temos que calcular o produto VV' o qual pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} (VV')_{\{\sigma, \sigma'\}} &= \sum_{\tau_1} \dots \sum_{\tau_n} S_1(\tau_1, \tau_2) S_2(\tau_2, \tau_3) \dots S_n(\tau_n, \tau_1) = \\ &= \text{traço } S_1 S_2 \dots S_n \end{aligned} \quad (A.1)$$

onde

$$S_j(\tau_j, \tau_{j+1}) = \tilde{\omega}(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \tau_{j+1}, \tau_j) \tilde{\omega}'(\tau_j, \tau_{j+1}, \sigma'_{j+1}, \sigma'_j) \quad (A.2)$$

Analogamente para $V'V$, temos que:

$$(V'V)_{\{\sigma, \sigma'\}} = \text{traço } S'_1 S'_2 \dots S'_n \quad (\text{A.3})$$

onde a diferença entre S' e S é que trocamos ω por ω' na expressão (A.2).

Como queremos que as matrizes V e V' comutem, os traços dados por (A.1) e (A.3) devem ser iguais, portanto, para que tal ocorra, deve existir uma transformação para os S como a abaixo:

$$S_j = M_j S'_j M_{j+1}^{-1} \quad (\text{A.4})$$

(teremos os traços iguais, desde que substituindo esta expressão em (A.1) os M se cancelem todo - usando condição de contorno periódica)

Podemos reescrever esta condição como:

$$S_j M_{j+1} = M_j S'_j \quad (\text{A.5})$$

Agora, como a matriz S_j depende de j via $\sigma_j, \sigma'_j, \sigma_{j+1}, \sigma'_{j+1}$, a matriz M deve depender apenas de σ_j e σ'_j . Portanto, podemos escrever seu elementos de matriz como:

$$(M_j)_{\tau, \tau'} = \tilde{\omega}''(\tau', \sigma'_j, \tau, \sigma_j) \quad (\text{A.6})$$

onde $\tilde{\omega}''$ é um função à nossa disposição.

Assim, usando (A.6) e (A.2), podemos reescrever a condição (A.5) como:

$$\sum_{\tau''} \tilde{\omega}''(\sigma_j, \sigma'_{j+1}, \tau'', \tau) \tilde{\omega}'(\tau, \tau'', \sigma'_{j+1}, \sigma'_j) \tilde{\omega}''(\tau', \sigma'_{j+1}, \tau'', \sigma_{j+1})$$

$$= \sum_{\tau''} \tilde{\omega}''(\tau'', \sigma_j', \tau, \sigma_j) \tilde{\omega}'(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \tau', \tau'') \tilde{\omega}(\tau'', \tau', \sigma_{j+1}', \sigma_j') \quad (\text{A.7})$$

De maneira que, para que as matrizes V e V' comutem, deve-se achar $\tilde{\omega}''$ tal que esta condição, (A.7), seja satisfeita para todos os valores de $\tau, \sigma_j, \sigma_{j+1}, \tau', \sigma_{j+1}', \sigma_j'$.

Esta condição é a que é conhecida por Relação Triângulo Estrela Generalizada e se quisermos identificá-la como a escrita no Capítulo III, dada por (3.5) devemos chamar $\tau, \sigma_j, \sigma_{j+1}, \tau', \sigma_{j+1}'$, τ'' de $\mu_3, \sigma_1, \mu_2, \sigma_3, \mu_1, \sigma_2$ e μ ou τ respectivamente e também usar que:

$$\omega_r'(a, b, c, d) = \omega'(b, c, d, a)$$

2. Prova de que satisfeita a Equação dos Triângulos (3.13), também teremos satisfeita a Relação (3.11), com Todos os vértices.

A relação (3.11) é dada por:

$$S_{\lambda_1 \alpha_1}^{\lambda_2 \alpha_1''}(u) S_{\lambda_2 \alpha_2}^{\lambda_3 \alpha_2''}(u) \dots S_{\lambda_n \alpha_n}^{\lambda_n \alpha_n''}(u) S_{\lambda_1 \gamma_1}^{\lambda_1' \gamma_1''}(u, v) S_{\alpha_n' \gamma_1}^{\alpha_n' \gamma_n}(v) \dots S_{\alpha_2' \gamma_2}^{\alpha_2' \gamma_3} S_{\alpha_1' \gamma_2}^{\alpha_1' \gamma_1}(v) =$$

$$= S_{\lambda_1 \gamma_1}^{\lambda_1'' \gamma_1''}(u,v) S_{\alpha_1 \gamma_1}^{\alpha_1'' \gamma_1''}(v) S_{\alpha_2 \gamma_2}^{\alpha_2'' \gamma_2''}(v) \dots S_{\alpha_n \gamma_n}^{\alpha_n'' \gamma_n''}(v) \cdot S_{\lambda_1 \alpha_1}^{\lambda_1' \alpha_1'}(u) S_{\lambda_1 \alpha_2}^{\lambda_2' \alpha_2'}(u) \dots S_{\lambda_n \alpha_n}^{\lambda_n' \alpha_n'}(u) \tag{3.12}$$

ou melhor, apenas graficamente da seguinte forma:

Figura A.1 - Relação 3.12 representada graficamente onde os $\square$ representam $S(v)$, os $\bullet$ representam $S(u)$ e o $\triangle$ representa $S(u,v)$.

E a Equação dos Triângulos

$$S_{\lambda_1 \alpha_1}^{\lambda_1'' \alpha_1''}(u) S_{\lambda_1 \gamma_1}^{\lambda_1' \gamma_1'}(u,v) S_{\alpha_1 \gamma_1}^{\alpha_1' \gamma_1'}(v) = S_{\alpha_1 \gamma_1}^{\alpha_1'' \gamma_1''}(v) S_{\lambda_1 \gamma_1}^{\lambda_1' \gamma_1'}(u,v) S_{\lambda_1 \alpha_1}^{\lambda_1' \alpha_1'}(u) \tag{3.13}$$

ou da mesma forma que a equação anterior, graficamente temos:

Figura A.2 - Representação gráfica da Equação dos Triângulos (3.13) $\square$ - $S(v)$, $\bullet$ - $S(u)$ e $\triangle$ - $S(u,v)$.

