

1 FASC
206

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

MODELOS DE MECÂNICA ESTATÍSTICA
EXATAMENTE SOLÚVEIS EM DUAS DI-
MENSÕES

ROBERTO NICOLAU ONODY

Tese apresentada ao Instituto de
Física e Química de São Carlos,
da Universidade de São Paulo, pa-
ra a obtenção do título de Dou-
tor em Ciências (Física Básica).

Orientador:

Prof. Dr. Valério Kurak

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

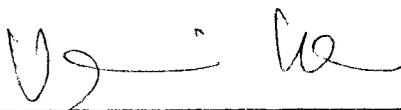
1 9 8 4

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE _____

ROBERTO NICOLAU ONODY

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 11 DE DEZEMBRO DE 1984.

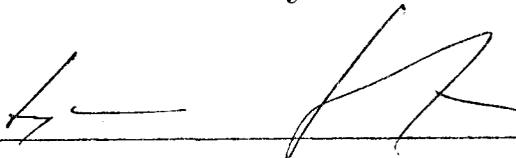
COMISSÃO JULGADORA:



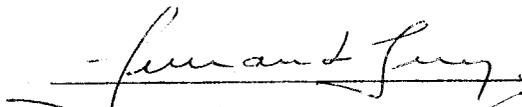
Dr. *Valério Kurak* - Orientador



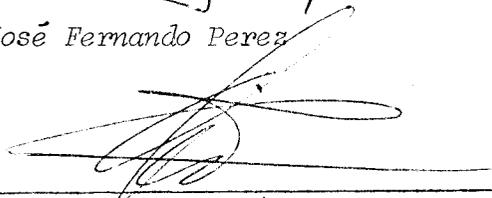
Dr. *José Roberto Drugowich de Felício*



Dr. *Sylvio Goulart Rosa Junior*



Dr. *José Fernando Perez*



Dr. *Coraci Pereira Malta*

À minha mãe e
meus irmãos

À Aldinéia, Carolina, Patrícia
e
Guilherme

AGRADECIMENTOS

Quero agradecer a todos que de maneira direta ou indireta colaboraram na elaboração desse trabalho, e em particular.

À Aldinéia pelo constante apoio nos momentos mais difíceis e a meus filhos pelos momentos mais alegres.

À minha mãe e meus irmãos pela confiança que sempre em mim depositaram.

À Michael Karowski pela orientação dos meus primeiros passos em mecânica estatística.

À Valério Kurak pela sua dedicação constante, sugestões e críticas que possibilitaram a elaboração desta tese.

Aos professores F.Alcaraz, J.R.Drugowich, R.Köberle e S.G.Rosa pelas discussões e sugestões que muito contribuíram na confecção deste trabalho.

À Loreni e Suely pelo excelente trabalho de datilografia.

Ao CNPq e D.A.A.D. pelo apoio financeiro.

INDICE

RESUMO.....	i
ABSTRACT	ii
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO II- SISTEMAS DE SPINS E VÉRTICES EM DUAS DIMENSÕES... 7	7
2.1. Considerações gerais.....	7
2.2. Matriz de transferência.....	10
2.2.1. Matriz de transferência para siste - mas de spins.....	10
2.2.2. Matriz de transferência para siste - mas de vértices.....	12
2.3. Associação entre modelos de vértices e mode los de spins.....	13
2.4. Comutação da matriz de transferência.....	18
2.4.1. Comutação em sistemas de spins.....	18
2.4.2. Comutação em sistemas de vértices... 20	20
2.5. Fatorização e relação triângulo-estrela....	22
2.6. Relação de inversão e relação de simetria..	26
CAPÍTULO III-UM MODELO DE DEZ VÉRTICES EXATAMENTE SOLÚVEL.....	29
3.1. Preâmbulo.....	29
3.2. O método de espalhamento inverso.....	29
3.2.1. A matriz de monodromia.....	29
3.2.2. Aplicação do método nos modelos de seis e oito vértices.....	32
3.3. O modelo de dez vértices.....	41
3.3.1. Definição do modelo.....	41
3.3.2. Solução do modelo.....	42
3.3.3. O diagrama de fases.....	52
CAPÍTULO IV- SOLUÇÃO DE UM MODELO DE OITO VÉRTICES DE FÉRMIONS LIVRES.....	55
4.1. Preâmbulo.....	55
4.2. O modelo de oito vértices de férmions li - vres.....	56
4.2.1. Definição do modelo.....	56
4.2.2. Sobre a inexistência da relação de simetria	57

4.2.3. Proposta de um nova relação funcio - nal.....	60
4.2.4. Solução do modelo.....	64
4.3. Equivalência com o modelo de Ising na rede Union Jack.....	67
4.3.1. Mapeamento e discussão.....	67
4.3.2. Limites na rede quadrada.....	75
 CAPÍTULO V -SOLUÇÃO DE MODELOS DE SPIN COM SIMETRIA Z(N)....	79
5.1. Preâmbulo.....	79
5.2. Modelos de spin com simetria Z(N).....	80
5.3. Solução exata na rede quadrada.....	81
5.4. Solução exata nas redes triangular e hexago nal.....	84
5.4.1. Soluções anteriores.....	84
5.4.2. Solução a partir da rede quadrada..	86
5.5. Criticalidade nas redes Kagomé e de dados..	92
5.5.1. Conjecturas anteriores.....	92
5.5.2. Conjectura a partir da degenerescên cia das redes.....	94
 CAPÍTULO VI- CONCLUSÕES.....	99
 APÊNDICE A - O CALOR LATENTE DO MODELO DE DEZ VÉRTICES.....	101
 APÊNDICE B - PROPRIEDADES DAS FUNÇÕES ELÍPTICAS E DAS FUNÇÕES TETA.....	104
 APÊNDICE C - ADIÇÃO DE FUNÇÕES TETA.....	109
 REFERÊNCIAS.....	113

RESUMO

Neste trabalho nós estudamos alguns sistemas de spins e vértices exatamente solúveis em duas dimensões. A solubilidade exata está ligada ao fato de existirem soluções não triviais das equações de fatorização, o que nos permite obter a energia livre no limite termodinâmico.

Introduzimos e resolvemos pelo método de espalhamento inverso, um modelo de dez vértices assimétrico com dois e três estados nas ligações. Obtemos o diagrama de fases e mostramos que o sistema exhibe uma transição de fase de primeira ordem.

Analisamos um modelo de oito vértices de férmions livres e propomos uma nova relação funcional que nos permite calcular a energia livre por vértice. Mostramos que este sistema de vértices corresponde ao modelo de Ising na rede Union Jack.

Apresentamos um método de solução de modelos de spin em redes triangulares a partir da solução do mesmo modelo na rede quadrada. O método se aplica sempre que o modelo de spins envolver interação de primeiros vizinhos e satisfizer a relação triângulo-estrela. Estendemos para a rede triangular, as soluções auto-duais de Fateev e Zamolodchikov para a rede quadrada, de modelos de spin com simetria $Z(N)$.

Analisamos as conjecturas existentes sobre a criticalidade do modelo de Potts definido na rede de Kagomé. Baseados na simetria e nas degenerescências dessa rede conjecturamos uma expressão para a sua linha crítica.

ABSTRACT

We study some spin and vertex systems which are exactly solvable in two dimensions. The exact solubility is connected to the existence of non trivial solutions of the factorization equations which allow us to determine the free energy in the thermodynamic limit.

We introduce and solve by the inverse scattering method, a ten vertex model with two and three states on the links. We get the phase diagram of the system and show that it exhibits a first order phase transition.

Analysing a free fermion eight vertex model, we propose a new functional relation which permit us to get the free energy per vertex. We also show that this system is equivalent to the Ising model in a Union Jack lattice.

We present a method to solve spin models on triangular lattices from the known solution of the same model on square lattices. The method applies whenever the model involves first neighbours interactions and satisfies the star triangle relation. We extend to the triangular lattice the self dual solutions of Fateev and Zamolodchikov for $Z(N)$ invariant spin systems.

We also analyse the conjectures made before for the critical Potts model on a Kagomé lattice. Based on symmetry and on the collapses of this lattice we conjecture an expression for their critical line.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A termodinâmica de equilíbrio foi uma das grandes conquistas da física no século dezenove. De maneira quase milagrosa esta ciência viabiliza o estudo das propriedades físicas da matéria, que é constituída tipicamente de algo em torno de 10^{23} partículas, em termos de algumas variáveis de estado como a temperatura e pressão. Naturalmente, todas as propriedades macroscópicas da matéria devem ser derivadas, em última instância, do conhecimento das interações fundamentais entre as partículas microscópicas que constituem a matéria. Este é o objetivo da mecânica estatística.

Uma vez que a matéria se nos apresenta em diversas fases tais como sólida, líquida e gasosa, a mecânica estatística contemporânea tem envidado um gigantesco esforço numa melhor compreensão dos mecanismos de transição de fase. Neste sentido conceitos importantes como leis de escala, expoentes críticos e universalidade ⁽⁴⁾ foram introduzidos e têm contribuído de maneira decisiva no estudo de fenômenos críticos.

Por outro lado, na esteira da imitação das interações entre as partículas constituintes da matéria surgiram os modelos teóricos esculpidos por cientistas de grande sensibilidade. É a arte científica imitando a natureza.

Dentre esses modelos teóricos alguns se distinguem de maneira notável pelo fato de serem exatamente solúveis. Com isso queremos dizer que é possível se obter exatamente a energia livre do modelo no limite de um sistema infinito. Mesmo para esses privilegiados modelos muito mais difícil porém é se obter, por exemplo, os parâmetros de ordem, funções de correlação, etc. e, além

disso, o número desses modelos especiais é bastante reduzido.

Sob um ponto de vista histórico, o primeiro sistema exatamente solúvel foi o fluido de Van der Waals ⁽²⁾. É um modelo fenomenológico que (com a prescrição de Maxwell) objetiva explicar a transição líquido-gás. Sob certo regime dos parâmetros a transição pode ser de primeira ou segunda ordem.

No começo do nosso século, o paladar científico se encontrava aguçado por certas substâncias que exibiam propriedades paramagnéticas e ferromagnéticas. A primeira teoria do paramagnetismo foi proposta por Langevin ⁽³⁾ e do ferromagnetismo por Weiss ⁽⁴⁾ (teoria do campo médio molecular). Corretamente a teoria de Weiss prediz a existência de magnetização espontânea a campo magnético zero. Do ponto de vista de mecânica estatística a teoria de Weiss pode ser formulada através de uma hamiltoniana de spins, com a característica implausível de que eles interagem entre si com a mesma intensidade, não importando a distância que se encontram uns dos outros. Alternativamente, a teoria de Weiss pode ser obtida considerando interações de primeiros vizinhos numa rede hipercúbica e, depois do limite termodinâmico, fazer a dimensionalidade da rede ir a infinito ⁽⁵⁾.

O primeiro modelo a incluir interação explícita de spins primeiros vizinhos foi o modelo de Ising ⁽⁶⁾ em 1925. Este é, sem dúvida, o modelo mais importante e mais estudado de todos. A sua solução exata, em duas dimensões, obtida por Onsager ⁽⁷⁾ representa hoje um patrimônio da humanidade. Pela primeira vez uma transição de fase havia sido puramente demonstrada a partir do cálculo da função de partição. Muito embora o modelo de Ising tenha sido proposto em 1925, ele permaneceu um bom tempo no limbo. Somente passou a despertar interesse a partir de 1936 quando Peierls ⁽⁸⁾ demonstrou a existência de magnetização espontânea, seguindo-se

em 1941, a obtenção por Kramers e Wannier ⁽⁹⁾ da temperatura crítica do modelo através de argumentos de dualidade. O cálculo da magnetização espontânea foi anunciado, sem demonstração, por Onsager em 1949 e formalmente derivada por Yang ⁽¹⁰⁾ em 1952. Até hoje permanece como um desafio a solução exata do modelo de Ising com campo magnético.

A solubilidade exata do modelo de Ising gerou uma euforia na comunidade científica e generalizações do modelo logo apareceram. As variáveis de spin no modelo de Ising podem assumir os valores discretos mais ou menos 1 e, evidentemente, a primeira generalização é pensar que essas variáveis possam assumir mais valores discretos. Essa generalização é hoje conhecida como modelo de Potts. ⁽¹¹⁾

Nesse trabalho, Potts determina através de argumentos de dualidade a temperatura crítica do modelo. Muito tempo se passou até que surgissem alguns resultados exatos para esse modelo. Através de uma equivalência desse modelo com um sistema de seis vértices alternado nas duas direções, Baxter ⁽¹²⁾ obteve a energia livre por spin na temperatura crítica do modelo de Potts, na rede quadrada. Pouco depois ele estendeu os resultados para o Potts crítico nas redes triangular e hexagonal ⁽¹³⁾. Até hoje não se conhecem resultados exatos, mesmo que críticos, para o modelo de Potts em outros tipos de redes. Por outro lado, sabe-se que a transição é de segunda ordem para N (número de estados) igual a 2, 3 e 4 e de primeira ordem para $N > 4$.

Em anos recentes evidenciou-se a possibilidade de realizações experimentais do modelo de Potts. As substâncias relevantes são, na sua maioria, gases raros adsorvidos em monocamadas, em algum tipo de substrato ⁽¹⁴⁾, ⁽¹⁵⁾, ⁽¹⁶⁾, e ⁽¹⁷⁾, além da prata beta alumina ⁽¹⁸⁾ e correspondem ao Potts de três estados em redes

triangulares.

No mesmo ano em que surgiu o modelo de Potts, Berlin e Kac ⁽¹⁹⁾ propuseram e resolveram exatamente um modelo que também generaliza o modelo de Ising, na medida em que as variáveis de spin assumem valores contínuos. É o chamado modelo esférico (a origem do nome advém da restrição esférica sobre as variáveis de spin: $\sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = N$). Trata-se de um modelo intrigante que pode ser resolvido em qualquer dimensão e que exhibe uma transição de fase com expoentes críticos não clássicos para a dimensão entre 2 e 4 (a dimensão, no modelo, é um parâmetro que pode ser variado continuamente) e clássicos daí em diante.

Ainda como generalização do modelo de Ising há o chamado modelo de Ashkin-Teller ⁽²⁰⁾. Neste modelo, em cada sítio da rede vivem duas variáveis de spin tipo Ising e envolve tanto interação de primeiros vizinhos como interação de quatro spins. Apresenta um rico diagrama de fases ⁽²¹⁾. Somente é exatamente solúvel na chamada linha Baxter, onde os expoentes críticos variam continuamente. Sob certo regime dos parâmetros o modelo de Ashkin Teller exhibe mais de uma temperatura de transição.

Como um último sistema de spins exatamente solúvel devemos ainda citar o modelo de Baxter-Wu ⁽²²⁾. Neste caso a interação é de três spins e ocorre em todos os triângulos da rede triangular. O modelo de Baxter-Wu é equivalente ao modelo de oito vértices na rede Kagomê.

O conceito de vértices foi introduzido por L. Pauling ⁽²³⁾ ao estudar a entropia residual do gelo I. Devido à regra de gelo (experimentalmente verifica-se que cada átomo de oxigênio tem sempre dois átomos de hidrogênio próximos e dois afastados) este sistema corresponde ao modelo de seis vértices. A solução exata foi obtida por E. Lieb ⁽²⁴⁾ utilizando a hipótese de Bethe. O modelo de seis vértices simétrico descreve algumas substâncias ferroelétricas

cas e antiferroelétricas que exibem transição de primeira ordem e ordem infinita, respectivamente.

A mais espetacular solução exata de modelos bidimensionais foi, entretanto, aquela obtida por Baxter ⁽²⁵⁾ para o modelo de oito vértices simétrico. Estamos sendo tão categóricos nessa afirmação, não só pela beleza, novidade e engenhosidade da técnica de solução empregada por Baxter mas também pela riqueza e perenidade do próprio modelo. Sabe-se hoje que o modelo de oito vértices contém, como casos particulares, os seguintes modelos: seis vértices, Ising, férmions livres, Baxter-Wu e hexágono duro ⁽²⁶⁾.

Finalmente, resta-nos dizer algumas palavras sobre o modelo do hexágono duro. Trata-se de um modelo de adsorção de átomos numa rede (substrato) triangular e que obedecem a uma regra de exclusão, isto é, toda vez que um átomo é adsorvido em um sítio da rede então os sítios primeiros vizinhos (que formam um hexágono) estão proibidos para novas adsorções. Novamente foi Baxter ⁽²⁷⁾ que obteve a solução exata desse modelo, fazendo uso das matrizes de transferência de canto.

Alinhavamos acima alguns modelos exatamente solúveis em duas dimensões. Além da importância intrínseca desses modelos, foi através deles que as técnicas de solução exata se desenvolveram.

Devotaremos este nosso trabalho ao estudo de sistemas de vértices e de spins exatamente solúveis em vários tipos de redes bidimensionais. Os Capítulos III, IV e V compõem a parte original desta tese que está organizada da seguinte maneira: no Capítulo II, introduzimos as técnicas e conceitos que serão utilizados nos Capítulos seguintes; no Capítulo III, apresentamos o método de espalhamento inverso e o aplicamos na resolução exata de um modelo de dez vértices; no Capítulo IV, resolvemos através de re-

lações funcionais um modelo de oito vértices e mostramos que é equivalente ao modelo de Ising na rede Union Jack; no Capítulo V, propomos um método de solução de modelos de spin em redes triangulares, estendemos para essa rede as soluções de Fateev e Zamolodchikov e conjecturamos a criticalidade do modelo de Potts na rede Kagomé; no Capítulo VI apresentamos as conclusões e perspectivas desse trabalho.

CAPÍTULO II

SISTEMAS DE SPINS E VÉRTICES EM DUAS DIMENSÕES

2.1. Considerações Gerais

Os fundamentos da mecânica estatística clássica de equilíbrio foram lançados em 1902 no monumental tratado de J.W. Gibbs ⁽²⁸⁾. Seu trabalho fornece uma elegante descrição matemática das grandezas termodinâmicas de um sistema macroscópico. A nível microscópico o sistema é definido a partir de uma hamiltoniana que é determinada pelas interações das partículas constituintes. Neste trabalho estudaremos sistemas de spins e de vértices.

Os primeiros estudos de sistemas de spins remontam à própria época do trabalho de Gibbs e tinham por objetivo esclarecer o comportamento paramagnético e ferromagnético de certas substâncias. Neste contexto, as teorias pioneiras de Langevin ⁽³⁾ e Weiss ⁽⁴⁾ cimentaram as bases sobre as quais se edificaram os modelos de spins.

Suponha uma rede de N sítios (em qualquer dimensão) e que nestes sítios se encontram N spins que podem assumir q valores discretos: $0, 1, \dots, q-1$. Seja $H=H(\sigma)$ a hamiltoniana de interação, onde $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ e σ_i é o spin do i -ésimo sítio. A função de partição do sistema é definida pela expressão:

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H} \quad (2.1)$$

onde a soma é feita sobre todas as possíveis configurações de spins e $\beta = 1/K_B T$, T é a temperatura e K_B a constante de Boltzman.

A partir da função de partição podemos calcular outras grandezas termodinâmicas importantes, a saber:

A energia livre por spin

$$-\beta F = \frac{1}{N} \ln Z \quad (2.2)$$

A energia interna

$$U = T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(-\frac{F}{T} \right) \quad (2.3)$$

E o calor específico

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = T \frac{\partial^2 (-F)}{\partial T^2} \quad (2.4)$$

Na formulação da hamiltoniana pressupõe-se, usualmente, que a interação seja de curto alcance, podendo envolver dois ou mais spins. Temos então modelos que envolvem somente interação de dois spins (primeiros-vizinhos) como os modelos de Ising⁽⁶⁾, Potts escalar e vetorial⁽¹¹⁾, $Z(N)$ ⁽²⁰⁾, 3 spins: Baxter-Wu⁽²²⁾ e⁽³⁰⁾, 4 spins: Ashkin-Teller⁽²⁰⁾ e⁽²¹⁾, primeiros e segundos vizinhos (ANNI)⁽³¹⁾, etc. Esses modelos podem ser definidos em diferentes formas de rede e em diferentes dimensões e, além disso, exibem ricos diagramas de fases, com uma ou mais temperatura de transição de fase. Em duas dimensões alguns desses modelos puderam ser resolvidos exatamente e têm contribuído de maneira decisiva na compreensão de fenômenos críticos e na verificação de hipóteses como as de universalidade e de escala.

Os chamados sistemas ou modelos de vértices têm a sua origem em 1935 quando Linus Pauling⁽²³⁾ buscava explicar a entropia residual do gelo I, uma vez que os valores encontrados de entropia não podiam ser atribuídos exclusivamente às vibrações da rede. Observações feitas através de raios-X revelavam que o hidrogênio podia assumir duas posições: uma próxima do oxigênio e outra afastada do oxigênio e, além disso, cada oxigênio tinha dois hidrogênios próximos e dois afastados (esta constatação é chamada de regra do gelo). Dessa maneira podemos pensar geometricamente o sistema, atri-

buindo uma orientação (flechas) à ligação hidrogênica (ponte) entre oxigênios. Se o hidrogênio, que está entre os átomos de oxigênio, estiver mais próximo do oxigênio da esquerda (direita) ou de cima (de baixo) colocamos uma flecha apontando para a esquerda (direita) ou para cima (para baixo). Muito embora a estrutura cristalina do gelo I seja tetraédrica, verifica-se que a representação do gelo I numa rede quadrada bidimensional conserva bem as propriedades do sistema original. Com a regra do gelo, somente seis configurações sobrevivem (seis vértices) e estão mostradas na figura abaixo

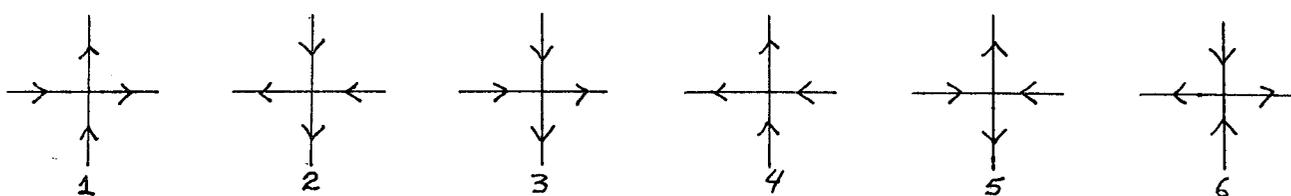


Fig.1 - As seis possíveis configurações com a regra do gelo

No caso do gelo a energia atribuída aos vértices é zero (peso de Boltzman igual a um); generalizações posteriores⁽³²⁾ atribuíram diferentes energias para diferentes vértices e tinham por objetivo servir de modelos para substâncias ferroelétricas como o K.D.P. (fosfato dihidrogenado de potássio, KH_2PO_4) e antiferroelétricas como o ADP ou F (fosfato dihidrogenado de amônia, $NH_4.H_2PO_4$). O chamado seis vértices simétrico (vértices conectados por reversão de todas as flechas são degenerados) foi resolvido exatamente em 1967 por E.H.Lieb⁽²⁴⁾ utilizando a hipótese (ansatz) de Bethe⁽³³⁾.

Outra grande conquista da mecânica estatística foi a espetacular solução exata do modelo de oito vértices simétrico obtida por R.J.Baxter⁽²⁵⁾; de quebra isto lhe permitiu resolver a cadeia quântica unidimensional de Heisenberg completamente anisotrópica⁽³⁴⁾.

No começo da década de 80 surgiram modelos de vértices que permitiam nas ligações da rede mais de dois estados (ou cargas, ou cores) e alguns puderam ser resolvidos exatamente^{(35), (36) e (37)} (com

possíveis restrições nos pesos de Boltzman).

Cumpra destacar ainda que em 1979, A.B.Zamolodckikov⁽³⁸⁾ demonstrou a correspondência existente entre os modelos de vértices em duas dimensões e as matrizes S fatorizáveis. Isso permitiu uma saudável interação entre as duas áreas.

A função de partição de um modelo de vértices se calcula de maneira similar àquela dos spins. Seja uma rede de N vértices e $w_i(j)$ o peso de Boltzman do vértice do tipo i localizado no sítio j. A função de partição desse sistema de vértices é dada pela expressão:

$$Z = \sum_{\text{conf.}} \prod_{j=1}^N w_i(j) \quad (2.5)$$

onde a soma é realizada somente sobre configurações compatíveis de vértices.

2.2. Matriz de Transferência

Uma das ferramentas mais utilizadas em mecânica estatística é a da matriz de transferência⁽³⁹⁾. A maior parte dos modelos exatamente solúveis de spins ou de vértices lança mão desse instrumento que transforma o cálculo da função de partição na determinação do maior autovalor da matriz de transferência.

2.2.1. Matriz de Transferência para Sistemas de Spins

Seja uma rede quadrada bidimensional de M linhas e N colunas. Nos MN sítios dessa rede encontram-se variáveis de spin σ que podem assumir os valores discretos: $0, 1, \dots, q-1$. Usaremos condições toroidais de contorno de maneira que os spins da linha e coluna 1 estão identificados como sendo aqueles da linha e coluna M+1 e

$N+1$. Seja $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ os spins de uma linha e $\sigma'_1, \dots, \sigma'_N$ os spins da linha imediatamente acima como mostra a figura abaixo.

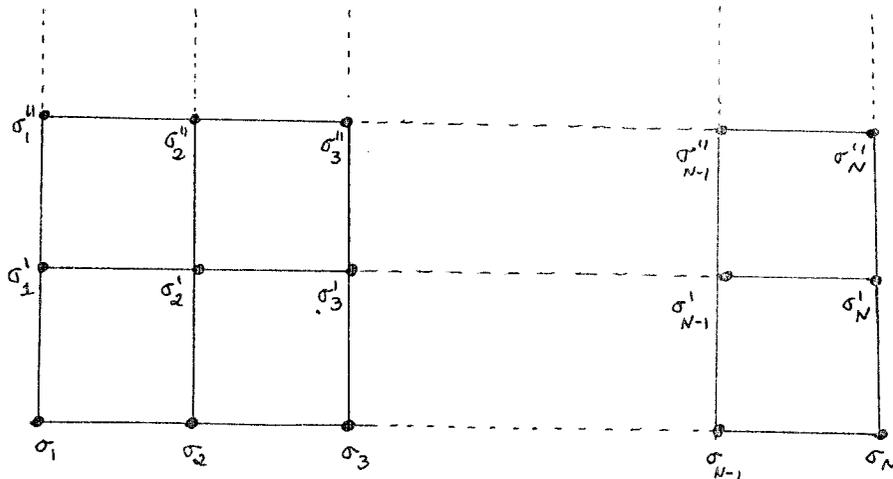


Fig.2 - A rede quadrada. Um peso de Boltzman facial está associado a cada quadrado.

A matriz de transferência da linha $\phi_1 = \{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$ para a linha $\phi_2 = \{\sigma'_1, \dots, \sigma'_N\}$ pode ser escrita como:

$$T_{\phi_1 \phi_2} = \prod_{j=1}^N w(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \sigma'_{j+1}, \sigma'_j) \quad (2.6)$$

onde $w(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \sigma'_{j+1}, \sigma'_j)$ é o peso de Boltzman da face que começa no spin σ_j e percorre o quadrado no sentido anti-horário; ele contém todas as possíveis interações entre os spins que envolvem a face, a saber: interação de primeiros vizinhos, diagonais, de três spins e de quatro spins.

Multiplicando $\sum_{\phi_2} \phi_1^T T_{\phi_1 \phi_2} T_{\phi_2 \phi_3}$ teremos a matriz de transferência da 1a. para a 3a. linha. Repetindo-se o processo até a última linha e usando as condições cíclicas obtemos a função de partição

$$Z_N = \sum_{\phi_1 \dots \phi_M} \phi_1^T T_{\phi_1 \phi_2} \dots T_{\phi_M \phi_1} \quad (2.7)$$

que pode ainda ser escrita

$$Z = \text{tr}(T^M) \quad (2.8)$$

Seja λ_0 o maior autovalor da matriz de transferência T (no ponto crítico ele é degenerado). No limite termodinâmico em que M e $N \rightarrow \infty$, é ele quem domina e, portanto, podemos escrever a função de partição por spin k :

$$k = \lim_{M, N \rightarrow \infty} (Z_N)^{\frac{1}{MN}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \lambda_0^{1/N} \quad (2.9)$$

2.2.2. Matriz de Transferência para Sistema de Vértices

Suponha que nas ligações dos sítios da mesma rede anterior vivam variáveis de q estados, cargas ou cores. O vértice estará centrado nos sítios e cercado por quatro ligações. Se nenhuma das configurações for proibida tratar-se-á, portanto, de um modelo de q^4 vértices. Chamaremos $R_{\lambda \lambda'}^{\alpha \alpha'}$ o peso de Boltzman representado na figura 3.

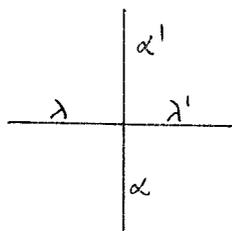


Fig.3 - O vértice cujo peso de Boltzman é $R_{\lambda \lambda'}^{\alpha \alpha'}$. Os índices α, α', λ e λ' assumem os valores: $0, 1, \dots, q-1$.

Vamos supor condições toroidais de contorno de maneira que os índices da l a. linha e l a. coluna estão sendo identificados como aqueles da linha e coluna $M+1$ e $N+1$ respectivamente. Seja $\mathcal{Y}_1 = \{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}$ os índices de uma linha e $\mathcal{Y}_2 = \{\alpha'_1, \dots, \alpha'_N\}$ os índices da linha imediatamente acima, como mostrados na figura 4.

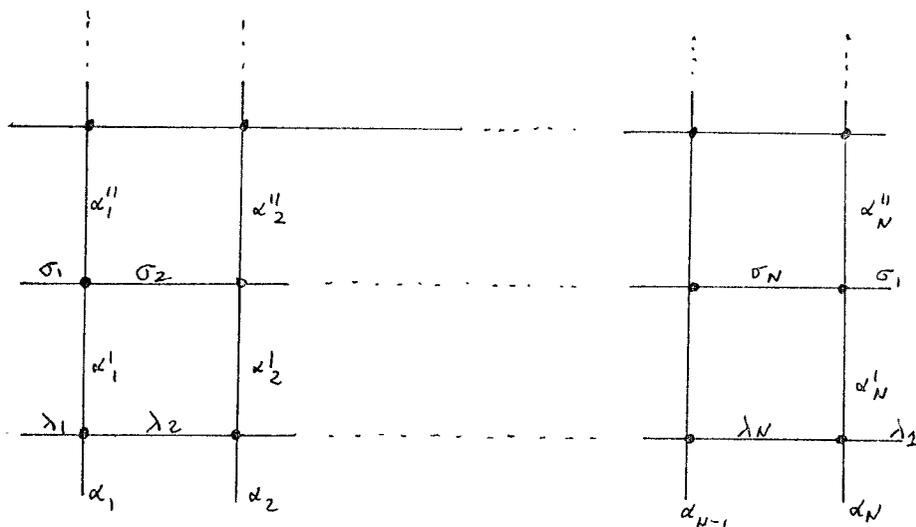


Fig.4 - Uma configuração de vértices na rede quadrada

A matriz de transferência da linha φ_1 para a linha φ_2 pode então ser escrita

$$\varphi_1 T \varphi_2 = \sum_{\lambda_1 \dots \lambda_N} \prod_{i=1}^N R_{\lambda_i \lambda_{i+1}}^{\alpha_i \alpha'_i} = \text{tr} \left[\prod_{i=1}^N R^{\alpha_i \alpha'_i} \right] \quad (2.10)$$

onde $R^{\alpha_i \alpha'_i}$ é uma matriz $q \times q$ dos pesos de Boltzman.

Observe-se que a matriz de transferência é ela própria o traço de um produto de matrizes.

Procedendo de maneira análoga ao sistema de spins encontramos que a função de partição é dada pela expressão

$$Z = \sum_{\varphi_1 \dots \varphi_M} \varphi_1 T \varphi_2 \dots \varphi_M T \varphi_1 = \text{tr} (T^M) \quad (2.11)$$

2.3. Associação entre Modelos de Vértices e Modelos de Spins

Retornemos a rede quadrada de spins definida na secção 2.2.1 e suponhamos que os spins que envolvem a face (e, possivelmente, os spins internos à face que estejam somados) tenham interações que dependam da diferença dos spins, módulo q . Sejam $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ ($\sigma_i = 0, 1, \dots, q-1$) os spins em torno da face. Se em cada ligação

associarmos perpendicularmente uma "barra" carregando q cores da maneira mostrada na figura 5, então a face terá dezesseis prescrições possíveis formando um vértice



Fig.5 - As duas possíveis associações nas ligações dos spins. A diferença de spins é módulo q .

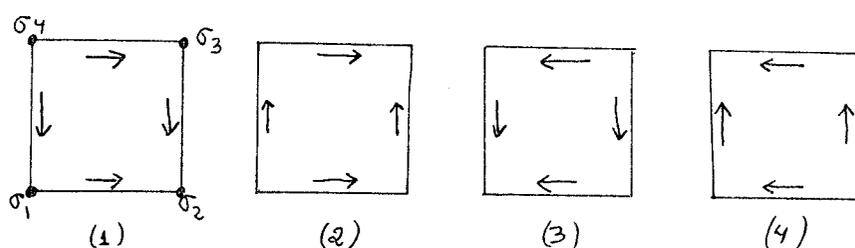


Fig.6 - As quatro prescrições admissíveis.

Das dezesseis possíveis prescrições somente quatro são admissíveis (mostradas na figura 6), as outras doze levam a uma incompatibilização dos vértices ao se justapor as faces para se reproduzir a rede. Neste trabalho usaremos frequentemente a prescrição (1). Quanto ao peso de Boltzman do vértice ele será igual (ou proporcional, com uma possível normalização que chamaremos de λ) aos pesos de Boltzman das interações de spins internas à face. As interações de spins contidas nas fronteiras da face contribuirão com a raiz quadrada do peso de Boltzman de spins para o peso de Boltzman do vértice, uma vez que pertence a duas faces.

Com essa prescrição, as q^4 possíveis configurações de spins na face estarão associadas a q^3 configurações de vértices. Dizemos então que ao modelo de spins original associamos um modelo de vértices com conservação de carga (ou cores) módulo q .

A relação entre a função de partição do modelo de spins e do modelo de vértices (quando a rede quadrada contém N spins e não há spins internos à face) é dada por

$$\lambda^N Z_s = q Z_v \quad (2.12)$$

onde Z_s e Z_v são as funções de partição do sistema de spins e vértices, respectivamente.

Se o sistema de spins envolve interações somente de primeiros vizinhos numa rede quadrada, então podemos fazer ainda uma outra prescrição. Coloque sobre o spin uma "barra" carregando a carga (ou cor) do próprio spin como mostrado na figura 7 abaixo. Dessa maneira a uma configuração de spins corresponde um vértice e o modelo associado será de q^4 vértices.

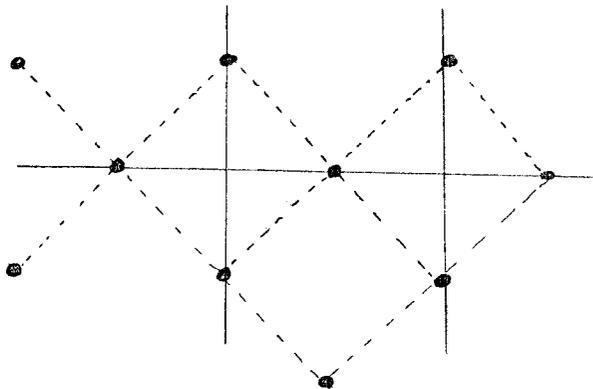


Fig.7 - Prescrição alternativa para sistemas de spins com interação de primeiros vizinhos.

O peso de Boltzman associado ao vértice será igual ao produto dos quatro pesos de Boltzman da interação dos spins que rodeiam o vértice.

É importante observar que com as prescrições feitas acima é possível mapear modelos de spin com interação de primeiros vizinhos e definidos em vários tipos de redes, em modelos de vértices.