Assim, usando esta igualdade, representada graficamente na figura A.2, temos que o lado esquerdo da equação gráfica da figura A.1 torna-se:

E assim sucessivamente usando a figura A.2, mostramos graficamente que:

ou seja, uma vez que a equação (3.13), figura A.2, é satisfeita, au
tomaticamente temos a equação (3.12), figura A.1, satisfeita.

APÊNDICE B

APÊNDICE B

PROPRIEDADES DAS FUNÇÕES θ_s

Definição:

$$\theta_1(u) = i \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m q^{(m-1/2)^2} e^{i\pi(2m-1)u} = -\theta_{1,1}(u) = H(\hat{u}) \quad (\text{B.1})$$

$$\theta_2(u) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} q^{(m-1/2)^2} e^{i\pi(2m-1)u} = \theta_{0,1}(u) = H_1(\hat{u}) \quad (\text{B.2})$$

$$\theta_3(u) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} q^{m^2} e^{i\pi u m^2} = \theta_{0,0}(u) = \theta_1(\hat{u}) \quad (\text{B.3})$$

$$\theta_4(u) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (-1)^m q^{m^2} e^{i\pi u m^2} = \theta_{1,0}(u) = \theta(\hat{u}) \quad (\text{B.4})$$

onde

$$\hat{u} = 2 k u \quad (\text{B.5a})$$

e

$$q = e^{i\pi\tau} \quad \tau = i \frac{K'}{K}, \quad K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1-k^2 \sin^2 \theta}} \quad (\text{B.5b})$$

onde K é conhecida como integral elíptica e k é o seu módulo.

Definição em termos de seno e cossenos:

$$\theta_1(u) = 2 q^{1/4} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m q^{(m+1)m} \sin [(2m+1)\pi u] \quad (\text{B.6})$$

$$\theta_2(u) = 2 q^{1/4} \sum_{m=0}^{\infty} q^{(m+1)m} \cos [(2m+1)\pi u] \quad (\text{B.7})$$

$$\theta_3(u) = 1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} q^{m^2} \cos(2m\pi u), \quad (\text{B.8})$$

$$\theta_4(u) = 1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} q^{m^2} \cos(2m\pi u) (-1)^m \quad (\text{B.9})$$

Fórmula de Poisson

$$\theta_1\left(\frac{u}{\tau}, -\frac{1}{\tau}\right) = -i (-i\tau)^{1/2} \exp(i\pi u^2/\tau) \theta_1(u; \tau) \quad (\text{B.10})$$

$$\theta_2\left(\frac{u}{\tau}, -1/\tau\right) = (-i\tau)^{1/2} \exp(i\pi u^2/\tau) \theta_4(u, \tau) \quad (\text{B.11})$$

$$\theta_3(u/\tau, -1/\tau) = (-i\tau)^{1/2} \exp(i\pi u^2/\tau) \theta_3(u, \tau) \quad (\text{B.12})$$

$$\theta_4\left(\frac{u}{\tau}, -\frac{1}{\tau}\right) = (-i\tau)^{1/2} \exp(i\pi u^2/\tau) \theta_2(u, \tau) \quad (\text{B.13})$$

Definição de seno, cosseno e delta de Jacobi:

$$\operatorname{dn} u = \sqrt{k'}, \quad \frac{\theta_1(u)}{\theta(u)} \quad (\text{B.14})$$

$$\operatorname{cn} u = \frac{\sqrt{k'}}{k}, \quad \frac{H_1(u)}{\theta(u)} \quad (\text{B.15})$$

$$\operatorname{sn} u = \frac{1}{\sqrt{k}}, \quad \frac{H(u)}{\theta(u)} \quad (\text{B.16})$$

Estas propriedades foram tiradas do livro:

Higher Transcendental Functions, vol.2

de A. Ederlyi

F.Okerhettinger

W. Magnus

F.G.Tricomi

TABELA B.1						
$\theta(u)$	$\theta(u+1)$	$\theta(u+\tau)$	$\theta(u+1+\tau)$	$\theta(u+1/2)$	$\theta(u+1/2)$	$\theta(u+1/2+\tau/2)$
$\theta_1(u)$	$-\theta_1(u)$	$-A(u)\theta_1(u)$	$A(u)\theta_1(u)$	$\theta_2(u)$	$iB(u)\theta_4(u)$	$B(u)\theta_3(u)$
$\theta_2(u)$	$-\theta_2(u)$	$A(u)\theta_2(u)$	$-A(u)\theta_2(u)$	$-\theta_1(u)$	$B(u)\theta_3(u)$	$-iB(u)\theta_4(u)$
$\theta_3(u)$	$+\theta_3(u)$	$A(u)\theta_3(u)$	$A(u)\theta_3(u)$	$\theta_4(u)$	$B(u)\theta_2(u)$	$iB(u)\theta_1(u)$
$\theta_4(u)$	$\theta_4(u)$	$-A(u)\theta_4(u)$	$-A(u)\theta_4(u)$	$\theta_3(u)$	$iB(u)\theta_1(u)$	$B(u)\theta_2(u)$