Existem substâncias que adsorvem gases na sua superfície. Quando a adsorção é física os átomos ou moléculas adsorvidos não interagem com o substrato. Nesse caso o papel do substrato é o de definir um potencial na superfície onde os átomos podem ser adsorvidos (sítios de adsorção). Falamos então de uma rede de adsorção (bidimensional) a qual pode assumir diferentes formas: quadrada, triangular, hexagonal, etc. Os átomos adsorvidos interagem entre si com um potencial de Lennard-Jones. Se o parâmetro da rede de adsorção for tal que o seu valor esteja no regime repulsivo daquele

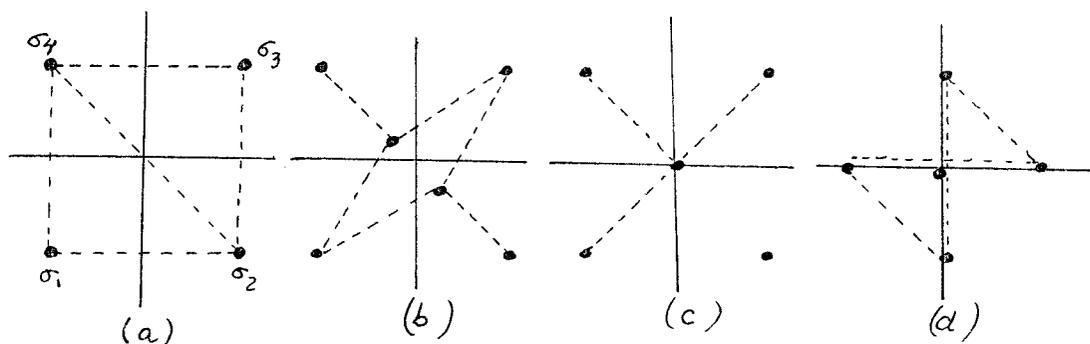


Fig.8 - Vértices associados a modelos de spins definidos em diferentes tipos de rede: (a) triangular; (b) de dados; (c) hexagonal; (d) Kagomé. Os spins in ternos estão somados.

potencial, então podemos nos defrontar com um sistema que exhibe repulsão de primeiros vizinhos e atração de segundos vizinhos. Evidentemente um estudo de tal sistema não é tarefa fácil e modelos mais simples que envolvem somente repulsão de primeiros vizinhos passaram a ser estudados. São os chamados modelos "duros". Podemos associar as variáveis 1 e 0 se o sítio de adsorção está ou não ocupado, respectivamente. Se o átomo está presente atribuímos uma probabilidade (atividade). Para certas redes de adsorção (ver figura 9) é possível associar um sistema de vértices equivalentes. Na situação mostrada na figura as "barras" horizontais tem carga 1 e 0 e coincidem com a ocupação ou não daquele sítio. As "barras" verticais tem cargas $-1, 0, 1$ e estão definidas pela diferença das ocupações. A cada configuração de ocupação está associado um único vértice. Temos então um modelo de vértices cujo número de estados na horizontal é diferente daquele da vertical. Infelizmente os vértices permitidos e proibidos não são aqueles do modelo de dez vértices que estudaremos no Capítulo III.

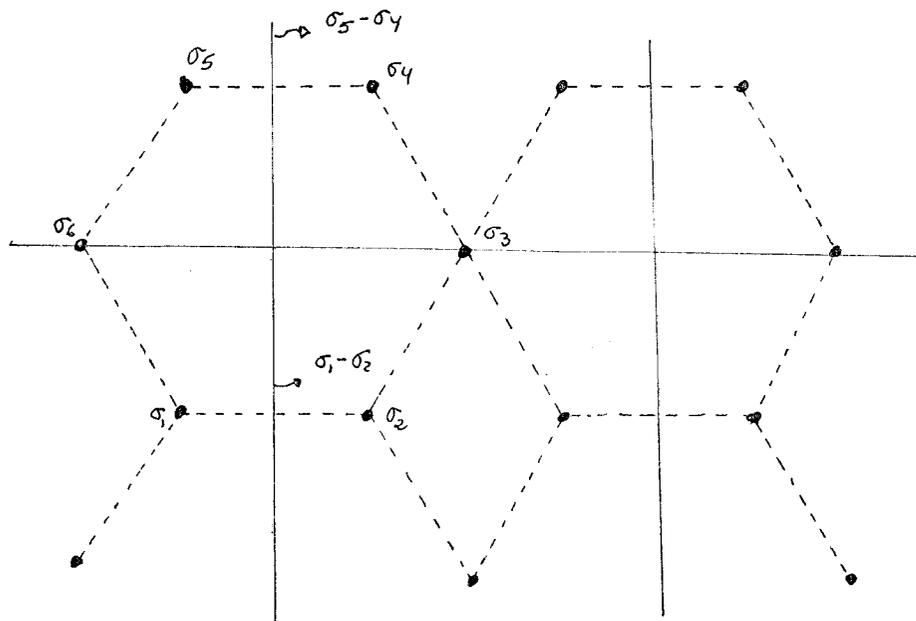


Fig.9 - Um modelo de vértices com dois estados nas ligações horizontais e três estados nas ligações verticais. As ocupações σ_i valem 0 ou 1.

Existem ainda alguns modelos de spins cujos mapeamentos em modelos de vértices não é tão simples como os aqui apresentados. O modelo de Potts escalar numa rede planar é equivalente a um polinômio de Whitney^{(40) e (41)} que por sua vez é equivalente a um modelo de seis vértices alternado nas duas direções ("staggered"). Esse tipo de modelo de vértices inhomogêneo somente é solúvel quando a alternância deixa de existir. No modelo de Potts, isto ocorre na temperatura crítica, o que explica a sua solubilidade somente àquela temperatura^{(12) e (13)}. Outro exemplo é o modelo de Ashkin-Teller cujo sistema de vértices equivalente é um oito vértices alternado nas duas direções (isto é, os pesos de Boltzman das duas sub-redes são diferentes). A solução exata deste modelo, como no caso anterior, só é possível quando a alternância deixa de existir. Isso ocorre na linha auto-dual. Aqui, porém, dependendo dos valores dos acoplamentos, a linha auto-dual pode ou não corresponder à linha crítica (para um determinado regime dos acoplamentos o modelo exibe duas temperaturas de transição).

2.4. Comutação da Matriz de Transferência

Como vimos anteriormente o maior autovalor da matriz transferência nos fornece a função de partição no limite de uma rede infinita. Seria, portanto, extremamente desejável a obtenção do espectro de autovalores da matriz. Tal tarefa porém, é árdua e tem desafiado a elite dos cérebros mais brilhantes. Entretanto, existem alguns modelos que apresentam peculiaridades as quais permitem a sua solução exata. Essa peculiaridade é a comutação da matriz de transferência.

2.4.1. Comutação em Sistemas de Spins

O grande timoneiro e mentor das idéias que passo a apresentar é R.J.Baxter ⁽⁴²⁾ e ⁽⁴³⁾ cuja leitura recomendo ao leitor.

Dado um sistema de spins podemos escrever a matriz de transferência T com peso de Boltzman w como na equação (2.6). Sob que circunstâncias essa matriz de transferência comutará com outra T' que tem a mesma forma de T mas cujo peso de Boltzman é w' ? Para responder a essa pergunta façamos primeiramente o produto matricial de T com T'

$$T T' = \sum_{\tau_1, \dots, \tau_N=0}^{q-1} s_1(\tau_1, \tau_2) s_2(\tau_2, \tau_3) \dots s_N(\tau_N, \tau_1) \quad (2.13)$$

onde

$$s_j \left(\begin{matrix} \sigma_j \\ \tau_j \end{matrix} \right)_{\tau_{j+1}} = w(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \tau_{j+1}, \tau_j) w'(\tau_j, \tau_{j+1}, \sigma'_{j+1}, \sigma'_j) \quad (2.14)$$

Evidentemente podemos encarar $s_j(\tau_j, \tau_{j+1})$ como matrizes $q \times q$ (no total são q^4 matrizes $q \times q$) com elementos τ_j e τ_{j+1} . Dessa maneira a equação (2.13) pode ser reescrita

$$\prod_{\{\sigma_1 \dots \sigma_N\}} T T' = \text{tr}[s_1 \cdot s_2 \dots s_N] \quad (2.15)$$

De maneira similar

$$\prod_{\{\sigma'_1 \dots \sigma'_N\}} T' T = \text{tr}[s'_1 \cdot s'_2 \dots s'_N] \quad (2.16)$$

Uma condição suficiente para que T e T' comutem é a existência de matrizes $q \times q$ não singulares, M_1, \dots, M_N tal que

$$S_j = M_j S'_j M_{j+1}^{-1} \quad (2.17)$$

Vamos assumir que M_j tenha a seguinte forma

$$\tau \begin{pmatrix} M_j \\ \tau' \end{pmatrix} = \omega''(\tau', \sigma'_j, \tau, \sigma_j) \quad (2.18)$$

onde ω'' é uma função que está à nossa disposição. Das equações (2.14), (2.17) e (2.18) obtemos

$$\begin{aligned} & \sum_{\tau''} \omega(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \tau'', \tau) \omega'(\tau, \tau'', \sigma'_{j+1}, \sigma'_j) \omega''(\tau', \sigma'_{j+1}, \tau'', \sigma_{j+1}) = \\ & = \sum_{\tau''} \omega''(\tau'', \sigma'_j, \tau, \sigma_j) \omega'(\sigma_j, \sigma_{j+1}, \tau', \tau'') \omega(\tau'', \tau', \sigma'_{j+1}, \sigma'_j) \end{aligned} \quad (2.19)$$

Rebatizando $\tau, \sigma_j, \sigma_{j+1}, \tau', \sigma'_{j+1}, \sigma'_j, \tau''$ de a, b, c, d, e, f, g , respectivamente e chamando $\omega'_r(a, b, c, d) = \omega'(b, c, d, a)$ podemos colocar a equação (2.19) numa forma mais simétrica:

$$\begin{aligned} & \sum_{g=0}^{q-1} \omega(b, c, g, a) \omega'_r(f, a, g, e) \omega''(d, e, g, c) = \\ & = \sum_{g=0}^{q-1} \omega''(g, f, a, b) \omega'(g, b, c, d) \omega(g, d, e, f) \end{aligned} \quad (2.20)$$

A equação (2.20) chamaremos de relação de comutação (muitas vezes, erroneamente, chamada de relação triângulo-estrela). Se existirem soluções não triviais de (2.20) então o modelo poderá ser resolvido exatamente como veremos no capítulo III. Na solução de (2.20) encararemos as suas equações como equações funcionais, ao invés de um sistema linear de equações para w'' . Muito útil é dar à equação (2.20) uma representação gráfica (figura 10) pois ela será usada mais tarde.

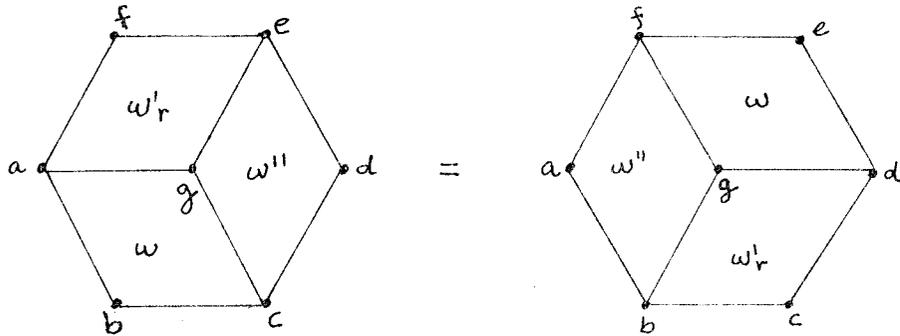


Fig.10 - Representação gráfica da relação de comutação.

2.4.2. Comutação em Sistemas de Vértices

Façamos a mesma pergunta feita anteriormente. Em que condições a matriz de transferência T (equação 2.10) com peso de Boltzman R para os vértices comuta com uma matriz de transferência T' (que tenha a mesma forma de T) e pesos de Boltzman R' ? Façamos então o produto matricial de T com T'

$$TT'_{\{\alpha_1 \dots \alpha_N\} \{\alpha'_1 \dots \alpha'_N\}} = \sum_{\beta_1 \dots \beta_N} \text{tr} \left[\prod_{i=1}^N R^{\alpha_i \beta_i} \right] \cdot \text{tr} \left[\prod_{i=1}^N R'^{\beta_i \alpha'_i} \right] \quad (2.21a)$$

$$= \sum_{\beta_1 \dots \beta_N} \text{tr} \left[\prod_{i=1}^N R^{\alpha_i \beta_i} \otimes R'^{\beta_i \alpha'_i} \right] \quad (2.21b)$$

$$= \text{tr} \left[\prod_{i=1}^N S^{\alpha_i \alpha'_i} \right] \quad (2.21c)$$

onde $S^{\alpha\alpha'}$ são q^2 matrizes dadas por

$$S^{\alpha\alpha'}_{\lambda\mu} = \sum_{\gamma=0}^{q-1} R^{\alpha\gamma}_{\lambda\lambda'} R^{\gamma\alpha'}_{\mu\mu'} \tag{2.22}$$

De maneira similar teremos

$$T^T_{\{\alpha_1 \dots \alpha_N\}} T_{\{\alpha'_1 \dots \alpha'_N\}} = \text{tr} \left[\prod_{i=1}^N S^{\alpha_i \alpha'_i} \right] \tag{2.23}$$

onde S' $\alpha_i \alpha'_i$ é igual a S $\alpha_i \alpha'_i$ trocando R por R' .

As matrizes de transferência comutarão se existir uma matriz R'' , $q^2 \times q^2$, não singular, tal que

$$S'^{\alpha\alpha'} = R'' S^{\alpha\alpha'} R''^{-1} \tag{2.24}$$

pois devido a existência do traço as equações (2.21c) e (2.23) ficam idênticas. Explicitando os índices de (2.24) teremos

$$\sum_{\alpha''\beta''\gamma''=0}^{q-1} R^{\beta\beta''}_{\gamma''\gamma} R''^{\alpha\alpha''}_{\gamma'\gamma''} R'^{\beta'\beta'}_{\alpha''\alpha'} = \sum_{\alpha''\beta''\gamma''=0}^{q-1} R'^{\beta\beta''}_{\alpha''\alpha'} R''^{\gamma\gamma''}_{\alpha''\alpha'} R^{\beta'\beta'}_{\gamma'\gamma''} \tag{2.25}$$

A equação (2.25) é a relação de comutação para sistemas de vértices. Podemos também dar uma representação gráfica para ela.

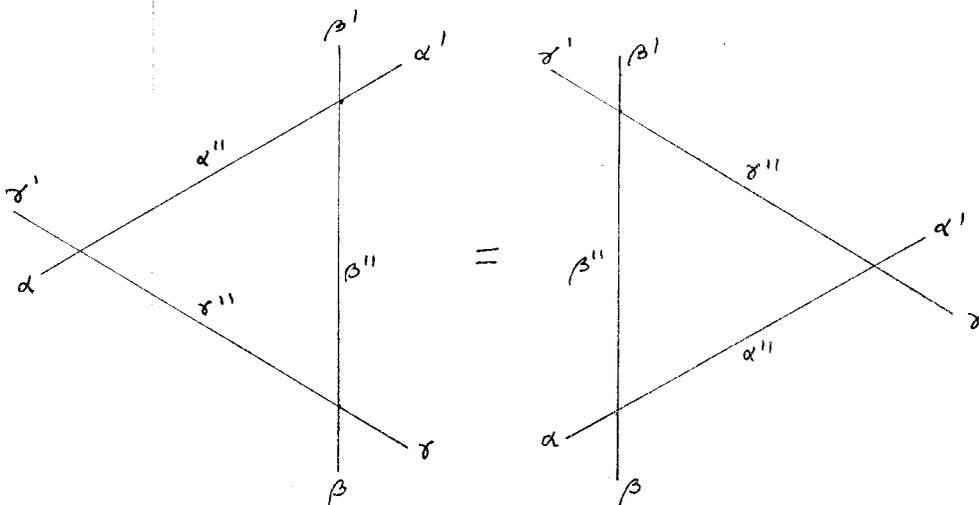


Fig.11 - Representação gráfica da relação de comutação para vértices.

2.5. Fatorização e Relação Triângulo-Estrela

Enquanto se desenvolvia em mecânica estatística o método da comutação da matriz de transferência (no começo da década de 70) somente alguns anos mais tarde (meados de 70) surgiram, numa área aparentemente desconexa, os primeiros modelos de matriz S exatamente solúveis em duas dimensões (uma espacial e uma temporal). O cálculo explícito da matriz S era basicamente possível quando o modelo apresentava uma propriedade especial chamada de fatorização: a matriz S de espalhamento (elástico) de n partículas podia ser expressa como o produto de $n(n-1)/2$ matrizes S de espalhamento de duas partículas. As equações de fatorização foram pela primeira vez utilizadas por Karowski et al ⁽⁴⁴⁾. Atualmente um bom número de matrizes S fatorizáveis com diferentes simetrias internas: $O(2)$ ⁽⁴⁵⁾, $O(N)$ ⁽⁴⁶⁾ com $N \geq 3$, $U(N)$ ⁽⁴⁷⁾, etc. são conhecidas.

Em duas dimensões uma partícula relativística livre pode ter a sua relação de dispersão $E^2 - p^2 = m^2$ ($c=1$) parametrizada ⁽⁴⁸⁾ pela rapidez θ ("rapidity"): $E = m \cosh \theta$ e $p = m \sinh \theta$. Esse parâmetro rapidez também aparece em mecânica estatística sob o nome de parâmetro espectral. Dessa maneira as equações de fatorização escritas abaixo assumem a forma de equações funcionais nessas variáveis.

$$S_{i_1 i_2}^{k_1 k_2}(\theta) S_{k_1 i_3}^{j_1 k_3}(\theta + \theta') S_{k_2 k_3}^{j_2 j_3}(\theta') = S_{i_2 i_3}^{k_2 k_3}(\theta') S_{i_1 k_3}^{k_1 j_3}(\theta + \theta') S_{k_1 k_2}^{j_1 j_2}(\theta) \quad (2.26)$$

onde índices repetidos estão somados, $i, j, k: 0, 1, \dots, q-1$ e a matriz S de espalhamento de duas partículas, com os respectivos índices, está mostrada na figura a seguir.

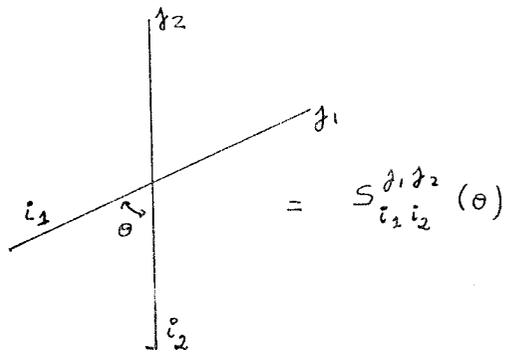


Fig.12 - Matriz S de espalhamento de duas partículas. A coordenada tempo cresce no sentido sudoeste - nordeste.