$$A(u) = e^{-i\pi(2u+\tau)}$$

$$B(u) = e^{-i\pi(u+\tau/4)}$$

APÊNDICE C

APÊNDICE C

IDENTIDADES TRIGONOMÉTRICAS

$$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y \quad (\text{C.1a})$$

$$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y \quad (\text{C.1b})$$

$$\sin x \sin y = \frac{1}{2} [\cos(x-y) - \cos(x+y)] \quad (\text{C.2a})$$

$$\cos x \cos y = \frac{1}{2} [\cos(x-y) + \cos(x+y)] \quad (\text{C.2b})$$

$$\sin x \cos y = \frac{1}{2} [\sin(x-y) + \sin(x+y)] \quad (\text{C.2c})$$

$$\sin(x \pm 2\pi/3) = -\sin(x \mp \pi/3) \quad (\text{C.3a})$$

$$\cos(x \pm 2\pi/3) = -\cos(x \mp \pi/3) \quad (\text{C.3b})$$

$$\sin(x + \pi/3) + \sin(x - \pi/3) = \sin x \quad (\text{C.3c})$$

$$-4\sin\frac{x}{3} \sin(\frac{x}{3} + \pi/3) \sin(\frac{x}{3} - \pi/3) = \sin x \quad (\text{C.4a})$$

$$\cos x + 2\cos\frac{x}{3} = -4\cos\frac{x}{3} \sin(\frac{x}{3} + \frac{\pi}{3}) \sin(\frac{x}{3} - \frac{\pi}{3}) \quad (\text{C.4b})$$

$$\cos x - 2\cos(\frac{x}{3} - \frac{\pi}{3}) = -4\cos(\frac{x}{3} - \frac{\pi}{3}) \sin\frac{x}{3} \sin(\frac{x}{3} + \frac{\pi}{3}) \quad (\text{C.4c})$$

$$\cos x - 2\cos(\frac{x}{3} + \frac{\pi}{3}) = -4\cos(\frac{x}{3} + \frac{\pi}{3}) \sin\frac{x}{3} \sin(\frac{x}{3} - \frac{\pi}{3}) \quad (\text{C.4d})$$

onde as propriedades D_4 podem ser provadas usando-se basicamente D_2 e D_3

Outras identidades:

$$\sum_{\alpha_2} \frac{1}{\sin^2(\eta + \frac{\alpha_2 \pi}{3})} \stackrel{D.4a}{=} \frac{16}{\sin^2 3\eta} [\sin^2(\eta + \pi/3) \sin^2(\eta - \pi/3) +$$

$$+ \sin^2 \eta \sin^2(\eta - \pi/3) + \sin^2 \eta \sin^2(\eta + \pi/3)] =$$

$$= \frac{16}{\sin^2 3\eta} \{ \sin^2 \eta [\sin^2(\eta - \pi/3) + \sin^2(\eta + \pi/3)] +$$

$$+ \sin^2(\eta + \pi/3) \sin^2(\eta - \pi/3) \} =$$

$$\stackrel{\substack{\cos \frac{\pi}{3} = 1/2 \\ \sin \frac{\pi}{3} = \sqrt{3}/2 \\ \rho \downarrow}}{=} \frac{16}{\sin^2 3\eta} \{ 2 \sin^2 \eta (-\frac{1}{4} \sin^2 \eta + \frac{3}{4} \cos^2 \eta) +$$

$$+ (\sin^2 \eta - \frac{3}{4})^2 \} =$$

$$= \frac{16}{\sin^2 3\eta} \{ \frac{1}{2} \sin^4 \eta + \frac{3}{2} \sin^2 \eta - \frac{3}{4} \sin^4 \eta +$$

$$+ \sin^4 \eta - \frac{3}{2} \sin^2 \eta + \frac{9}{16} \} =$$

$$= \frac{9}{\sin^2 3\eta} \quad (C.5)$$

$$\sum_{\alpha_2} \frac{\sin(x + \eta + \alpha_2 \pi/3)}{\sin(\eta + \alpha_2 \pi/3)} \stackrel{D.4a}{=} - \frac{4}{\sin 3\eta} \{ \sin(x + \eta) [\sin(\eta + \pi/3) \cdot$$

$$\cdot \sin(\eta - \pi/3)] + \sin(x + \eta + \pi/3) [\sin \eta \sin(\eta - \pi/3)] +$$

$$+\sin(x+\eta-\pi/3) [\sin\eta\sin(\eta+\pi/3)] \} =$$

$$\begin{aligned} \text{D.2 D3b} &= \frac{1}{\sin 3\eta} \left[\cancel{-\sin(x+\eta)} \cancel{-\sin(x-\eta)} -\sin(x+3\eta) + \right. \\ &\quad \left. +\cancel{\sin(x+\eta+\pi/3)} +\cancel{\sin(x-\eta-\pi/3)} -\sin(x+3\eta) + \right. \\ &\quad \left. +\cancel{\sin(x+\eta-\pi/3)} +\cancel{\sin(x-\eta+\pi/3)} -\sin(x+3\eta) \right] = \end{aligned}$$

$$\text{D}_c^3 = \frac{3\sin(x+3\eta)}{\sin 3\eta} \quad (\text{C.6})$$

$$e^{\frac{1}{3}i\xi} \sin(\xi+u+3\eta) + e^{-\frac{1}{3}i\xi} \sin(\xi-u+3\eta) =$$

$$\text{D.1} = 2 \cos \frac{\xi}{3} \sin(\xi+3\eta) \cos u + 2i \sin \frac{\xi}{3} \cos(\xi+3\eta) \sin u =$$

$$\begin{aligned} \text{D.2} &= \cos u \left[\sin\left(\frac{2}{3}\xi+3\eta\right) + \sin\left(\frac{4}{3}\xi+3\eta\right) \right] + \\ &+ i \sin u \left[-\sin\left(\frac{2}{3}\xi+3\eta\right) + \sin\left(\frac{4}{3}\xi+3\eta\right) \right] = \\ &= e^{-iu} \sin\left(\frac{2}{3}\xi+3\eta\right) + e^{iu} \sin\left(\frac{4}{3}\xi+3\eta\right) \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

$$\sum_{\alpha_2} \frac{\sin(\xi+u+\eta+\alpha_2\pi/3) \sin(\xi-u+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} =$$

p.5

$$\text{D.1} = \sum_{\alpha_2} \frac{\sin^2(\xi+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} - \sin^2 u \sum_{\alpha_2} \frac{1}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} =$$

$$\text{D.5} = -\frac{9 \sin^2 u}{\sin^2 3\eta} + \sum_{\alpha_2} \left[\frac{\sin(\xi+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin(\eta+\alpha_2\pi/3)} \right]^2 =$$

$$= -\frac{9 \sin^2 u}{\sin^2 3\eta} + \left[\sum_{\alpha_2} \frac{\sin(\xi+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin(\eta+\alpha_2\pi/3)} \right]^2 -$$

↖ p. 6

$$- 2 \frac{\sin(\xi+\eta)\sin(\xi+\eta+\pi/3)}{\sin\eta\sin(\eta+\pi/3)} -$$

$$- 2 \frac{\sin(\xi+\eta)\sin(\xi+\eta-\pi/3)}{\sin\eta\sin(\eta-\pi/3)} -$$

$$- 2 \frac{\sin(\xi+\eta-\pi/3)\sin(\xi+\eta+\pi/3)}{\sin(\eta-\pi/3)\sin(\eta+\pi/3)} =$$

$$\stackrel{D.6, D.4_a}{=} -9 \frac{\sin^2 u}{\sin^2 3\eta} + \frac{9\sin^2(\xi+\eta)}{\sin^2 3\eta} +$$

↖ p. 2

$$+ \frac{8}{\sin 3\eta} \{ \sin(\eta-\pi/3) [\sin(\xi+\eta)\sin(\xi+\eta+\pi/3)] +$$

$$+ \sin(\eta+\pi/3) [\sin(\xi+\eta)\sin(\xi+\eta-\pi/3)] +$$

$$+ \sin\eta [\sin(\xi+\eta-\pi/3)\sin(\xi+\eta+\pi/3)] \} =$$

$$\stackrel{D.2}{=} -\frac{9 \sin^2 u}{\sin^2 3\eta} + \frac{9 \sin^2(\xi+\eta)}{\sin^2 3\eta} + \frac{2}{\sin 3\eta} \cdot [$$

$$\cdot [\sin(\eta-\pi/3) + \sin(2\xi-\eta+\pi/3) - \sin(2\xi+3\eta) +$$

$$+ \sin(\eta+\pi/3) + \sin(2\xi-\eta-\pi/3) - \sin(2\xi+3\eta) -$$

$$- \sin\eta - \sin(2\xi-\eta) - \sin(2\xi+3\eta)] =$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{9\sin^2 u}{\sin^2 3\eta} + 9\frac{\sin^2(\xi+\eta)}{\sin^2 3\eta} - 6\frac{\sin(2\xi+3\eta)}{\sin^2 3\eta} \sin 3\eta = \\
 &= \frac{1}{\sin^2 3\eta} [-9\sin^2 u + 3\sin^2(\xi+\eta) - 3\cos 2\xi+3] \quad (C.8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\text{D.1} \\
 &\text{D.2} \quad e \sin^2 x = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2x
 \end{aligned}$$

APÊNDICE D

APÊNDICE D

Neste Apêndice vamos mostrar em detalhe, alguns cálculos de resultados obtidos no Capítulo IV:

1. Cálculo de um dos Pesos Estatísticos cujos resultados são os listados em (4.45).

2. Cálculo de $\rho, \tilde{\rho}$ e ξ que aparecem nas equações funcionais para a função de partição do modelo de Belavin e cujos resultados são dados por (4.50), (4.51) e (4.52) respectivamente.

3. Finalmente o cálculo de um dos coeficientes do Hamiltoniano associado ao modelo de Belavin, coeficientes cujos resultados listamos em (4.100).

Sendo que todos esses cálculos são feitos no limite $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow 10$) caso $N=3$.

1. Peso Estatístico $N=3, q \rightarrow 1$

Vamos a título de exemplo calcular o Peso Estatístico $\tilde{\omega}(1,1)$ que corresponde dos vértices S_{21}^{00} , S_{02}^{11} e S_{10}^{22} . Os demais pesos são calculados semelhantes a este que apresentaremos agora, dispensando portanto, que também os façamos em detalhe. Assim, usando (4.38):

$$\begin{aligned}
 S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2} &= \tilde{\omega}(j_2 - i_1, j_1 - i_1) = \tilde{\omega}(\alpha, \beta) = \\
 &= \sum_{v=0}^{N-1} z^{-v\alpha} \omega_{v\beta}(u)
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

$$\text{com } i_1 + i_2 - j_1 + j_2 \text{ e } z = e^{2\pi i/N}$$

temos que

$$\begin{aligned}
 s_{21}^{00} = s_{02}^{11} = s_{10}^{22} = \tilde{\omega}(1,1) &= \sum_{v=0}^2 z^{-v} \omega_{v,1}(u) = \\
 &= \omega_{0,1}(u) + z^{-1} \omega_{1,1}(u) + \omega_{2,1}(u) \quad (D.1)
 \end{aligned}$$

onde $z = e^{2\pi i/3}$

Usando o resultado de $\omega_{\alpha\beta}(u)$ ($q=1$) dado por (4.35), para $N=3$ e algumas identidades trigonométricas de Apêndice C, (D.1) torna-se:

$$\begin{aligned}
 \tilde{\omega}_{1,1} &= \frac{\sin(u+\eta+\pi/3)}{\sin(\eta+\pi/3)} + z^{-1} e^{\frac{iu}{3}} + z e^{-\frac{iu}{3}} = \\
 &= \frac{1}{\sin(\eta+\pi/3)} \left[\sin(u+\eta+\pi/3) + 2 \cos\left(\frac{u}{3} - \frac{2\pi}{3}\right) \sin(\eta+\pi/3) \right] = \\
 (C.1) \quad (C.2) \quad &= \frac{1}{\sin(\eta+\pi/3)} \{ \sin u \cos(\eta+\pi/3) + [\cos u - 2 \cos(u/3 + \pi/3)] \cdot \\
 &\quad \cdot \sin(\eta+\pi/3) \} = \\
 (C.4a) \quad (C.4c) \quad &= - \frac{4}{\sin(\eta+\pi/3)} \{ \sin u/3 \sin(u/3 - \pi/3) [\sin(u/3 + \pi/3) \cos(\eta+\pi/3) + \\
 &\quad + \cos(u/3 + \pi/3) \sin(\eta+\pi/3)] \}
 \end{aligned}$$