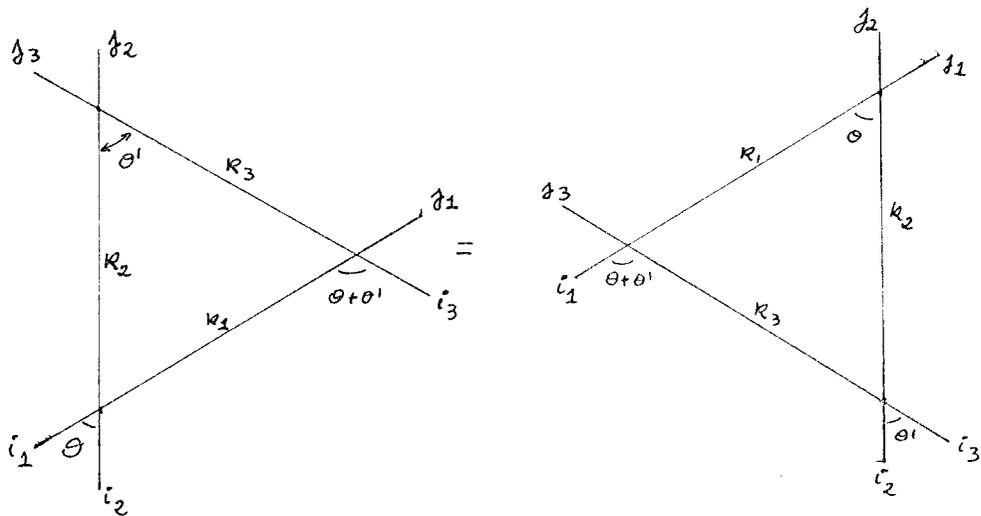


Fig.13 - Representação gráfica das equações de fatorização.

As equações de fatorização são as vezes chamadas de equações dos triângulos ou equações de Yang-Baxter (e, impropriamente, de equações triângulo-estrela). Observe que se $\theta = \theta' = 0$ então $S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}(\theta=0) = \delta_{i_1}^{j_1} \delta_{i_2}^{j_2}$ é solução trivial de (2.26) (chamada de condição inicial). Na busca de soluções das equações de fatorização, usualmente elas são transformadas de um sistema de equações funcionais em um sistema de equações diferenciais via derivadas parciais em relação a θ (θ') no ponto $\theta=0$ ($\theta'=0$). Somente em 1979 é que A.B. Zamoldchikov⁽⁴⁹⁾ fez a ponte entre a relação de comutação nos modelos de vértices e a equação de fatorização, igualando $R_{i_1 j_1}^{i_2 j_2} =$

$$= S_{i_1 i_2}^{j_1 j_2}.$$

Paralelamente a esses desenvolvimentos permanecia não esclarecido, na área de mecânica estatística, um sistema de equações intrigantes denominadas de relação triângulo-estrela. Essa relação foi pela primeira vez mencionada brevemente por Onsager ⁽⁷⁾ em seu famoso (e porque não dizer, histórico) trabalho de solução do modelo de Ising. Posteriormente essas relações foram utilizadas de maneira abundante em sistemas Ising definidos em vários tipos de redes ⁽⁵⁰⁾ e no modelo de Potts crítico ⁽⁵¹⁾.

Dizemos que um sistema de spins (com interação de primeiros vizinhos) satisfaz a relação triângulo-estrela se existir solução para as q^3 equações que transformam um triângulo numa estrela (veja figura 14), com uma possível função de normalização λ .

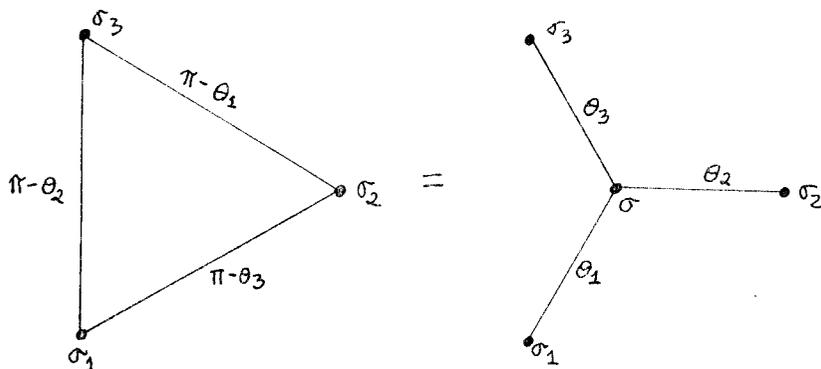


Fig.14 - Relação triângulo-estrela. Na estrela os parâmetros espectrais são θ_i , no triângulo $\pi - \theta_i$; $\sigma_i = 0, 1, \dots, q-1$.

À maneira de Pokrowsky e Bashilov ⁽⁵²⁾ escreveremos as equações da relação triângulo-estrela como equações funcionais

$$\sum_{\sigma=0}^{q-1} K_{\sigma_1 \sigma}(\theta_1) K_{\sigma_2 \sigma}(\theta_2) K_{\sigma_3 \sigma}(\theta_3) = \lambda(\theta_1, \theta_2, \theta_3) K_{\sigma_2 \sigma_3}(\pi - \theta_1) K_{\sigma_3 \sigma_1}(\pi - \theta_2) K_{\sigma_1 \sigma_2}(\pi - \theta_3) \quad (2.27)$$

onde $K_{\sigma \sigma'}(\theta_i)$ e $K_{\sigma \sigma'}(\pi - \theta_i)$ são os pesos de Boltzman nas ligações do tipo i na estrela e no triângulo respectivamente, $\lambda(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ é uma função simétrica dos parâmetros espectrais e $\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 = \pi$. Em modelos com simetria $Z(q)$ (habitualmente chamados de $Z(N)$, mas es

tamos reservando N para o número de spins ou vértices da rede) os pesos de Boltzman dependem da diferença dos spins: $K_{\sigma}(\theta) = K_{\sigma_1 \sigma_2}(\theta)$ e têm as seguintes propriedades: $K_{\sigma}(\theta) = K_{-\sigma}(\theta)$ e $K_{\sigma}(\theta) = K_{q-\sigma}(\theta)$. A transformação dual⁽⁵³⁾ dos pesos de Boltzman é a transformada de Fourier dentro do grupo de simetria⁽⁵⁴⁾ e⁽⁵²⁾, no caso

$$Z(q) :$$

$$K_{\sigma}^D(\theta) = \frac{\sum_{\alpha=0}^{q-1} e^{i \frac{2\pi}{q} \alpha \sigma} K_{\alpha}(\pi-\theta)}{\sum_{\alpha=0}^{q-1} K_{\alpha}(\pi-\theta)} \quad (2.28)$$

Observemos que se sobrepusermos a estrela em cima do triângulo na figura 14 podemos dizer que estamos construindo a "rede" dual acompanhada de uma transformação dual dos pesos de Boltzman. Em geral esse procedimento mapeia um modelo de spins a alta temperatura numa rede no mesmo modelo a baixa temperatura definido em outro tipo de rede (por exemplo; a rede triangular na hexagonal, a rede de dados na Kagomê, etc.). No caso particular da rede quadrada e se o modelo tiver apenas uma temperatura de transição, essa transformação permite a determinação da temperatura crítica.

Muito bem, e o que tem a ver a relação triângulo-estrela com fatorização? Suponha duas redes quadradas de spins superpostas como mostradas na figura 15 e que os pesos de Boltzman da interação numa direção seja o dual do peso na outra direção. Dessa maneira a célula unitária (face) é aquela apresentada na figura 16.

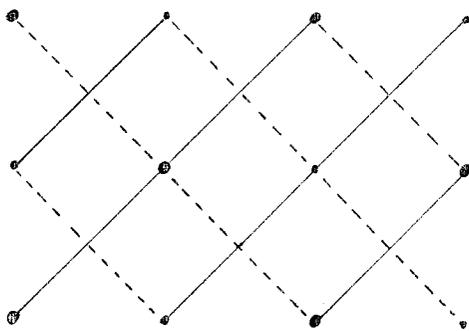


Fig.15 - Duas redes quadradas superpostas.

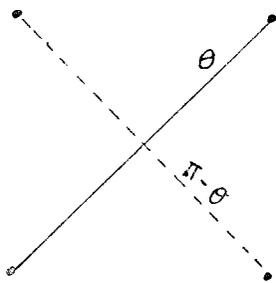


Fig.16 - Célula Unitária (face)

Transportando a face acima para a representação gráfica da relação de comutação para sistemas de spins (figura 10) percebemos a presença de um triângulo e uma estrela à esquerda e um triângulo e uma estrela à direita. Os spins nos cantos do triângulo da esquerda são aqueles externos à estrela da direita e vice-versa. Logo se a relação triângulo-estrela está satisfeita a fatorização está garantida (a função λ se cancela dos dois lados).

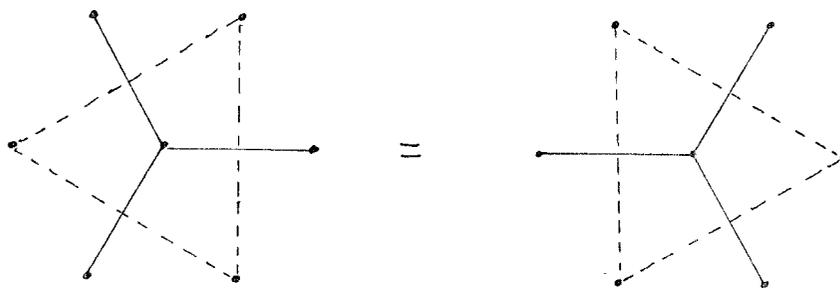


Fig.17 - Relação triângulo-estrela e fatorização.

É claro que, em geral, a fatorização é mais do que a relação triângulo-estrela (em modelos com interação de três spins, por exemplo, nem se pode falar nela) e permite estudos de modelos com diversas formas de interação.

2.6. Relação de Inversão e Relação de Simetria

A relação de inversão foi inicialmente introduzida no

contexto de vértices por Stroganov⁽⁵⁵⁾. Posteriormente, a noção foi estendida para sistemas de spins^{(56) e (57)}. É uma manifestação macroscópica, a nível de função de partição, de uma propriedade local e microscópica do vértice (mais precisamente, tem a sua origem no fato que a matriz associada ao vértice tem inversa).

Tomemos na equação (2.26) $\theta + \theta' = 0$. Assim procedendo vemos que a expressão abaixo é solução

$$S_{i_1 i_2}^{k_1 k_2}(\theta) S_{k_2 k_1}^{j_1 j_2}(-\theta) = \rho(\theta) \delta_{i_1}^{j_1} \delta_{i_2}^{j_2} \quad (2.29)$$

onde índices repetidos estão somados e $\rho(\theta) = \rho(-\theta)$.

Pode-se demonstrar (veja Pokrowski e Bashilov⁽⁵²⁾) que a função de partição por spin obedece uma equação semelhante à (2.29) e que passaremos a chamar de relação de inversão.

$$k(\theta) k(-\theta) = \rho(\theta) \quad (2.30)$$

A relação de inversão acima é uma equação funcional para a função de partição por spin $k(\theta)$.

Podemos ainda explorar algumas simetrias da rede. Na figura 15 se rodarmos a rede de 90° , evidentemente a função de partição não se alterará. Entretanto, da figura 16 vemos que os parâmetros espectrais trocaram, isto é, $\leftrightarrow \pi - \theta$. Podemos então escrever

$$k(\theta) = k(\pi - \theta) \quad (2.31)$$

A equação (2.31) é chamada relação de simetria. A nível de matriz S ela tem sua origem na simetria de cruzamento⁽⁴⁹⁾. Nem sempre podemos lançar mão da relação de simetria e faz-se necessário então buscar uma equação substitutiva. Teremos no Capítulo IV oportunidade de voltar ao assunto.

Muito embora a relação de inversão e de simetria nos

permitam calcular a função de partição por spin no limite de uma rede infinita e, portanto, o maior autovalor da matriz de transparência, seria interessante podermos calcular os autovalores seguintes e, além disso, termos algumas informações sobre os autovetores. O método do espalhamento inverso, apresentado no próximo capítulo, permite tal análise.

CAPÍTULO III

UM MODELO DE DEZ VÉRTICES EXATAMENTE SOLÚVEL

3.1. Preâmbulo

Neste capítulo estudamos o método de espalhamento inverso que teve um significativo desenvolvimento no final da década de 70. Em mecânica estatística esse método transforma a hipótese de Bethe numa álgebra de operadores. Apresentamos, como exemplos, a aplicação do método nos modelos de seis e oito vértices, adicionando aos resultados sobejamente conhecidos na literatura, um diagrama de fases do modelo de seis vértices que se revela extremamente útil na compreensão do mecanismo de mudança de parâmetros (os parâmetros ruins são os pesos de Boltzman, os parâmetros bons são os fornecidos pelas equações de fatorização). No final do capítulo apresentamos a solução original do modelo de dez vértices⁽⁵⁸⁾ e o seu diagrama de fases. Este modelo generaliza o de seis vértices para dois e três estados nas ligações, obedecendo à regra do gelo (conservação de carga).

3.2. O Método de Espalhamento Inverso

3.2.1. A matriz de monodromia

O método de espalhamento inverso foi introduzido em 1967 por Gardner et al⁽⁵⁹⁾ no contexto das equações de Korteweg-de Vries possibilitando a solução de algumas equações não lineares⁽⁶⁰⁾. Mais tarde a sua aplicação se estendeu para a solução de modelos de interesse na teoria quântica de campos como: Sine-Gordon⁽⁶¹⁾, equação de Schrödinger não linear⁽⁶²⁾, etc. Em mecânica estatística o método foi introduzido por Takhtadzhian e Faddeev⁽⁶³⁾ (veja também H.B.

Thacher⁽⁶⁴⁾) baseando-se nos trabalhos de Baxter.

Vamos fazer, inicialmente, uma imagem gráfica da equação (2.10). (da matriz de transferência para modelos de vértices). O índice λ_{N+1} (figura 18) está identificado com λ_1 . Retirando-se essa identificação, deixando-os livres, podemos definir uma matriz $q \times q$ cujos "elementos" (na verdade matrizes gigantescas $q^N \times q^N$) são dados por

$$\bar{z}_{\lambda_1 \lambda_{N+1}} = \sum_{\lambda_2, \dots, \lambda_N=0}^{q-1} \prod_{i=1}^N R_{\lambda_i \lambda_{i+1}}^{\alpha_i \alpha'_i} \quad (3.1)$$

A matriz \bar{z} é chamada matriz de monodromia

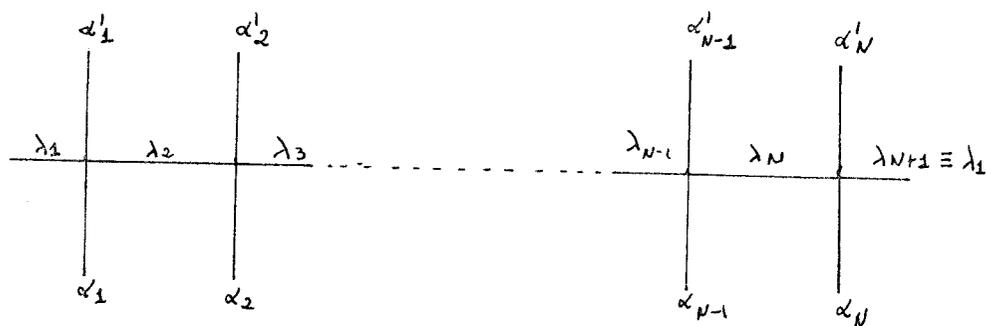


Fig.18 - Representação gráfica da matriz de transferência. Os índices na horizontal e vertical são chamados auxiliares e quânticos, respectivamente.

Evidentemente podemos escrever

$$T = \sum_{\lambda=0}^{q-1} \bar{z}_{\lambda \lambda} = \text{tr } \bar{z} \quad (3.2)$$

Para ficar um pouco mais claro o significado da matriz de monodromia, vamos definir uma matriz $q \times q$ associada ao vértice i que chamaremos operador do vértice i

$$\left(L_i \right)_m^n = R_{m n}^{\alpha_i \alpha'_i}, \quad m, n = 0, 1, \dots, q-1 \quad (3.3)$$

Aqui, de novo, cada "elemento" do operador de vértice é uma matriz $q \times q$. Por exemplo, no caso $q=3$, o operador de vértice se escreve:

$$L_i = \begin{pmatrix} \alpha_i d_i^1 & & \\ R_{00} & R_{01} & R_{02} \\ \alpha_i d_i^1 & \alpha_i d_i^1 & \alpha_i d_i^1 \\ R_{10} & R_{11} & R_{12} \\ \alpha_i d_i^1 & \alpha_i d_i^1 & \alpha_i d_i^1 \\ R_{20} & R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Tomando o produto matricial $L_i L_{i+1}$ teremos

$$L_i L_{i+1} = \begin{pmatrix} \alpha_i d_i^1 & \alpha_{i+1} d_{i+1}^1 & \alpha_i d_i^1 & \alpha_{i+1} d_{i+1}^1 & \alpha_i d_i^1 & \alpha_{i+1} d_{i+1}^1 & & & \\ R_{00} & R_{00} + R_{01} & R_{01} & R_{10} + R_{02} & R_{02} & R_{20} & & \times & \times \\ & & \times & & & & & \times & \times \\ & & & \times & & & & \times & \times \\ & & & & \times & & & \times & \times \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

onde exibimos apenas o elemento zero-zero do produto e indicamos com um x os restantes. Dessa maneira fazendo-se o produto $L_1 \cdot L_2 \dots L_N$ obteremos a matriz de monodromia que também será 3×3 .

$$\bar{Z} = \prod_{i=1}^N L_i \quad (3.6)$$

Em geral a matriz de monodromia terá q^2 elementos (operadores). A soma dos operadores da diagonal é igual à matriz de transferência.

Como dissemos no Capítulo II, as equações de fatorização introduzem o importante parâmetro espectral θ . Suponhamos duas matrizes de monodromia: $\bar{Z} = \bar{Z}(\theta)$ e $\bar{Z}' = \bar{Z}(\theta')$ e busquemos uma matriz U $q^2 \times q^2$, não singular tal que a relação abaixo esteja satisfeita.

$$U(z \otimes z') = (z' \otimes z)U \quad (3.7)$$

Construimos na figura 19 a representação gráfica da equação (3.7).