E finalmente usando na expressão acima (C.1) e (C.3)

$$s_{21}^{00} = s_{02}^{11} = s_{10}^{22} = \tilde{\omega}(1,1) = 4 \frac{\sin(u/3 + \eta - \pi/3) \sin u/3 \sin(u/3 - \pi/3)}{\sin(\eta + \pi/3)} \quad (D.2)$$

2. Cálculo de ρ , $\tilde{\rho}$, ξ , $N=3$ ($q \rightarrow 1, \tau \rightarrow i0$)

2a. Cálculo de ρ .

De (4.47) temos que:

$$\rho(u) = S_{i_1 i_2}^{k_1 k_2}(u) S_{k_2 k_1}^{i_2 i_1}(-u) \quad (4.47)$$

Sendo que k_i e k_2 estão contraídos.

Usando a forma (4.1a) para os $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$, (4.47) torna-se:

$$\begin{aligned} \rho(u) = & k_1^{\Sigma} k_2 \left[\alpha_1^{\Sigma}, \alpha_2 \omega_{\alpha_1, \alpha_2}^{(u)} z^{-\alpha_1(i_1 - k_2)} \delta_{i_1 + \alpha_2, k_1} \right. \\ & \left. \delta_{k_2 + \alpha_2, i_2} \right] \cdot \left[\beta_1^{\Sigma} \beta_2 \omega_{\beta_1, \beta_2}^{(-u)} z^{-\beta_1(k_2 - i_1)} \right. \\ & \left. \delta_{k_2 + \beta_2, i_2} \delta_{i_1 + \beta_2, k_1} \right] \end{aligned}$$

Assim efetuando o somatório sobre k_1, k_2 e β_2 , nesta ordem, temos que:

$$\rho(u) = \sum_{\substack{\alpha_1, \alpha_2 \\ \beta_1}} \omega_{\alpha_1, \alpha_2}^{(u)} \omega_{\beta_1, \alpha_2}^{(-u)} z^{-(\alpha_1 - \beta_1)(k - \alpha_2)} \quad (D.3)$$

$$\text{com } k = i_2 - i_1$$

Abrindo o somatório acima, podemos agrupar os termos da seguinte forma:

$$\rho(u) = \sum_{\alpha_2} \left[\omega_{0\alpha_2}^{(u)} \omega_{0\alpha_2}^{(-u)} + \omega_{1\alpha_2}^{(u)} \omega_{1\alpha_2}^{(-u)} + \omega_{2\alpha_2}^{(u)} \omega_{2\alpha_2}^{(-u)} \right] +$$

$$\begin{aligned}
& + Z^{-(k+\alpha_2)} \left[\underset{(1)}{\omega_{0\alpha_2}}(u) \underset{(1)}{\omega_{1\alpha_2}}(-u) + \underset{(1)}{\omega_{1\alpha_2}}(u) \underset{(1)}{\omega_{2\alpha_2}}(-u) + \underset{(1)}{\omega_{2\alpha_2}}(u) \underset{(1)}{\omega_{0\alpha_2}}(-u) \right] + \\
& + Z^{(k+\alpha_2)} \left[\underset{(1)}{\omega_{0\alpha_2}}(u) \underset{(1)}{\omega_{2\alpha_2}}(-u) + \underset{(1)}{\omega_{1\alpha_2}}(u) \underset{(1)}{\omega_{0\alpha_2}}(-u) + \underset{(1)}{\omega_{2\alpha_2}}(u) \underset{(1)}{\omega_{1\alpha_2}}(-u) \right]
\end{aligned} \tag{D.4}$$

onde agora devemos substituir, nesta expressão (D.4), os $\omega_{\alpha, \beta}$, dados por (4.35), $(q+1)$, para $N=3$, que são:

$$\underset{(1)}{\omega_{0, \alpha_2}} = \frac{\sin(u+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin(\eta+\alpha_2\pi/3)} \tag{D.5a}$$

$$\underset{(1)}{\omega_{1\alpha_2}} = e^{(1/3)iu} \tag{D.5b}$$

$$\underset{(1)}{\omega_{2\alpha_2}} = e^{-(1/3)iu} \tag{D.5c}$$

e examinar em primeiro lugar o termo da expressão (D.4) que é multiplicado por Z^{-k} , pois espera-se que este termo seja nulo para que $\rho(u)$ não dependa de k ,

Usando (D.5), temos que este termo (D.4) é dado por:

$$\begin{aligned}
& e^{-iu/3} \sum_{\alpha_2=0}^2 Z^{-\alpha_2} \left[\frac{\sin(u+\eta+\alpha_2\pi/3) + \sin(-u+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin(\eta+\alpha_2\pi/3)} \right] + \\
& + \sum_{\alpha_2} Z^{-\alpha_2} = 0
\end{aligned}$$

$$\text{(C.2)} \quad e^{-iu/3} \sum_{\alpha_2} Z^{-\alpha_2} \frac{\sin(\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin(\eta+\alpha_2\pi/3)} \cos u = 0$$

(lembrando que $1 + Z + Z^{-1} = 0$ para $Z = e^{2\pi i/3}$)

Pelo mesmo motivo o termo que possui Z^k também é

nulo. Resta-nos então calcular o primeiro termo de (D.4). Assim:

$$\begin{aligned}
 \rho(u) &= \sum_{\alpha_2=0}^2 \left[\frac{\sin(u+\eta+\alpha_2\pi/3)\sin(-u+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} \right] + 6 = \\
 (C.1) \quad &= \sum_{\alpha_2=0}^2 \left[\frac{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} - \frac{\sin^2 u}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} \right] + 6 = \\
 &= 9 - \sin^2 u \sum_{\alpha_2=0}^2 \frac{1}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} = \\
 (C.5) \quad &= 9 - 9 \frac{\sin^2 u}{\sin^2 3\eta}
 \end{aligned}$$

ou então, escrevendo sob forma de produto, temos que

$$\rho(u) = 9 \frac{\sin(3\eta+u)\sin(3\eta-u)}{\sin^2 3\eta} \quad (D.6)$$

que é o resultado (4.50).

2b. Cálculo de $\tilde{\rho}(u)$ e ξ .

Antes de calcularmos $\tilde{\rho}(u)$, precisamos saber qual é a equação que ξ dado formalmente por (4.48) obedece. Assim sendo:

$$\sum_k S_{i_1 k}^{k i_2} (2\xi) = 0 \quad (4.48)$$

Substituindo $S_{i_2 i_2}^{j_1 j_2}$ por (4.1a), (4.48) torna-se:

$$\sum_k \sum_{\alpha_1 \alpha_2} \omega_{\alpha_1 \alpha_2} (2\xi) z^{-\alpha_1(i_2 - i_1)} \delta_{i_1 + \alpha_2, k} \delta_{i_1 + \alpha_2, k} = 0$$

ou ainda, somando sobre k :

$$\sum_{\alpha_1, \alpha_2} \omega_{\alpha_1, \alpha_2}^{(1)}(2\xi) = 0 \quad (D.7)$$

e somando sobre α_1 , obtemos que:

$$\sum_{\alpha_2} \omega_{0\alpha_2}^{(2\xi)} + \omega_{1\alpha_2}^{(2\xi)} + \omega_{2\alpha_2}^{(2\xi)} = 0$$

Agora fazendo uso dos limites de $\omega_{\alpha, \beta}$ dados por (D.5) (para $N=3$, $q \rightarrow 1$) esta expressão torna-se:

$$\sum_{\alpha_2} \left[\frac{\sin(2\xi + 3\eta + \alpha_2 \pi/3)}{\sin(\eta + \alpha_2 \pi/3)} \right] + 3 e^{2i\xi/3} + 3 e^{-2i\xi/3} = 0$$

ou ainda usando (C.6) para efetuar o somatório sobre α_2 , temos que a condição para ξ torna-se

$$3 \frac{\sin(2\xi + 3\eta)}{\sin 3\eta} + 3 e^{2i\xi/3} + 3 e^{-2i\xi/3} = 0 \quad (D.8a)$$

ou rearranjando os termos:

$$3 e^{-2i\xi} \left[e^{2i\xi} \frac{\sin(2\xi + 3\eta)}{\sin 3\eta} + e^{8i\xi/3} + e^{4i\xi/3} \right] = 0 \quad (D.8b)$$

Sendo que os valores de ξ que satisfazem esta equação são:

$$2\xi = -9\eta + 3k\pi, \text{ com } k \text{ inteiro} \quad (D.9)$$

que é o resultado que escrevemos em (4.52).

Em posse dos valores de ξ podemos agora calcular $\tilde{\rho}(u)$ dada por (4.49) que é:

$$\tilde{\rho}(u) = S_{i_1 k_2}^{k_1 i_2}(\xi+u) S_{i_1 k_1}^{k_2 i_1}(\xi-u) \quad (4.49)$$

E usando (4.16) efetuando os somatórios sobre os k_s e também mais um outro,

$$\tilde{\rho}(u) = \sum_{\alpha_1 \beta_1} \omega_{\alpha_1 \alpha_2}(\xi+u) \omega_{\beta_1 \alpha_2}(\xi-u) Z^{k(\alpha_1 - \beta_1)}$$

onde $k = i_1 - i_2$

Somando sobre α_1 e β_1 e reagrupando os termos da mesma forma que foi feito para $\rho(u)$ temos:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(u) = & \sum_{\alpha_2} [\omega_{0\alpha_2}(\xi+u) \omega_{0\alpha_2}(\xi-u) + \omega_{1\alpha_2}(\xi+u) \omega_{1\alpha_2}(\xi-u) + \\ & + \omega_{2\alpha_2}(\xi+u) \omega_{2\alpha_2}(\xi-u)] + Z^{-k} [\omega_{0\alpha_2}(\xi+u) \omega_{1\alpha_2}(\xi-u) + \\ & + \omega_{1\alpha_2}(\xi+u) \omega_{2\alpha_2}(\xi-u) + \omega_{2\alpha_2}(\xi+u) \omega_{0\alpha_2}(\xi-u)] + \\ & + Z^k [\omega_{0\alpha_2}(\xi+u) \omega_{2\alpha_2}(\xi-u) + \omega_{1\alpha_2}(\xi+u) \omega_{0\alpha_2}(\xi-u) + \\ & + \omega_{2\alpha_2}(\xi+u) \omega_{1\alpha_2}(\xi-u)] \end{aligned} \quad (D.10)$$

e agora usando (D.5) para os $\omega_{\alpha,\beta}(u)$ (limite $q \rightarrow 1$, $N=3$), examinaremos primeiro o termo multiplicado por Z^{-k} na expressão (D.10) acima; que é dado por:

$$e^{-\frac{1}{3}i(\xi-u)} \sum_{\alpha_2} \frac{\sin(\xi+u+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin(\eta+\alpha_2\pi/3)} +$$

$$+ e^{-\frac{1}{3}i(\xi-u)} \sum_{\alpha_2} \frac{\sin(\xi-u+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin(\eta+\alpha_2\pi/3)} + 3 e^{2iu/3} \quad (D.11)$$

Este somatório que aparece em (D.11) é do mesmo tipo que fizemos para encontrar ξ e é dado por (C.6) no Apêndice C. De maneira que (D.11) torna-se:

$$3 e^{-1/3} \left[e^{\frac{1}{3}i\xi} \frac{\sin(\xi+u+3\eta)}{\sin 3\eta} + e^{-\frac{1}{3}i\xi} \frac{\sin(\xi-u+3\eta)}{\sin 3\eta} + 3 e^{2iu/3} \right] \quad (D.12)$$