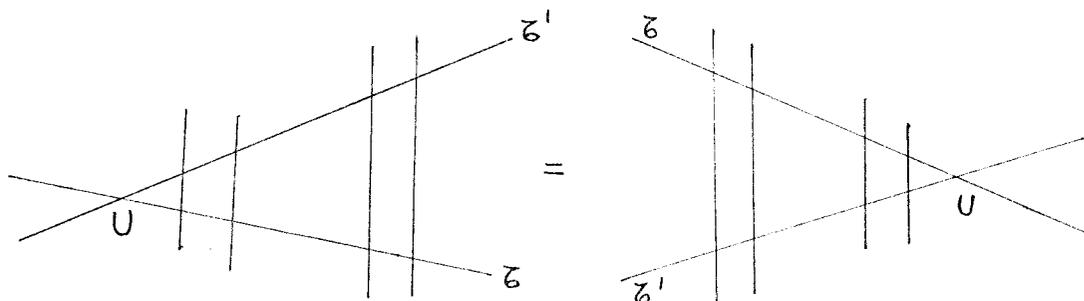


Fig.19 - Representação gráfica da equação (3.7).

Utilizando a figura 11 (equação de fatorização) vemos que se a aplicarmos N vezes, o lado esquerdo da figura 19 ficará igual ao lado direito, ou seja a fatorização garante a veracidade de (3.7) e, mais ainda, ela nos fornecerá relações de "comutação" entre os q^2 operadores da matriz de monodromia. Essas relações nos permitem o cálculo dos autovalores e autovetores da matriz de transferência se se encontrar o estado referência (também, as vezes chamado de pseudo-vácuo). Chamamos de estado referência àquele que sob a ação da matriz de monodromia a transforma numa matriz triangular superior (ou inferior). Infelizmente nem sempre a procura de tal estado é uma tarefa fácil.

3.2.2. Aplicação do método nos modelos de seis e oito vértices

O chamado modelo de oito vértices simétrico permite as seguintes configurações de vértices:

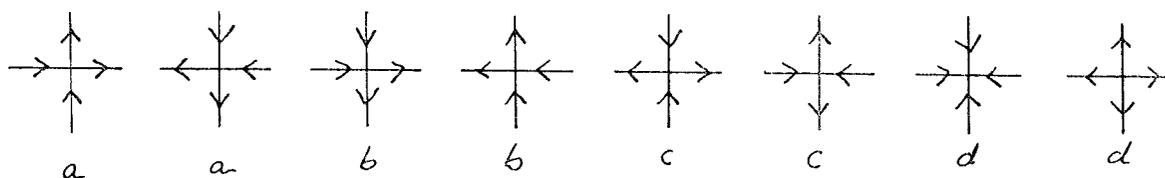


Fig.20 - As configurações permitidas no modelo de oito vértices.

O operador de vértice definido anteriormente é uma matriz 2×2 e assume a seguinte forma:

$$L_i = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}_i & \begin{pmatrix} 0 & d \\ c & 0 \end{pmatrix}_i \\ \begin{pmatrix} 0 & c \\ d & 0 \end{pmatrix}_i & \begin{pmatrix} b & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix}_i \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

Evidentemente a matriz de monodromia também será uma matriz 2×2

$$\bar{L} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

onde A, B, C e D são matrizes $2^N \times 2^N$.

Baxter⁽²⁵⁾ demonstrou que o modelo de oito vértices obedece às equações de fatorização. Ele obteve a seguinte parametrização para os pesos de Boltzman associados aos vértices:

$$a = \rho \operatorname{sn}(v+\eta, \kappa) \quad (3.10a)$$

$$b = \rho \operatorname{sn}(v-\eta, \kappa) \quad (3.10b)$$

$$c = \rho \operatorname{sn}(2\eta, \kappa) \quad (3.10c)$$

$$d = \rho \kappa \operatorname{sn}(2\eta, \kappa) \operatorname{sn}(v-\eta, \kappa) \operatorname{sn}(v+\eta, \kappa) \quad (3.10d)$$

onde ρ é uma constante de normalização $\text{sn}(X, k)$ são as funções elípticas de Jacobi, v é o parâmetro espectral, η uma constante e k é o módulo da função elíptica.

Com essa parametrização ele mostrou que duas matrizes de transferência com os mesmos η e k e diferentes parâmetros espectrais v e v' comutam:

$$[T(v), T(v')] = 0 \quad (3.11)$$

Queremos agora calcular os auto-estados da matriz de transferência e precisamos, portanto, descobrir o estado referência. A primeira idéia (mais simples) que nos ocorre seria aplicar a matriz no estado:

$$|\Omega_0\rangle = e_1^{i_1} \otimes e_2^{i_2} \otimes \dots \otimes e_N^{i_N} \quad (3.12)$$

onde $e_j^{i_j}$ são os vetores colunas $e^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $e^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ no sítio j ($i_j = 0, 1$).

Da equação (3.8) vemos que tal tentativa é infrutífera uma vez que o operador de vértice atuando sobre os estados e^i , não é nem triangular superior nem inferior. Podemos pensar, então, em aplicar a matriz de referência num estado $|\Omega\rangle$ com a mesma estrutura de $|\Omega_0\rangle$, mas com $e_j^{i_j}$ substituído por $\bar{e}_j = \begin{pmatrix} \varphi_j^+ \\ \varphi_j^- \end{pmatrix}$. Procedendo dessa maneira encontramos:

$$L_j \bar{e}_j = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} a \varphi_j^+ \\ b \varphi_j^- \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} d \varphi_j^- \\ c \varphi_j^+ \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} c \varphi_j^- \\ d \varphi_j^+ \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} b \varphi_j^+ \\ a \varphi_j^- \end{pmatrix} \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

onde ψ_j^\pm são funções que dependem do sítio j . Se for possível encontrar uma matriz M_j , 2×2 , não singular, tal que a transformação local definida na equação (3.14) esteja satisfeita, então teremos obtido o estado referência

$$M_j L_j M_{j+1}^{-1} = \bar{L}_j \quad (3.14)$$

onde \bar{L}_j é uma matriz triangular superior (ou inferior) e $M_1 = M_{N+1}$.

Essa linha de raciocínio foi utilizada por Baxter^{(65), (66) e (67)} no seu trabalho original e lhe franqueou a obtenção dos autovetores da matriz de transferência do modelo de oito vértices a partir do conhecimento do estado de referência (que também é um autovetor).

Para o modelo de seis vértices, entretanto, o estado referência é bem mais simples, pois nesse caso, $k=0$ em (3.10d) implicando que os vértices que não conservam cargas exatamente estão proibidos ($d=0$). Dessa maneira, o estado referência será

$$|\Omega_0\rangle = e_1^0 \otimes e_2^0 \otimes \dots \otimes e_N^0 \quad (3.15)$$

Aplicando o operador de vértice em e_j^0 , teremos

$$L_j e_j^0 = \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ c \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$

Logo

$$T|\Omega_0\rangle = \left(\text{tr} \prod_{j=1}^N L_j \right) |\Omega_0\rangle = (a^N + b^N) |\Omega_0\rangle \quad (3.16)$$

ou seja, $|\Omega_0\rangle$ é autovetor da matriz de transferência com autovalor igual a $a^N + b^N$.

Lembrando que em $k=0$ as funções elípticas de (3.10) tor

nam-se funções trigonométricas não é difícil se obter a matriz U que satisfaz a equação (3.7)

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & 0 \\ 0 & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

onde $\alpha = \alpha(\nu, \nu') = \frac{\text{sen}(\nu - \nu')}{\text{sen}(\nu - \nu' - 2\eta)}$ e $\beta = \beta(\nu, \nu') = -\frac{\text{sen} 2\eta}{\text{sen}(\nu - \nu' - 2\eta)}$.

Dessa maneira fazendo uso de (3.7), (3.9) e (3.17) podemos escrever as relações de "comutação" dos operadores A, B, C e D :

$$[A(\nu) + D(\nu), A(\nu') + D(\nu')] = 0 \quad (3.18a)$$

$$[A(\nu), A(\nu')] = [B(\nu), B(\nu')] = 0 \quad (3.18b)$$

$$A(\nu) B(\nu') = \frac{1}{\alpha(\nu, \nu')} B(\nu') A(\nu) - \frac{\beta(\nu, \nu')}{\alpha(\nu', \nu)} B(\nu) A(\nu') \quad (3.18c)$$

$$D(\nu) B(\nu') = \frac{1}{\alpha(\nu, \nu')} B(\nu') D(\nu) + \frac{\beta(\nu, \nu')}{\alpha(\nu, \nu')} B(\nu) D(\nu') \quad (3.18d)$$

Munidos das regras acima podemos verificar que os vetores construídos da maneira indicada abaixo são autovetores da matriz de transferência desde que a equação (3.22) esteja satisfeita. Para tanto basta "passar" os B 's através de A e D e juntar os termos "indesejáveis" zerando-os (isto é que gera a equação (3.22)).

$$|\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n\rangle = \prod_{i=1}^n B(\nu_i) |\mathcal{R}_0\rangle \quad (3.19)$$

com $n \leq N$, pois se $n > N$ então $\prod_i B(\nu_i) \equiv 0$.

A matriz de transferência quando aplicada ao estado acima resulta

$$T|\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n\rangle = \Lambda(\nu; \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n)|\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n\rangle \quad (3.20)$$

com

$$\begin{aligned} \Lambda(\nu; \nu_1, \nu_2, \dots, \nu_n) = & \left[\text{sen}(\nu + \eta) \right]^N \prod_{i=1}^n \frac{\text{sen}(\nu - \nu_i - 2\eta)}{\text{sen}(\nu - \nu_i)} \\ & - \left[\text{sen}(\nu - \eta) \right]^N \prod_{i=1}^n \frac{\text{sen}(\nu - \nu_i + 2\eta)}{\text{sen}(\nu - \nu_i)} \end{aligned} \quad (3.21)$$

se

$$\left[\text{sen}(\nu_j - \eta) \right]^N \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq j}}^n \frac{\text{sen}(\nu_j - \nu_\ell + 2\eta)}{\text{sen}(\nu_j - \nu_\ell)} = \left[\text{sen}(\nu_j + \eta) \right]^N \prod_{\substack{\ell=1 \\ \ell \neq j}}^n \frac{\text{sen}(\nu_j - \nu_\ell - 2\eta)}{\text{sen}(\nu_j - \nu_\ell)} \quad (3.22)$$

e, além disso, fizemos em (3.10) $\rho=1$.

Façamos agora algumas observações. Ao contrário dos autovetores, os autovalores dependem do parâmetro espectral. Ambos dependem de ν_1, \dots, ν_n que são n incógnitas que podem, em princípio, ser determinadas pelas n equações acopladas (3.22). No limite termodinâmico, os parâmetros espectrais se tornam densos e a equação integral resultante de (3.22) pode ser resolvida por transformada ou série de Fourier para se obter a densidade de estados, pois o núcleo da equação integral depende apenas da diferença dos parâmetros espectrais. Retorna-se então à equação (3.21) e analisa-se, qual dos dois termos é dominante. Usualmente, numa transição de fase os parâmetros ν e η passam de valores reais para valores imaginários. No caso dos seis vértices é o parâmetro de Lieb⁽⁶⁸⁾ que controla a transição

$$\Delta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} = \cos(2\eta) \quad (3.23)$$

As transições ocorrem em $\Delta=1$ em sistemas ferroelétricos (transição de primeira ordem, na classificação de Ehrenfest) e em $\Delta=-1$ em sistemas antiferroelétricos (transição de ordem infinita).

Vamos agora analisar um pouco mais em detalhe o diagrama de fases do modelo de seis vértices nos seus parâmetros naturais (energias associadas aos vértices) e nos parâmetros que advêm da fatorização (η e v). Em 1972, Glasser et al.⁽⁶⁹⁾ publicaram um belíssimo diagrama de fases do modelo de seis vértices. As energias e pesos de Boltzman associados aos vértices são os seguintes: $a = e^{-\beta\epsilon_2}$, $b = e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_2)}$ e $c = e^{-\beta\epsilon_1}$ ou seja a normalização está fixada pela condição $b=ac$. Graficando $\beta\epsilon_2$ contra $\beta\epsilon_1$ eles obtiveram o diagrama de fases mostrado na figura 21. As regiões I, II e II* são as fases ordenadas, as curvas $\Delta=1$ (com dois ramos) e $\Delta=-1$ são as curvas críticas e no seu interior se encontram as fases desordenadas. Na origem do sistema de coordenadas $(\beta\epsilon_2, \beta\epsilon_1) = (0,0)$ está a temperatura infinita (correspondente ao modelo do gelo). Os modelos especiais estão indicados no próprio diagrama (veja tabela I para a definição desses modelos especiais), em particular os modelos 1F, 1KDP e 1KDP*, são assintóticos às curvas críticas (com prováveis transições em $T=0$). Definido um modelo, isto é, fixados ϵ_1 e ϵ_2 , as trajetórias termodinâmicas (ou a evolução com a temperatura) são, nesse diagrama, retas que passam pela origem e cuja inclinação tem tangente igual a ϵ_2/ϵ_1 . Quando a temperatura é infinita um modelo se encontra na origem e, à medida que a temperatura abaixa, ele caminha ao longo da reta até cruzar com a curva crítica onde sofre a transição e prossegue ao longo da mesma reta até o infinito.

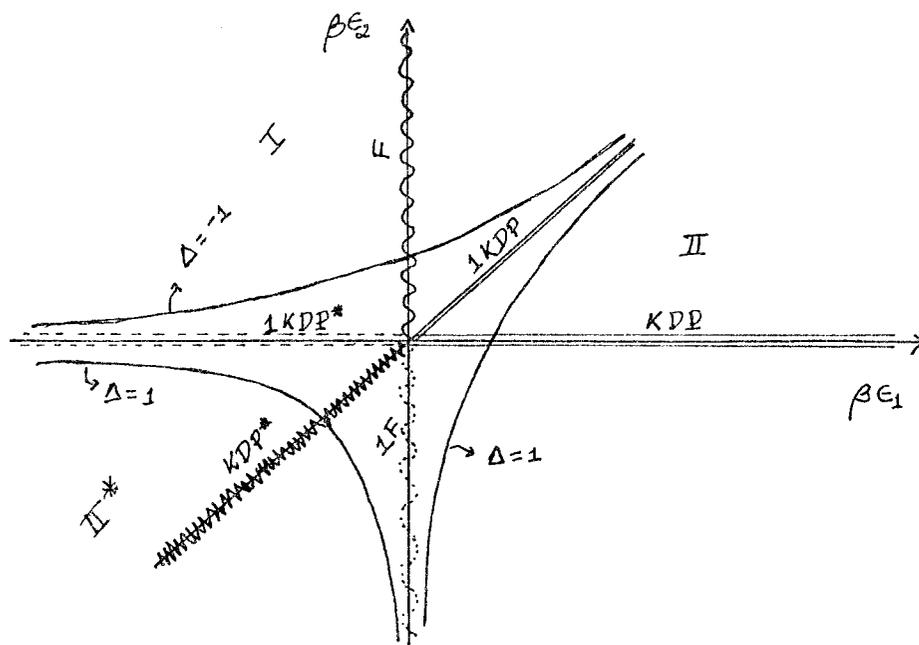


Fig.21 - Diagrama de fases do modelo de seis vértices. As regiões I, II e II* correspondem às fases ordenadas. As curvas $\Delta = \pm 1$ são críticas e no seu interior se encontram as fases desordenadas.

Vamos agora, a partir da parametrização obtida por Baxter construir um diagrama nas variáveis η e v da região desordenada (nesta fase η e v são reais). Conforme vemos na figura 22 esta região tem a forma triangular. Qualquer modelo se encontra, a altíssimas temperaturas, em $v = \pi/2$ e $\eta = \pi/6$. Dependendo dos valores de ϵ_1 e ϵ_2 ele pode desembocar nas regiões III, III*, IV. Os pesos dos vértices serão:

$$a = e^{-\beta\epsilon_2} = \rho \operatorname{sen}(v+\eta) = \frac{\operatorname{sen}(v-\eta)}{\operatorname{sen}\eta \operatorname{sen}(v+\eta)} \quad (3.24a)$$

$$b = e^{-\beta(\epsilon_1+\epsilon_2)} = \rho \operatorname{sen}(v-\eta) = \frac{\operatorname{sen}^2(v-\eta)}{\operatorname{sen}\eta \operatorname{sen}(v+\eta)} \quad (3.24b)$$

$$c = e^{-\beta\epsilon_1} = \rho \operatorname{sen} 2\eta = \frac{\operatorname{sen}(v-\eta)}{\operatorname{sen}(v+\eta)} \quad (3.24c)$$

onde $\rho = \frac{\text{sen}(\nu-\eta)}{\text{sen}2\eta \text{sen}(\nu+\eta)}$ foi, evidentemente, fixado pela mesma normalização anterior.

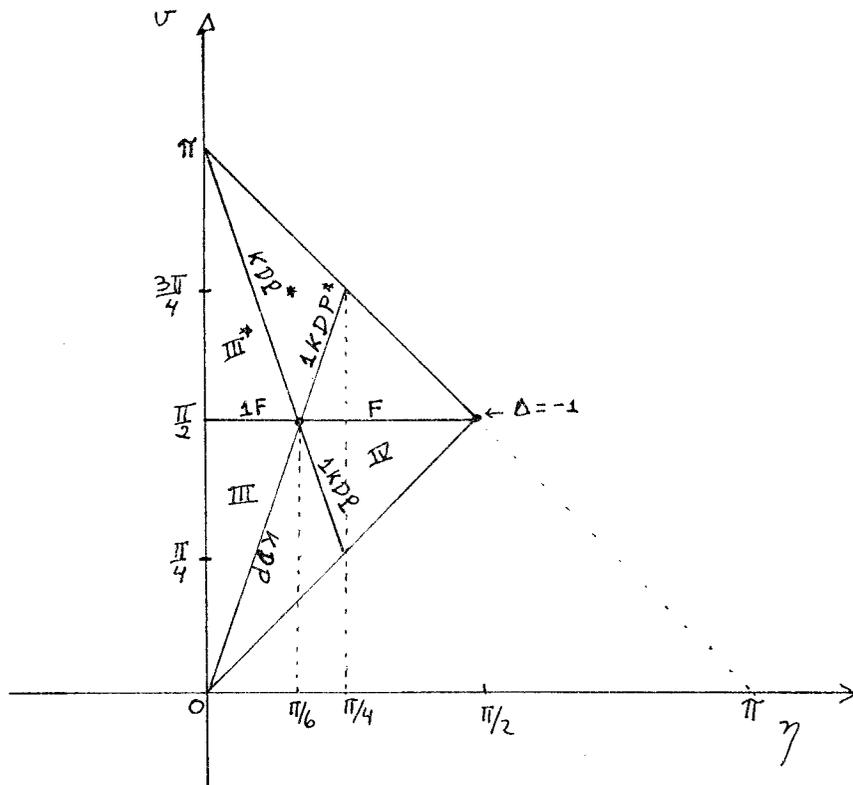


Fig.22 - Diagrama das fases desordenadas nas variáveis ν e η .