Como queremos deixar (D.12) sob uma forma mais fácil de se mostrar que é nula, usaremos a identidade de (C.7) para reescreve-la, que é

$$\begin{aligned} e^{\frac{1}{3}i\xi} \frac{1}{\sin(\xi+u+3\eta)} + e^{-\frac{1}{3}i\xi} \frac{1}{\sin(\xi-u+3\eta)} &= \\ &= \sin\left(\frac{2\xi}{3}+3\eta\right) e^{-iu} + \sin\left(\frac{u\xi}{3} + 3\eta\right) e^{iu} \end{aligned} \quad (C.7)$$

Assim usando esta identidade em (D.12) e reagrupando os termos de forma conveniente obtemos finalmente que o termo em (D.10) que é multiplicado por Z^{-k} é dado por:

$$3 \frac{e^{-\frac{1}{3}iu}}{\sin 3\eta} \left\{ \left[\sin\left(-\frac{4}{3}\xi + 3\eta\right) + \sin 3\eta \right] e^{iu} + \sin\left(-\frac{2}{3}\xi + 3\eta\right) e^{-iu} \right\} \quad (D.13)$$

E agora este termo está sob uma forma fácil de mostrar que ao substituirmos os ξ usando (D.9) que é $2\xi = -9\eta + 2\pi k$,

(D.13) evidentemente se anula.

É o mesmo tipo de cálculo que precisamos fazer para o termo multiplicando por z^k em (D.10), para mostrar que também esse é nulo. Assim $\tilde{\rho}(u)$ fica sendo dado apenas pelo primeiro termo de (D.10). Substituindo os $\omega_{\alpha, \beta}$, pelos resultados dados por (D.5), temos que, para $N=3$, $q=1$:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(u) &= e^{-2i\xi} \left\{ \sum_{\alpha_2} \frac{\sin(\xi+u+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} \frac{\sin(\xi-u+\eta+\alpha_2\pi/3)}{\sin^2(\eta+\alpha_2\pi/3)} e^{2i\xi} + \right. \\ &\quad \left. + 3e^{8i\xi/3} + 3e^{4i\xi/3} \right\} = \\ (C.8) \quad &3e^{-2i\xi} \left\{ \frac{e^{2i\xi}}{\sin^2 3\eta} [\sin^2(\xi+3\eta) - \cos 2\xi - 3\sin^2 u + 1] + \right. \\ &\quad \left. + e^{4i\xi/3} + e^{8i\xi/3} \right\} \end{aligned} \quad (D.14)$$

Agora, fazendo uso da equação para ξ dada por (D.8b), temos que:

$$e^{\frac{4i\xi}{3}} + e^{\frac{8i\xi}{3}} = -e^{2i\xi} \frac{\sin(2\xi + 3\eta)}{\sin 3\eta} \quad (D.15)$$

Substituindo este resultado em (D.14) ficamos com:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(u) &= \frac{3}{\sin^2 3\eta} [\sin^2(\xi+3\eta) - \cos 2\xi - 3\sin^2 u + 1 \\ &\quad - \sin(2\xi+3\eta)\sin 3\eta] = \\ &= \frac{3}{\sin^2 3\eta} \left[1/2 - \frac{1}{2} \cos 2(\xi+\eta) \cos 2\xi - 3\sin^2 u + \right. \\ &\quad \left. + 1 - \frac{1}{2} \cos 2\xi + \frac{1}{2} \cos 2(\xi+3\eta) \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{3}{\sin^2 3\eta} \left[\frac{3}{2} - \frac{3}{2} \cos 2\xi - 3\sin^2 u \right] = \\
&= \frac{9}{\sin^2 3\eta} [\sin^2 \xi - \sin^2 u] \quad (D.16)
\end{aligned}$$

e colocando esta expressão (D.16), sob forma de produto obtemos finalmente que:

$$\tilde{\rho}(u) = 9 \frac{\sin(\xi+u)\sin(\xi-u)}{\sin^2 3\eta} \quad (D.17)$$

que é exatamente o resultado (4.51) apresentado no Capítulo IV.

3. Coeficiente do Hamiltoniano, $N=3$, $q \neq 1$

Vamos, também neste caso, apenas calcular um dos coeficientes, sendo que os outros são facilmente encontrados usando o mesmo procedimento. Vamos pois calcular o coeficiente p_{11} .

De (4.89) temos que:

$$p_{\nu\mu} = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=0}^2 \sum_{\beta=0}^2 \omega_{\alpha\beta} z^{\alpha\mu-\beta\nu} \quad (4.89)$$

$$z = e^{2i\pi/3}$$

e usando (4.5) temos que

$$p_{\nu\mu} = \frac{1}{3} \sum_{\beta} z^{-\nu\beta} \tilde{\omega}_{-\mu,\beta}(u) \quad (D.18)$$

e especificamente p_{11} é dado por:

$$\begin{aligned}
p_{11} &= \frac{1}{3} \sum_{\beta} z^{-\beta} \tilde{\omega}_{-1,\beta}(u) = \\
&= \frac{1}{3} [\tilde{\omega}_{2,0} + z^{-1} \tilde{\omega}_{2,1} + z \tilde{\omega}_{2,2}] \quad (D.19)
\end{aligned}$$