Neste diagrama a trajetória termodinâmica é dada pela seguinte equação.

$$\left[\frac{\text{sen}(\nu-\eta)}{\text{sen}(\nu+\eta)} \right]^\alpha = \frac{\text{sen}(\nu-\eta)}{\text{sen}2\eta} \quad (3.25)$$

onde $\alpha = \epsilon_2 / \epsilon_1$.

Dessa equação vemos que se $\eta \rightarrow 0$ então $\nu \rightarrow 0$ ou π e se $\eta \rightarrow \pi/2$ então $\nu \rightarrow \pi/2$. As transições ocorrem, portanto, nos vértices do triângulo. Se um modelo é antiferroelétrico ele se encontra, a temperaturas altas, em $\eta = \pi/6$ e $\nu = \pi/2$, faz uma curva na região IV à medida que a temperatura abaixa e desemboca no vértice $\eta = \nu = \pi/2$. Se um modelo é ferroelétrico, a alta temperatura ele está em $\eta = \pi/6$ e $\nu = \pi/2$ e à medida que a temperatura está sendo abaixada ele

faz uma curva na região III (III^{*}) e desemboca no vértice $\eta=v=0$ ($\eta=0$ e $v=\pi$).

TABELA I - Os modelos de seis vértices especiais

F	$v = \pi/2$	$\eta \geq \pi/6$	$\epsilon_1 = 0$	$\epsilon_2 > 0$	$-1 \leq \Delta \leq 1/2$
1F	$v = \pi/2$	$\eta \leq \pi/6$	$\epsilon_1 = 0$	$\epsilon_2 < 0$	$1/2 \leq \Delta \leq 1$
1KDP*	$v = 3\eta$	$\pi/6 \leq \eta \leq \pi/4$	$\epsilon_1 < 0$	$\epsilon_2 = 0$	$0 \leq \Delta \leq 1/2$
1KDP	$v = \pi - 3\eta$	$\pi/6 \leq \eta \leq \pi/4$	$\epsilon_1 = \epsilon_2 > 0$		$0 \leq \Delta \leq 1/2$
KDP	$v = 3\eta$	$0 \leq \eta \leq \pi/6$	$\epsilon_1 > 0$	$\epsilon_2 = 0$	$1/2 \leq \Delta \leq 1$
KDP*	$v = \pi - 3\eta$	$0 \leq \eta \leq \pi/6$	$\epsilon_1 = \epsilon_2 < 0$		$1/2 \leq \Delta \leq 1$

Após passar pelos vértices do triângulo, os modelos ferro ou antiferroelétricos entram nas fases ordenadas da seguinte maneira: a) se convergiu para o vértice $(v, \eta) = (\pi/2, \pi/2)$ então $\eta = \pi/2 + i\xi$, $v = \pi/2 + i\beta$ com $\xi > |\beta|$; b) se convergiu para o vértice $(0, 0)$ então $\eta = i\xi$, $v = i\beta$ com $\beta > \xi > 0$; c) se convergiu para o vértice $(\pi, 0)$ então $\eta = i\xi$, $v = \pi + i\beta$ com $0 < \xi < -\beta$.

3.3. O Modelo de Dez Vértices

3.3.1. Definição do modelo

O modelo que apresentaremos é uma generalização do mode

lo de seis vértices com duas cargas (± 1) nas ligações horizontais e três cargas ($\pm 2, 0$) nas verticais. Imporemos que vértices conectados por conjugação de carga tenham o mesmo peso de Boltzman e que somente vértices com conservação exata de carga são permitidos. Dessa maneira os vértices admissíveis são dez e estão mostrados na figura abaixo.

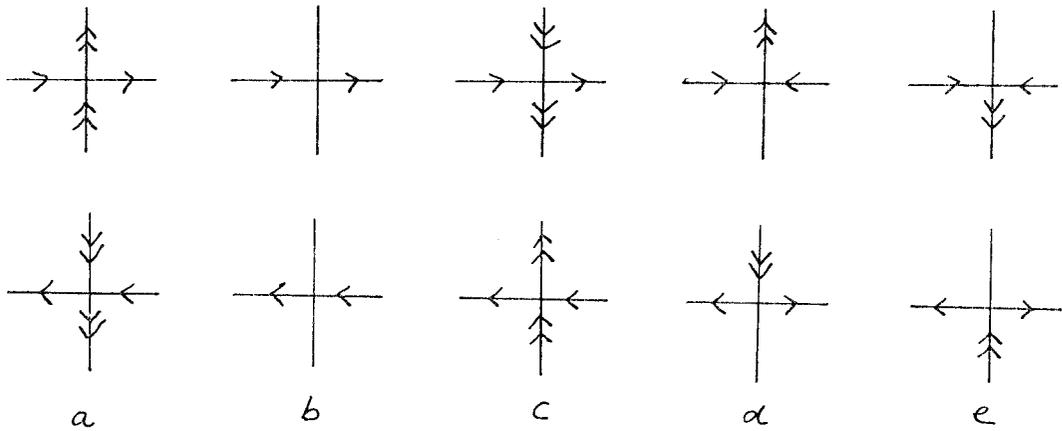


Fig.23 - As dez configurações de vértices permitidos com os respectivos pesos de Boltzman.

Se certas condições sobre os pesos de Boltzman estiverem satisfeitas, então esse modelo, no limite termodinâmico é, solúvel pelo método de espalhamento inverso⁽⁵⁸⁾.

3.3.2. Solução do modelo

Dada uma rede quadrada com M linhas e N colunas de vértices do modelo, vislumbramos, de imediato, a possibilidade de definirmos duas matrizes de transferência: uma de linha para linha de dimensão $3^N \times 3^N$ e outra de coluna para coluna com dimensão $2^M \times 2^M$; as matrizes de monodromia associadas envolvem quatro e nove operadores, respectivamente. Nós trabalharemos a matriz de transferência de linha para linha pois se assemelha à do modelo de seis vértices e o estado referência é fácil de ser obtido.

O operador de vértice no sítio j será uma matriz 2×2 cu

jos elementos são matrizes 3x3 e pode ser escrito

$$L_j = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & e & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & e & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Para que duas matrizes de transferência com pesos de Boltzman a, b, c, d, e e a', b', c', d', e' comutem é suficiente encontrar uma matriz U , 4x4, não singular tal que

$$(L_j \otimes L'_j) U = U (L'_j \otimes L_j) \quad (3.27)$$

onde U terá a mesma forma daquela matriz definida em (3.17).

Observe-se que, neste caso, U e L_j não têm a mesma estrutura (forma). Analisando as 34 equações resultantes de (3.27) vemos que algumas são equações triviais (identidades) outras de imediato impõem a restrição $d=e$ ($d'=e'$) e a matriz U , terá, como dissemos, a mesma forma daquela do seis vértices

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1 & x_2 & 0 \\ 0 & x_2 & x_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Com essas restrições o número de equações independentes se reduz a cinco, a saber

$$x_1 b d' + x_2 d a' = d b' \quad (3.29a)$$

$$x_1 c d' + x_2 d b' = d c' \quad (3.29b)$$

$$x_1 d b' + x_2 c d' = b d' \quad (3.29c)$$

$$x_1 da' + x_2 bd' = ad' \quad (3.29d)$$

$$x_1 ca' + x_2 dd' = ac' \quad (3.29e)$$

onde já utilizamos o fato de que $e=d$ ($e'=d'$).

O sistema acima apresenta solução desde que:

$$d^2 = \frac{(a+c)(b^2-ac)}{b}, \quad d'^2 = \frac{(a'+c')(b'^2-a'c')}{b'} \quad (3.30a)$$

e

$$\frac{a+c}{2b} = \frac{a'+c'}{2b'} = \Delta \quad (3.30b)$$

O modelo tem, portanto, dois parâmetros livres. O parâmetro Δ na equação (3.30b) desempenha o mesmo papel que o parâmetro de Lieb no modelo de seis vértices: duas matrizes de transferência T e T' , com mesmo Δ e diferentes parâmetros espectrais v e v' , respectivamente, comutam.

A restrição imposta pela equação (3.30a) revela que o nosso modelo, quando solúvel, tem uma das energias atribuídas aos vértices dependente da temperatura.

Os pesos de Boltzman podem ser parametrizados por funções trigonométricas (hiperbólicas na fase ordenada)

$$a = -\rho \cos(\eta+v) \quad (3.31a)$$

$$c = -\rho \cos(\eta-v) \quad (3.31b)$$

$$b = \rho \cos v \quad (3.31c)$$

$$d=e = \rho \operatorname{sen}(\eta) \sqrt{-2 \cos \eta} \quad (3.31d)$$

onde ρ é uma normalização e as regiões físicas (aquelas em que a, b, c, d, e são positivos) da fase desordenada estão contidas no interior do triângulo: $\pi/2 \leq v+\eta \leq 3\pi/2$, $\pi/2 \leq \eta-v \leq 3\pi/2$, $\pi/2 \leq \eta \leq \pi$ e $-\pi/2 \leq v \leq \pi/2$.

Desse modo os elementos da matriz U são também simples funções trigonométricas.

$$x_1 = \frac{\operatorname{sen} \eta}{\operatorname{sen}(\eta+v'-v)} \quad e \quad x_2 = \frac{\operatorname{sen}(v-v')}{\operatorname{sen}(\eta+v'-v)} \quad (3.32)$$

Estamos agora aptos a usar o método do espalhamento inverso. Inicialmente observemos que o operador de vértice definido na equação (3.26) quando aplicado ao vetor coluna $e_i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ é triangular superior. Então o estado $|\Omega_0\rangle$ definido abaixo é o estado referência e autovetor dos operadores A e D e da matriz de transferência

$$|\Omega_0\rangle = e_1 \otimes e_2 \otimes \dots \otimes e_N \quad (3.33)$$

$$A|\Omega_0\rangle = a^N |\Omega_0\rangle \quad (3.34a)$$

$$D|\Omega_0\rangle = c^N |\Omega_0\rangle \quad (3.34b)$$

$$T|\Omega_0\rangle = (a^N + c^N) |\Omega_0\rangle \quad (3.35)$$

Utilizando os resultados obtidos acima na equação (3.7) podemos escrever as seguintes relações de "comutação" para os operadores da matriz de monodromia

$$[A(\sigma), A(\sigma')] = [B(\sigma), B(\sigma')] = [C(\sigma), C(\sigma')] = [D(\sigma), D(\sigma')] = 0 \quad (3.36a)$$

$$A(\sigma) B(\sigma') = \frac{\text{sen}(\eta + \sigma' - \sigma)}{\text{sen}(\sigma - \sigma')} B(\sigma') A(\sigma) - \frac{\text{sen} \eta}{\text{sen}(\sigma - \sigma')} B(\sigma) A(\sigma') \quad (3.36b)$$

$$D(\sigma) B(\sigma') = -\frac{\text{sen}(\eta + \sigma - \sigma')}{\text{sen}(\sigma - \sigma')} + \frac{\text{sen} \eta}{\text{sen}(\sigma - \sigma')} B(\sigma) D(\sigma') \quad (3.36c)$$

Definindo o estado

$$|\sigma_1, \dots, \sigma_n\rangle = \prod_{i=1}^n B(\sigma_i) |\Omega_0\rangle \quad (3.37)$$

onde $n=1, \dots, 2N$ (no seis vértices esse índice vai somente até N).

Ele será autovetor da matriz de transferência se a seguinte condição estiver satisfeita

$$\frac{\cos(\eta + \sigma_i)}{\cos(\eta - \sigma_i)} = (-1)^{n-1} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{\text{sen}(\eta + \sigma_i - \sigma_j)}{\text{sen}(\eta + \sigma_j - \sigma_i)} \quad (3.38)$$

Desse modo temos

$$T|\sigma_1, \dots, \sigma_n\rangle = \Lambda(\sigma; \sigma_1, \dots, \sigma_n) |\sigma_1, \dots, \sigma_n\rangle \quad (3.39)$$

com

$$\Lambda(\sigma; \sigma_1, \dots, \sigma_n) = a^N \prod_{i=1}^n \lambda_i + c^N \prod_{i=1}^n \mu_i \quad (3.40)$$

onde $\lambda_i = \frac{\text{sen}(\eta + \sigma_i - \sigma)}{\text{sen}(\sigma - \sigma_i)}$ e $\mu_i = \frac{\text{sen}(\eta + \sigma - \sigma_i)}{\text{sen}(\sigma_i - \sigma)}$

Queremos agora resolver a equação (3.38) no limite em que n e N vão a infinito. Na fase desordenada η e v são reais e

os v_i são imaginários puros (os quais passaremos a escrever explicitamente $v_i = i\beta_i$, com β_i real). Guiados pelos trabalhos de Yang e Yang^{(70) e (71)} sabemos que o conjunto de valores assumidos pelos β_i se tornam densos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\beta') d\beta' = \frac{n}{N}, \quad \text{fixo } (n \in \mathbb{N} \rightarrow \infty) \quad (3.41)$$

Retornando à equação (3.38) definimos as seguintes funções $K(\beta_i)$ e $\Theta(\beta_i)$ dos valores ainda discretos dos β_i

$$e^{iK(\beta_i)} = \frac{\cos(\eta + i\beta_i)}{\cos(\eta - i\beta_i)} \quad (3.42a)$$

$$e^{i\Theta(\beta_i - \beta_j)} = \frac{\text{sen}(\eta + i\beta_i - i\beta_j)}{\text{sen}(\eta + i\beta_j - i\beta_i)} \quad (3.42b)$$

Tomando o logaritmo da expressão resultante encontramos

$$NK(\beta_i) - \sum_{j=1}^n \Theta(\beta_i - \beta_j) = \pi(2i - n - 1), \quad i = 1, \dots, n \quad (3.43)$$

onde escolhemos o ramo do logaritmo de maneira a deixar a distribuição dos valores dos β_i simétrica (o i no 2º membro da equação é índice).

No contínuo $\beta_i \rightarrow \beta$, $i \rightarrow N$ $\int_{-\infty}^{\beta} \rho(\beta') d\beta'$ e a expressão pode ser reescrita

$$NK(\beta) - \int_{-\infty}^{\infty} \Theta(\beta - \beta') N \rho(\beta') d\beta' = 2\pi N \int_{-\infty}^{\beta} \rho(\beta') d\beta' - (n+1)\pi \quad (3.44)$$

Derivando parcialmente com relação a β a equação acima obtemos:

$$\frac{\partial K(\beta)}{\partial \beta} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Theta(\beta-\beta')}{\partial \beta} \rho(\beta') d\beta' = 2\pi \rho(\beta) \quad (3.45)$$

Das equações (3.42a) e (3.42b) temos:

$$\frac{\partial K(\beta)}{\partial \beta} = \frac{-2 \operatorname{sen}(2\eta)}{\cos(2\eta) + \operatorname{ch} 2\beta} \quad (3.46a)$$

e

$$\frac{\partial \Theta(\beta-\beta')}{\partial \beta} = \frac{2 \operatorname{sen}(2\eta)}{\operatorname{ch}[2(\beta-\beta')] - \cos 2\eta} \quad (3.46b)$$

Substituindo-as em (3.45) obtemos a seguinte equação integral para $\rho(\beta)$

$$\frac{-2 \operatorname{sen}(2\eta)}{\cos(2\eta) + \operatorname{ch}(2\beta)} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2 \operatorname{sen}(2\eta)}{\operatorname{ch}[2(\beta-\beta')] - \cos(2\eta)} \rho(\beta') d\beta' = 2\pi \rho(\beta) \quad (3.47)$$

Podemos resolver a equação acima por transformada de Fourier. Seja $f(x)$ a função transformada de $\rho(\beta)$

$$\rho(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta x} f(x) dx \quad (3.48)$$

Substituindo (3.48) em (3.47) e fazendo uso da identidade de abaixo (para a integração em β' no 2º termo da expressão (3.47)):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\alpha \gamma}}{\operatorname{ch} \alpha - \cos \mu} d\alpha = \frac{2\pi}{\operatorname{sen} \mu} \frac{\operatorname{sh}[(\pi-\mu)\gamma]}{\operatorname{sh}(\pi\gamma)}, \quad 0 < \operatorname{Re} \mu \leq \pi \quad (3.49)$$

Obtemos

$$\frac{-\operatorname{sen}(2\eta)}{\cos(2\eta) + \operatorname{ch}(2\beta)} = \frac{\pi}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta x} f(x) \left\{ 1 + \frac{\operatorname{sh}[(\pi-2\eta)\frac{x}{2}]}{\operatorname{sh}(\frac{\pi x}{2})} \right\} dx \quad (3.50)$$

Chamando $g(x) = \pi f(x) \left\{ 1 + \frac{\operatorname{sh}[(\pi-2\eta)\frac{x}{2}]}{\operatorname{sh}(\frac{\pi x}{2})} \right\}$ teremos

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\beta x} \left[\frac{-\operatorname{sen}(2\eta)}{\cos(2\eta) + \operatorname{ch}(2\beta)} \right] d\beta \quad (3.51)$$

Utilizando novamente a equação (3.49) calculamos $g(x)$ e, por conseguinte, $f(x)$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\operatorname{ch}\left[\frac{(\pi-\eta)x}{2}\right]}{\operatorname{ch}\left(\frac{\eta x}{2}\right)} \quad (3.52)$$

e, daí finalmente a densidade de estados

$$\rho(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{ch}\left[\frac{(\pi-\eta)x}{2}\right]}{\operatorname{ch}\left(\frac{\eta x}{2}\right)} e^{i\beta x} dx \quad (3.53)$$

Uma vez obtida a densidade de estados devemos investigar na expressão dos autovalores (equação (3.40)) qual dos dois termos é o dominante

$$\left| \frac{a_{\lambda j}}{c_{\mu j}} \right| = \sqrt{\frac{\frac{\operatorname{ch}^2 \beta_j}{\cos^2(\eta-\nu)} - 1}{\frac{\operatorname{ch}^2 \beta_j}{\cos^2(\eta+\nu)} - 1}} \geq 1 \quad \text{se } \nu \geq 0$$

uma vez que

$$\left| \frac{\cos(\eta-\nu)}{\cos(\eta+\nu)} \right| = \left| \frac{1 + \operatorname{tg} \nu \operatorname{tg} \eta}{1 - \operatorname{tg} \nu \operatorname{tg} \eta} \right| \geq 1 \quad \text{se } \nu \leq 0$$

Portanto, se $\nu > 0$ o primeiro termo da equação (3.40) é dominante e se $\nu < 0$ o segundo termo é que é dominante. Desse modo o logaritmo do maior autovalor será

$$\ln \Lambda = N \ln a + \sum_{i=1}^n \ln \lambda(\beta_i) , \text{ se } \nu > 0 \quad (3.54a)$$

$$\ln \Lambda = N \ln c + \sum_{i=1}^n \ln \mu(\beta_i) , \text{ se } \nu < 0 \quad (3.54b)$$

Das expressões acima vemos no limite termodinâmico a energia livre por vértice na fase desordenada será dada por

$$-\beta F = \ln a + \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\beta) \ln \lambda(\beta) d\beta , \text{ se } \nu > 0 \quad (3.55a)$$

$$-\beta F = \ln c + \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\beta) \ln \mu(\beta) d\beta , \text{ se } \nu < 0 \quad (3.55b)$$

onde $\lambda(\beta) = \frac{\text{sen}(\eta - \nu + i\beta)}{\text{sen}(\nu - i\beta)}$ e $\mu(\beta) = \frac{\text{sen}(\eta + \nu - i\beta)}{\text{sen}(i\beta - \nu)}$

Se substituirmos a expressão de $\rho(\beta)$ (equação (3.53)) em (3.55) ficaremos com uma integral dupla nas variáveis x e β . A integral em β pode ser realizada via a seguinte identidade:

$$\ln \left[\text{sen} \left(\frac{\pi u}{2} \right) \right] = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\text{ch} \left[\frac{\pi y(u-1)}{2} \right] - 1}{\text{sh} \left(\frac{\pi y}{2} \right)} \right] \frac{dy}{y} , \text{ se } 0 < \text{Re} \left(\frac{\pi u}{2} \right) < \pi \quad (3.56)$$

Como resultado final obtemos a energia livre por vértice da fase desordenada:

$$-\beta F = \ln a + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x} \frac{\text{sh}[2x(\pi-\eta)] \text{sh}[x(\eta-2\sigma)]}{\text{sh}(\pi x) \text{ch}(\eta x)}, \quad \sigma > 0 \quad (3.57a)$$

$$-\beta F = \ln c + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x} \frac{\text{sh}[2x(\pi-\eta)] \text{sh}[x(\eta+2\sigma)]}{\text{sh}(\pi x) \text{ch}(\eta x)}, \quad \sigma < 0 \quad (3.57b)$$

A obtenção da energia livre de fase ordenada é mais simples uma vez que, como veremos, ela é ferroelétrica congelada.

Considere o regime em que $v = \pi/2 + i\sigma$, $\eta = \pi + i\xi$ com $|\sigma| > |\xi|$, $\xi < 0$ e $\sigma < 0$. Então de (3.31) todos os pesos de Boltzman são positivos. Fazendo, neste regime, a mesma análise anterior sobre os termos dominantes na equação (3.40), encontramos que $\left| \frac{a\lambda_i}{c\mu_i} \right| > 1$, $|\lambda_i| < 1$ e $|\mu_i| > 1$. Ora, a primeira desigualdade nos diz que o termo dominante é o primeiro e que podemos, no limite termodinâmico, desprezar o segundo; a segunda desigualdade, entretanto, nos diz que quanto mais λ 's forem introduzidos tanto menor será o autovalor e portanto, a situação em que ele é máximo corresponde àquela em que não há nenhum λ , ou seja, o autovetor é o estado referência definido na equação (3.33). Dessa maneira o sistema se ordena numa configuração em que todos os vértices da rede são do tipo a.

$$-\beta F = \ln a \quad (3.58a)$$

Tomemos agora o regime em que $v = -\pi/2 + i\sigma$, $\eta = \pi + i\xi$ com $|\sigma| > |\xi|$, $\xi < 0$ e $\sigma > 0$. Neste caso teremos $\left| \frac{a\lambda_i}{c\mu_i} \right| < 1$, $|\lambda_i| > 1$ e $|\mu_i| < 1$. O termo dominante é o segundo porém os μ 's são menores que um e o

sistema congela com todos os vértices iguais ao tipo C.

$$-\beta F = \ln c \quad (3.58b)$$

3.3.3. O diagrama de fases

Inicialmente vamos fixar a normalização dos vértices pela condição $b=ac$ e atribuir energias ϵ_1, ϵ_2 e ϵ_3 aos vértices a, c e d, respectivamente. Desse modo, teremos

$$a = e^{-\beta \epsilon_1} = \frac{-\cos \nu}{\cos(\eta - \nu)} \quad (3.59a)$$

$$c = e^{-\beta \epsilon_2} = \frac{-\cos \nu}{\cos(\eta + \nu)} \quad (3.59b)$$

$$b = e^{-\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)} = \frac{\cos^2 \nu}{\cos(\eta + \nu) \cos(\nu - \eta)} \quad (3.59c)$$

$$d = e^{-\beta \epsilon_3} = \frac{\cos \nu \operatorname{sen} \eta \sqrt{-2 \cos \eta}}{\cos(\nu + \eta) \cos(\nu - \eta)} \quad (3.59d)$$

O parâmetro $\Delta = -\cos \eta$ (ver equação (3.30b)) controla a transição. Quando $\Delta = 1$ ($\eta = \pi$) o modelo sofre uma transição de fase de primeira ordem (no apêndice A calculamos o calor latente) da fase desordenada para uma fase ferroelétrica congelada.

Em termos das variáveis naturais ϵ_1 e ϵ_2 apresentamos na figura 24 o diagrama de fases. A curva $\eta = \pi$ é crítica. As regiões IV são não físicas ($d < 0$). As regiões II e II* são desordena -

das e III e III* são ordenadas. A região I não exibe transição de fase.

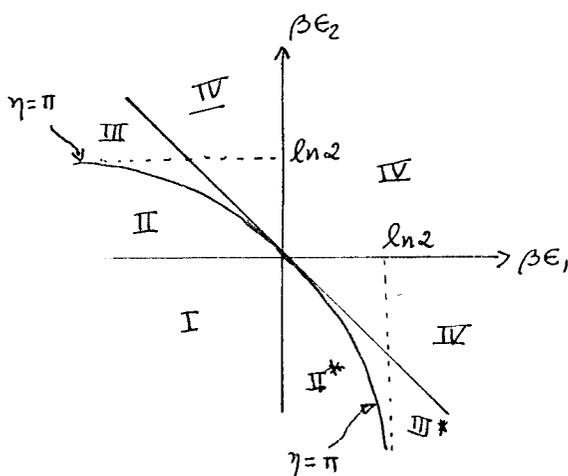


Fig.24 - Diagrama de fases nas variáveis $\beta\epsilon_2$ e $\beta\epsilon_1$. A curva crítica é $e^{\beta\epsilon_1} + e^{\beta\epsilon_2} = 2$.

As trajetórias termodinâmicas são retas que passam pela origem. A altas temperaturas estamos na origem do sistema de coordenadas $(\beta\epsilon_2, \beta\epsilon_1) = (0, 0)$ e, à medida que a temperatura abaixa, um modelo que sofre transição evolui ao longo de uma reta que começa na origem e desemboca nas regiões II ou II* e muda de fase ao cruzar a linha crítica.

Na Figura 25 mapeamos a fase desordenada nas variáveis η e v .

Dado um modelo, isto é, fixados ϵ_1 e ϵ_2 , a trajetória termodinâmica é dada pela expressão:

$$\frac{-\cos v}{\cos(\eta - v)} = \left[\frac{-\cos v}{\cos(\eta + v)} \right]^\alpha \quad (3.60)$$

onde $\alpha = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_2}$

A altas temperaturas o sistema se encontra originalmen

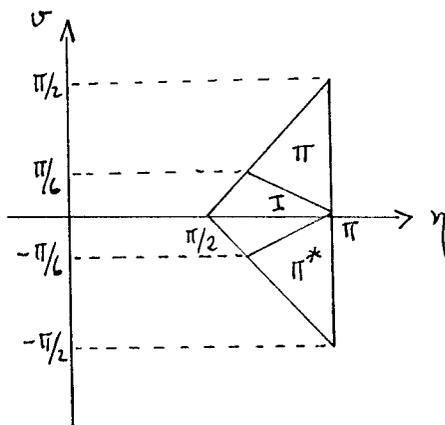


Fig.25 - As fases desordenadas nas variáveis de fatorização η e v .

te em $\eta = \pi$ e $v=0$. Se o modelo sofre transição então, à medida que a temperatura abaixa ela faz uma curva na região II (II^{*}) e desemboca no vértice $v=\pi/2, \eta = \pi$ ($v=-\pi/2, \eta = \pi$) e muda de fase. Se o modelo não exhibe transição, então ele evolui pela região I, atingindo o ponto $v=0$ e $\eta = \pi/2$ em $T=0$.

CAPÍTULO IV

SOLUÇÃO DE UM MODELO DE OITO VÉRTICES DE FÉRMIONS LIVRES

4.1. Preâmbulo

Na década de 80 tem-se envidado um considerável esforço no levantamento e classificação dos modelos exatamente solúveis em duas dimensões. Esse esforço se consubstancia tanto no contexto de faces de spins ⁽⁷²⁾ quanto no contexto de vértices ⁽⁷³⁾ e ⁽⁷⁴⁾. Sob este último prisma, Sogo et al ⁽⁷³⁾ fizeram um levantamento bastante amplo sobre modelos que envolvem somente dois estados nas ligações e que têm seis, sete ou oito configurações de vértices permitidos. Neste Capítulo estudaremos um desses modelos fatorizáveis que Sogo et al batizaram de oito vértices tipo II (o tipo I é, basicamente, o oito vértices simétrico resolvido por Baxter). Trata-se de um modelo que obedece à chamada condição de férmions livres e que, portanto, pode ser resolvido exatamente pelo método do Pfaffiano ⁽⁷⁵⁾. No que tange porém à metodologia introduzida no Capítulo II, sua solubilidade está aparentemente comprometida pela ausência da chamada relação de simetria (invariância da função de partição por rotação de 90° da rede). Propomos, então, uma relação funcional substitutiva que nos habilita a resolver o problema. No final do capítulo mostramos ser este modelo de vértices equivalente a um modelo de Ising definido numa rede cuja forma lembra a bandeira inglesa "Union-Jack". Analisamos ainda os comportamentos ferro e antiferro magnéticos do modelo e as situações em que a rede Union-Jack se de genera na rede quadrada.

4.2. O modelo de oito vértices de férmions livres

4.2.1. Definição do modelo

Sogo et al⁽⁷³⁾ estudaram as equações de fatorização de um modelo de oito vértices cujas configurações permitidas são as mostradas na figura 26 abaixo:

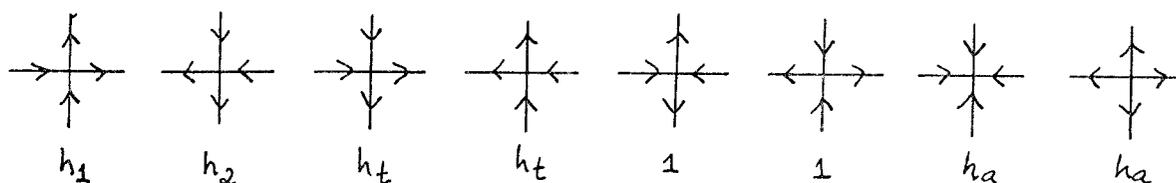


Fig.26 - Os vértices do modelo de oito vértices tipo II e os respectivos pesos de Boltzman associados. O chamado vértice de reflexão foi normalizado a um.

Eles obtiveram a seguinte parametrização para os pesos de Boltzman

$$h_1 = \frac{cn(\theta, \kappa)}{dn(\theta, \kappa)} + \frac{\gamma \epsilon}{\sqrt{1-\gamma^2}} sn(\theta, \kappa), \quad \epsilon = \pm 1 \quad (4.1a)$$

$$h_2 = \frac{cn(\theta, \kappa)}{dn(\theta, \kappa)} - \frac{\gamma \epsilon}{\sqrt{1-\gamma^2}} sn(\theta, \kappa) \quad (4.1b)$$

$$h_t = \frac{\epsilon sn(\theta, \kappa)}{\sqrt{1-\gamma^2}} \quad (4.1c)$$

$$h_a = \delta \kappa sn(\theta, \kappa) \frac{cn(\theta, \kappa)}{dn(\theta, \kappa)}, \quad \delta = \pm 1 \quad (4.1d)$$

$$h_r = 1 \quad (4.1e)$$

onde parecem as funções elípticas de Jacobi como função do parâmetro espectral θ e do módulo κ e γ é um parâmetro adicional. Temos, portanto, três parâmetros e quatro pesos de Boltzman e concluímos

que o modelo não é solúvel no seu aspecto geral (isto é, quando os quatro pesos são independentes). A condição de solubilidade é a chamada condição de fêrmions livres.

$$h_1 h_2 + h_t^2 = 1 + h_a^2 \quad (4.2)$$

Na sua forma já parametrizada (equação (4.1)) a condição acima está identicamente satisfeita.

Face às equações (4.1) vemos que se trata de um modelo de vértices dependente da temperatura* (muito pouco estudados na literatura).

Ainda uma última palavrinha sobre a parametrização (4.1). Reportando-nos ao trabalho de Sogo et al⁽⁷³⁾ constataremos a presença de um fator \sqrt{c} e $(\sqrt{c})^{-1}$ (onde c é uma constante) multiplicando o sétimo e oitavo vértices da figura 26, respectivamente. Uma vez que estes vértices comparecem sempre aos pares (na rede quadrada, com condições toroidais de contorno) é absolutamente irrelevante a presença destes fatores.

4.2.2. Sobre a inexistência da relação de simetria

A função de partição é, evidentemente, uma função do parâmetro espectral θ e é também invariante por uma rotação de 90° da rede. Com essa rotação os vértices trocam uns com os outros.

* Dizemos que um modelo de vértices é dependente da temperatura quando a pelo menos uma das energias dos vértices não se pode arbitrariamente fixar o valor pois ela é dependente da temperatura. A condição (4.2) é típica. Usualmente, no afã de se obter um modelo independente da temperatura, impõem-se mais algumas restrições (por exemplo, $h_1 h_2 = h_a^2$ e $h_t = 1$) analisando-se, portanto, o modelo num sub-espaço do espaço de parâmetros.

Ora, se pudermos simular essa troca simplesmente procurando um novo parâmetro espectral $\bar{\theta}$ (usualmente $\bar{\theta} = \pi - \theta$) que produza o mesmo efeito da rotação, teremos estabelecido uma equação funcional para a função de partição: a relação de simetria

$$Z(\theta) = Z(\bar{\theta}) \quad (4.3)$$

Nos vértices da figura 26 se fizermos uma rotação (horária) de 90° , o primeiro vértice vai no terceiro e o segundo no quarto. É, entretanto, impossível encontrar um parâmetro espectral que leve, simultaneamente, os pesos h_1 e h_2 no peso h_{\pm} . O modelo de oito vértices tipo II não satisfaz a relação de simetria.

Situação semelhante ocorre também no chamado modelo de Belavin⁽³⁷⁾. Trata-se de um modelo de vértices com simetria $Z(N) \times Z(N)$, fatorizável e que, para $N > 2^*$, não tem a propriedade da relação de simetria.

Belavin e Zamolodchikov⁽⁷⁶⁾ propuseram então, a partir das equações de fatorização (equação (2.26)), uma relação funcional alternativa para a função de partição do modelo. De maneira resumida os resultados por eles obtidos são os seguintes: se for possível encontrar um número η tal que

$$\sum_{i_1, j_1=0}^{N-1} S_{k_1 i_1}^{j_1 k_2} (2\eta) \psi_{j_1}^{i_1} = 0, \quad k_1, k_2 = 0, \dots, N-1 \quad (4.4)$$

tem como única solução $\psi_{j_1}^{i_1} \sim \delta_{j_1}^{i_1}$, então

$$\sum_{k_1, k_2=0}^{N-1} S_{i_1 k_1}^{k_2 j_1} (\eta - \theta) S_{i_2 k_2}^{k_1 j_2} (\eta + \theta) = \tilde{\rho}(\theta) \delta_{i_2}^{j_1} \delta_{i_1}^{j_2}, \quad \tilde{\rho}(\theta) = \tilde{\rho}(-\theta) \quad (4.5)$$

* Para $N=2$, trata-se do próprio modelo de oito vértices estudado por Baxter.

satisfaz a equação de fatorização e implica, a nível de função de partição por vértice $k(\theta)$, a seguinte relação funcional

$$k(\eta-\theta) k(\eta+\theta) = \tilde{\rho}(\theta) \quad (4.6)$$

Naturalmente, a primeira idéia que nos ocorreu foi a da aplicabilidade ou não desses resultados para o modelo de oito vértices tipo II. Para tanto, façamos inicialmente as seguintes identificações

$$\begin{aligned} S_{00}^{00}(\theta) &= h_1(\theta) \\ S_{11}^{11}(\theta) &= h_2(\theta) \\ S_{10}^{01}(\theta) &= S_{01}^{10}(\theta) = 1 \\ S_{01}^{01}(\theta) &= S_{10}^{10}(\theta) = h_t(\theta) \\ S_{11}^{00}(\theta) &= S_{00}^{11}(\theta) = h_a(\theta) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Substituindo-as em (4.4) obtemos

$$h_1(2\eta) \psi_0^0 + \psi_1^1 = 0 \quad (4.8a)$$

$$\psi_0^0 + h_2(2\eta) \psi_1^1 = 0 \quad (4.8b)$$

$$h_t(2\eta) \psi_0^1 + h_a(2\eta) \psi_1^0 = 0 \quad (4.8c)$$

$$h_a(2\eta) \psi_0^1 + h_t(2\eta) \psi_1^0 = 0 \quad (4.8d)$$

As equações (IV.8a e 8b) formam um sistema linear homogêneo para as variáveis ψ_0^0 e ψ_1^1 (idem para as equações 4.8c e d para as variáveis ψ_0^1 e ψ_1^0). Para que a solução não seja trivial (descartada pois necessitamos que $\psi_{j1}^{i1} \sim \delta_{j1}^{i1}$) devemos ter o seu determinante identicamente nulo, ou seja,

$$h_1(2\eta)h_2(2\eta) - 1 = 0 \quad (4.9)$$

Ora, mas se isto acontecer, então da condição de fêr - mions livres (equação (4.2)) teremos, obrigatoriamente

$$h_t^2(2\eta) - h_a^2(2\eta) = 0 \quad (4.10)$$

que é exatamente a condição para que ψ_0^1 e ψ_1^0 sejam diferentes de zero!