Agora relacionando $\tilde{\omega}_{\alpha, \beta}$ com $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}$ através de (4.38) e utilizando os resultados para estes no limite de $q \rightarrow 1$ ($\tau \rightarrow 10$), $N=3$, dado por (4.45) temos que:

$$\begin{aligned}
 p_{11} &= -\frac{4}{3} \sin \frac{u}{3} \sin \left(\frac{u}{3} + \frac{\pi}{3} \right) \cdot \\
 &\quad \cdot \left[\frac{\sin \left(\frac{u}{3} + \eta - \frac{\pi}{3} \right)}{\sin \eta} + Z^{-1} \frac{\sin \left(\frac{u}{3} + \eta \right)}{\sin(\eta + \pi/3)} - \right. \\
 &\quad \left. - Z \frac{\sin(u/3 + \eta + \pi/3)}{\sin(\eta - \pi/3)} \right] \stackrel{(C.4a)}{=} \frac{16}{3} \frac{\sin(u/3 + \pi/3)}{\sin 3\eta} \cdot \\
 &\quad \cdot [\sin(u/3 + \eta - \pi/3) \sin(\eta + \pi/3) \sin(\eta - \pi/3) + \\
 &\quad + Z^{-1} \sin(u/3 + \eta) \sin \eta \sin(\eta - \pi/3) - \\
 &\quad - Z \sin(u/3 + \eta + \pi/3) \sin \eta \sin(\eta + \pi/3)] \\
 &\stackrel{(C.2) (C.3)}{=} \frac{4}{3} \frac{\sin u/3 \sin(u/3 + \pi/3)}{\sin 3\eta} \cdot \\
 &\quad \cdot [-\sin(u/3 + \eta - \pi/3) - \sin(u/3 - \eta - \pi/3) - \sin(u/3 + 3\eta - \pi/3) + \\
 &\quad + Z^{-1} \sin(u/3 + \eta) - Z^{-1} \sin(u/3 - \eta + \pi/3) - Z^{-1} \sin(u/3 + 3\eta - \pi/3) - \\
 &\quad - Z \sin(u/3 + \eta + \pi/3) + Z \sin(u/3 + \eta) - Z \sin(u/3 + 3\eta - \pi/3)] \\
 &\hspace{15em} (D.20)
 \end{aligned}$$

Usando que $1 + Z + Z^{-1} = 0$ para $Z = e^{2\pi i/3}$ e calculando a função $M(u, \eta)$ dada por:

$$M(u, \eta) = -\sin(u/3 + \eta - \pi/3) + Z^{-1} \sin(u/3 + \eta) - Z \sin(u/3 + \eta + \pi/3) =$$

$$\begin{aligned}
 (C.1) \\
 &= -Z^{-1} \left\{ \sin(u/3+\eta) \left(-1 + \frac{Z+Z^{-1}}{2}\right) + \cos(u/3+\eta) \sin\pi/3 (Z^{-1}-Z) \right\} = \\
 &= -\frac{3}{2} i Z^{-1} e^{-i\left(\frac{u}{3}+\eta\right)} \quad (D.21)
 \end{aligned}$$

Assim $p_{1,1}$ dado por (D.20) torna-se:

$$\begin{aligned}
 p_{11} &= \frac{4}{3} \frac{\sin u/3 \sin(u/3+\pi/3)}{\sin 3\eta} [M(u,\eta) - M(-u,\eta)] = \\
 &= -\frac{4 \sin u/3 \sin(u/3+\pi/3) \sin(u/3-\pi/3)}{\sin 3\eta} e^{-i\eta}
 \end{aligned}$$

ou usando (C.4a),

$$p_{11} = \frac{\sin u}{\sin 3\eta} e^{-i\eta} \quad (D.22)$$

que é o resultado escrito em (4.100).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- (1) ISING, E. Z.Physik, 31(1925) 253.
- (2) ONSAGER, L. Phys.Rev., 65(1944) 117.
- (3) YANG, C.N. Phys.Rev., 85(1952) 808.
- (4) KAUFMAN, B. Phys.Rev., 76(1949) 1232.
- (5) SCHULTZ, T.D.; MATTIS, D.C. and LIEB, E.H. Rev.Mod.Phys., 36
(1964) 856.
- (6) VDOVICHENKO, N.V. Soviet Physics JETP, 21(1965) 350.
- (7) BAXTER, R.S. and ENTING, I.G. J.Phys. A: Math.Gen., 11(1978)
2463.
- (8) BAXTER, R.J. Phys.Rev.Lett., 26(1971) 832.
- (9) BAXTER, R.J. Phys.Rev.Lett., 26(1971) 834.
- (10) BAXTER, R.J. Ann.Phys., 70(1972) 193.
- (11) LIEB, E.H. Phys.Rev., 2(1967) 682.
- (12) LIEB, E.H. Phys.Rev.Lett., 18(1967) 1046.
- (13) LIEB, E.H. Phys.Rev.Lett., 19(1967) 108.
- (14) BAXTER, R.J. , Fundamental Problems of Statistical Mechanics (ed. E.G.D.Cohen, North-Holland, Amsterdam, 1980).
- (15) F.A.BUTNAM and T.FORT Jr. J.Phys.Chem., 81(1977) 2164.
- (16) BERKER, A.N. and OSTLUND, S. Phys.Rev.B., 17(1978) 3650.
- (17) POTTS, R.B. Proc.Camb.Phyl.Soc., 48(1952) 106.
- (18) BAXTER, R.J. J.Phys. A: Math. Gen., 9(1980) L 61 - L70.

- (19) BAXTER, R.J. and WU, F.Y. Phys.Rev.Let., 31(1973) 257.
- (20) BELAVIN, A.A. Nuclear Physics B, 180(FS2) (1981) 189.
- (21) PEKROVSKY, S.V. and BASHILOV, A. Yu. Commun.Math.Phys., 84
(1982) 103.
- (22) ZAMOLODCHKOV, A.B. and ZAMOLODCHKOV, A.B. Ann. of Phys.,
120(1979) 253.
- (23) BELAVIN, A.A. and ZAMOLODCHKOV, A.B. Phys.Lett. 116B(1982)
165.
- (24) BELAVIN, R.J. Exactly solved models (Academic Press
Inc.) London 1982.
- (25) WU, F.Y. and WANG, Y.K. Journal of Mathem. Phys., 176(1976)
439.