Conclusão: $\psi_{j_1}^{i_1} \sim \delta_{j_1}^{i_1}$ não é solução única, existe outra em que todos os elementos $\psi_{j_1}^{i_1}$ são diferentes de zero. Logo a relação (4.5) não pode ser obtida e, conseqüentemente, nem a relação (4.6).

Faz-se necessário, portanto, a formulação de uma nova relação funcional para a função de partição por vértices. Este exatamente é o assunto que será objeto de estudos na próxima secção.

4.2.3. Proposta de uma nova relação funcional

Retornando às equações (4.1), chamemos

$$\sqrt{1-\gamma^2} = \operatorname{sn}(\xi, \kappa) \quad (4.11)$$

É muito conveniente* agora mudar todas as funções elípticas de Jacobi do seu módulo original k para um novo módulo $\bar{k} = \frac{\epsilon k}{k'}$

*Os regimes do módulo original k , para que todos os pesos de Boltzman sejam reais positivos, são os seguintes: fase desordenada - $1 \leq k < \infty$, fase ordenada - $0 \leq ik < \infty$ (k imaginário puro negativo e $\epsilon = \delta = 1$). As expansões em série das funções elípticas (que necessitaremos mais adiante) são escritas, usualmente, para k real entre zero e um, daí a conveniência da mudança de módulo (4.12).

Com essa mudança de módulo, os pesos de Boltzman associados aos vértices podem ser escritos (fazendo $\epsilon = \delta = 1$)

$$h_t = \text{cn}(\mu, \bar{k}) + \frac{\text{cn}(\eta, \bar{k}) \text{sn}(\mu, \bar{k})}{\text{sn}(\eta, \bar{k}) \text{dn}(\mu, \bar{k})} \quad (4.14a)$$

$$h_2 = \text{cn}(\mu, \bar{k}) - \frac{\text{cn}(\eta, \bar{k}) \text{sn}(\mu, \bar{k})}{\text{sn}(\eta, \bar{k}) \text{dn}(\mu, \bar{k})} \quad (4.14b)$$

$$h_t = \frac{\text{dn}(\eta, \bar{k}) \text{sn}(\mu, \bar{k})}{\text{sn}(\eta, \bar{k}) \text{dn}(\mu, \bar{k})} \quad (4.14c)$$

$$h_a = \frac{-i \bar{k} \text{sn}(\mu, \bar{k}) \text{cn}(\mu, \bar{k})}{\text{dn}(\mu, \bar{k})} \quad (4.14d)$$

$$h_r = 1 \quad (4.14e)$$

onde $\mu = k' \theta$, $\eta = k' \xi$, $k' = \sqrt{1 - k^2}$

Na fase ordenada teremos $0 \leq \bar{k} < 1$; $\mu = iv$, $v > 0$; $\eta = i\zeta$, $\zeta > 0$. Com estas condições garantimos que h_a , h_t e h_1 são reais positivos uma vez que as funções cn e dn no eixo imaginário puro são funções reais positivas (e pares) e a função sn (que é ímpar) no eixo imaginário puro positivo assume valores imaginário puro positivos. As condições que garantem ser h_2 real positivo são: $0 < v < \zeta$ e $0 < \zeta < \bar{K}'$, onde $\bar{K}' = K(\bar{k}')$ é a integral elíptica completa de primeira espécie do módulo complementar $\bar{k}' = \sqrt{1 - k^2}$. Para ver isso explicitemos as variáveis e a condição de que h_2 é positivo

$$\text{cn}(i v) > \frac{\text{cn}(i \zeta) \text{sn}(i v)}{\text{dn}(i v) \text{sn}(i \zeta)} \quad (4.15)$$

Se escrevermos $v = \alpha \zeta$ ($\alpha < 1$, uma vez que $v < \zeta$) e fizermos o

limite $\zeta \rightarrow 0$ então o primeiro membro da desigualdade (4.15) vai a um, o termo $\frac{\text{cn}(i\zeta)}{\text{dn}(i\zeta)}$ do segundo membro vai a um e $\frac{\text{sn}(i\nu)}{\text{sn}(i\zeta)} \rightarrow \frac{\nu}{\zeta} = \alpha < 1$ e a inequação (4.15) está satisfeita. Suponha agora que ν possa ser maior do \bar{K}' , isto é, $\nu = \bar{K}' + \varepsilon$ ($\varepsilon > 0$, arbitrário), então ζ também será maior, isto é, $\zeta = \bar{K}' + \delta$ ($\delta > \varepsilon$). Utilizando as propriedades das funções elípticas (apêndice B) temos que o primeiro membro da equação (4.15) será: $\text{cn}(i\bar{K}' + i\varepsilon) = \frac{-i \text{dn}(i\varepsilon)}{\bar{K} \text{sn}(i\varepsilon)} < 0$. O segundo membro será igual a $\frac{\text{dn}(i\delta)}{\bar{K} \text{cn}(i\varepsilon)} > 0$ e a relação (4.15) deixa de ser válida. Logo ν não pode ser maior do que \bar{K}' e tampouco ζ .

Feitas estas transformações e análises voltemos à questão central desta secção, isto é, o problema da relação funcional que substitua a relação de simetria.

Em primeiro lugar, observemos que as equações de fatorização (2.26) estão definidas a menos de uma normalização $\lambda(\theta)$, isto é,

$$S' \begin{matrix} \delta_1 & \delta_2 \\ i_1 & i_2 \end{matrix} (\theta) = \lambda(\theta) S \begin{matrix} \delta_1 & \delta_2 \\ i_1 & i_2 \end{matrix} (\theta) \quad \text{também a satisfaz.}$$

Suponha que exista um valor $\theta = \bar{\theta}$ tal que

$$S' \begin{matrix} \delta_1 & \delta_2 \\ i_1 & i_2 \end{matrix} (\bar{\theta}) = \delta_{i_1}^{i_2} \delta_{\delta_1}^{\delta_2} \quad (4.16)$$

Então, se colocarmos $\theta = \bar{\theta}$ nas equações de fatorização, para que elas estejam satisfeitas basta apenas que a relação abaixo também esteja.

$$\sum_{k_1, k_2=0}^{q-1} S' \begin{matrix} i_2 & k_2 \\ k_1 & i_1 \end{matrix} (\theta + \bar{\theta}) S \begin{matrix} \delta_1 & \delta_2 \\ k_1 & k_2 \end{matrix} (\theta) = \rho'(\theta) \delta_{i_1}^{\delta_2} \delta_{i_2}^{\delta_1} \quad (4.17)$$

E, retornando aos vértices originais, devemos ter

$$\sum_{k_1, k_2=0}^{q-1} S \begin{matrix} i_2 & k_2 \\ k_1 & i_1 \end{matrix} (\theta + \bar{\theta}) S \begin{matrix} \delta_1 & \delta_2 \\ k_1 & k_2 \end{matrix} (\theta) = \bar{\rho}(\theta) \delta_{i_1}^{\delta_2} \delta_{i_2}^{\delta_1} \quad (4.18)$$

onde, evidentemente, $\bar{\rho}(\theta) = \rho'(\theta) / \lambda(\theta) \lambda(\theta + \bar{\theta})$.

No caso do modelo de oito vértices tipo II se tomarmos

$\lambda(\mu) = 1 / \text{cn}(\mu, \bar{\kappa})$ e $\bar{\mu} = i\bar{\kappa}'$ (polo das três funções: sn, cn e dn) teremos: $h_1'(\bar{\mu}) = \lambda(\bar{\mu})h_1(\bar{\mu}) = 1$, $h_2'(\bar{\mu}) = 1$, $h_t'(\bar{\mu}) = 0$, $h_r'(\bar{\mu}) = 0$. Para h_a' temos uma singularidade removível:

$$h_a'(\bar{\mu}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{-i\bar{\kappa} \text{sn}(i\bar{\kappa}' - i\varepsilon)}{\text{dn}(i\bar{\kappa}' - i\varepsilon)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\text{cn}(i\varepsilon)} = 1$$

Portanto, a condição (4.16) está satisfeita.

Não é difícil verificar que o oito vértices tipo II também satisfaz as equações (4.18)

$$\sum_{\kappa_1, \kappa_2=0}^1 S_{\kappa_1 \kappa_2}^{i_2 \kappa_2}(\mu + i\bar{\kappa}') S_{\kappa_1 \kappa_2}^{j_1 j_2}(\mu) = \bar{\rho}(\mu) \delta_{i_1}^{j_2} \delta_{i_2}^{j_1} \quad (4.19)$$

onde

$$\bar{\rho}(\mu) = \frac{-i \text{dn} \mu}{\bar{\kappa} \text{sn} \mu \text{cn} \mu} \left(\frac{\text{sn}^2 \eta - \text{sn}^2 \mu}{\text{sn}^2 \eta \text{dn}^2 \mu} \right) \quad (4.20)$$

Necessitaríamos agora demonstrar que a propriedade local (4.19) do modelo se estende ao nível de função de partição por vértice. Na concretização de tal objetivo, deveríamos inicialmente mostrar que as matrizes de transferência $T(\mu)$ e $T(\mu + i\bar{\kappa}')$ comutam e que $T(\mu)T(\mu + i\bar{\kappa}') = \bar{\rho}(\mu)I$ (I é a matriz identidade). Esse é o procedimento usual na literatura ⁽⁵²⁾. Nossa proposta, porém, se reveste de algumas peculiaridades que inviabilizam este procedimento canônico. O motivo é bastante simples: muito embora as equações de fatorização estejam satisfeitas elas não implicam na comutação das matrizes de transferência porque a matriz que obedece à equação (4.16) tem determinante igual a zero, de sorte que não existe a inversa!

Apesar disso, propomos a seguinte relação funcional para a função de partição por vértice

$$k(u) k(u + i\bar{k}') = \bar{\rho}(u) \quad (4.21)$$

Creemos na veracidade de (4.21) por dois motivos: após demonstrarmos a equivalência do modelo de oito vértices tipo II com o modelo de Ising definido na rede Union-Jack vamos verificar que, a nível de função de partição por spin, a relação funcional que propusemos é a própria relação de simetria!; além disso, quando a rede Union-Jack se degenera na rede quadrada a equação (4.21) e a relação de inversão reproduzem as relações funcionais anteriores, sobejamente conhecidas para a rede quadrada. Entretanto, seria interessante se obter uma demonstração rigorosa e direta de que a equação (4.19) implica na relação (4.21).

4.2.4. Solução do modelo

A partir da parametrização (4.14) e das equações (4.21) e (2.29) podemos escrever as seguintes relações funcionais para a função de partição por vértice

$$k(u) k(-u) = \frac{\operatorname{sn}^2 \eta - \operatorname{sn}^2 u}{\operatorname{sn}^2 \eta \operatorname{dn}^2 u} \quad (4.22a)$$

$$k(u) k(u + i\bar{k}') = \frac{-i}{\bar{k}} \frac{\operatorname{dn} u}{\operatorname{sn} u \operatorname{cn} u} \left(\frac{\operatorname{sn}^2 \eta - \operatorname{sn}^2 u}{\operatorname{sn}^2 \eta \operatorname{dn}^2 u} \right) \quad (4.22b)$$

Tomando o logaritmo das expressões acima obtemos a energia livre por vértice reduzida f ($f = -\beta F$)

$$f(u) + f(-u) = \ln \left[\frac{\operatorname{sn}^2 \eta - \operatorname{sn}^2 u}{\operatorname{sn}^2 \eta \operatorname{dn}^2 u} \right] \quad (4.23a)$$

$$f(u+i\bar{k}') = \ln \left[\frac{cn(u+i\bar{k}')}{cnu} \right] + f(-u) \quad (4.23b)$$

onde usamos que $cn(u+i\bar{k}') = \frac{-idnu}{\bar{k} snu}$

No apêndice C mostramos que

$$\frac{sn^2\eta - sn^2u}{sn^2\eta dn^2u} = \frac{\Theta^2(\bar{k}) \Theta(\eta-u-i\bar{k}') \Theta(\eta+u-i\bar{k}')}{\Theta^2(\eta-i\bar{k}') \Theta^2(u+\bar{k})} \quad (4.24)$$

onde as funções teta que aparecem no lado direito têm as suas propriedades e conexão com as funções elípticas apresentadas no apêndice B.

Lançando mão da expansão em série da função teta

$$\ln \Theta(u) = \ln \gamma - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2q^n \cos\left(\frac{\pi n u}{\bar{k}}\right)}{n(1-q^{2n})} \quad (4.25)$$

onde $q = e^{-\pi \bar{k}'/\bar{k}}$ e $\gamma = \prod_{n=1}^{\infty} (1-q^{2n})$

podemos escrever

$$\ln \left[\frac{sn^2\eta - sn^2u}{sn^2\eta dn^2u} \right] = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{16 q^n}{n(1-q^{2n})} \frac{\text{sen } \frac{\pi n}{2\bar{k}} (\eta+\bar{k}-i\bar{k}') \text{sen } \frac{\pi n}{2\bar{k}} (\eta-\bar{k}-i\bar{k}') \text{sen } \frac{\pi n u}{2\bar{k}}}{2\bar{k}} \quad (4.26)$$

No apêndice C mostramos que

$$\ln \left[\frac{cn(u+i\bar{k}')}{cnu} \right] = -2 \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{2q^n + (-1)^n (1+q^{2n})}{n(1-q^{2n})} \right] \frac{\text{sen}\left(\frac{\pi n i\bar{k}'}{2\bar{k}}\right) \text{sen } \frac{\pi n}{\bar{k}} \left(u+i\frac{\bar{k}'}{2}\right)}{\bar{k}} \quad (4.27)$$

Com estes resultados estamos aptos a resolver o sistema de equações funcionais (4.23a) e (4.23b) e determinar a energia livre por vértice na fase ordenada*.

Para tanto, definamos inicialmente a função $f_1(u)$

$$f(u) = f_1(u) + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n u}{\bar{k}}\right) \quad (4.28)$$

onde os coeficientes a_n não dependem de u .

Substituindo (4.28) em (4.23) teremos

$$f_1(u) + f_1(-u) = \ln \left[\frac{\operatorname{sn}^2 \eta - \operatorname{sn}^2 u}{\operatorname{sn}^2 \eta \operatorname{dn}^2 u} \right] \quad (4.29a)$$

$$f_1(u+i\bar{k}') + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left[\operatorname{sen} \frac{\pi n (u+i\bar{k}')}{\bar{k}} + \operatorname{sen} \left(\frac{\pi n u}{\bar{k}} \right) \right] = \ln \left[\frac{\operatorname{cn}(u+i\bar{k}')}{\operatorname{cn} u} \right] + f_1(-u) \quad (4.29b)$$

Fazendo uso da expansão (4.27) podemos escolher os coeficientes a_n de maneira que o segundo termo do primeiro membro de (4.29b) seja igual ao primeiro termo do segundo membro, isto é, a equação (4.29b) fica igual a

$$f_1(u+i\bar{k}') = f_1(-u) \quad (4.29c)$$

*As expansões utilizadas valem para \bar{k} entre zero e um (fase ordenada). Para \bar{k} entre um e infinito (fase desordenada) devemos retornar às equações (4.23a e b) e mudar as funções elípticas do módulo \bar{k} para o módulo $1/\bar{k}$ e determinar as novas expansões em série.

e

$$a_n = - \frac{[2q^n + (-1)^n(1+q^{2n})] \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n i \bar{k}'}{2\bar{k}}\right)}{n(1-q^{2n}) \cos\left(\frac{\pi n i \bar{k}'}{2\bar{k}}\right)} \quad (4.30)$$

Chamando

$$f_1(\mu) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n \mu}{2\bar{k}}\right) \operatorname{sen} \frac{\pi n (\mu - i \bar{k}')}{2\bar{k}} \quad (4.31)$$

onde os coeficientes b_n não dependem de μ .

Substituindo (4.31) em (4.29a) e (4.29c) segue-se que está última equação está identicamente satisfeita. Utilizando a expansão (4.26) determinamos os coeficiente b_n

$$b_n = \frac{-8q^n \operatorname{sen} \frac{\pi n (\eta + \bar{k} - i \bar{k}')}{2\bar{k}} \operatorname{sen} \frac{\pi n (\eta - \bar{k} - i \bar{k}')}{2\bar{k}}}{n(1-q^{2n}) \cos\left(\frac{\pi n i \bar{k}'}{2\bar{k}}\right)} \quad (4.32)$$

Finalmente, juntando as expressões (4.32), (4.31), (4.30) e (4.28) obtemos a energia livre por vértice na fase ordenada

$$f(\mu) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(1-q^{2n}) \cos\left(\frac{\pi n i \bar{k}'}{2\bar{k}}\right)} \left\{ [2q^n + (-1)^n(1+q^{2n})] \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n i \bar{k}'}{2\bar{k}}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n \mu}{\bar{k}}\right) + \right. \\ \left. + 8q^n \operatorname{sen} \frac{\pi n (\eta + \bar{k} - i \bar{k}')}{2\bar{k}} \operatorname{sen} \frac{\pi n (\eta - \bar{k} - i \bar{k}')}{2\bar{k}} \operatorname{sen}\left(\frac{\pi n \mu}{2\bar{k}}\right) \operatorname{sen} \frac{\pi n (\mu - i \bar{k}')}{2\bar{k}} \right\} \quad (4.33)$$

4.3. Equivalência com o modelo de Ising na rede Union-Jack

4.3.1. Mapeamento e discussão

A célula unitária que reproduz a rede Union-Jack está

mostrada na figura 27. A hamiltoniana das interações contidas na face é dada por

$$H = - \left[\frac{J}{2} \left(\delta_{\sigma_1 \sigma_2} + \delta_{\sigma_2 \sigma_3} + \delta_{\sigma_3 \sigma_4} + \delta_{\sigma_4 \sigma_1} - 4 \right) + J_1 \left(\delta_{\sigma_1 \sigma_5} + \delta_{\sigma_3 \sigma_5} - 2 \right) + \right. \\ \left. + J_2 \left(\delta_{\sigma_2 \sigma_5} + \delta_{\sigma_4 \sigma_5} - 2 \right) \right] \quad (4.34)$$

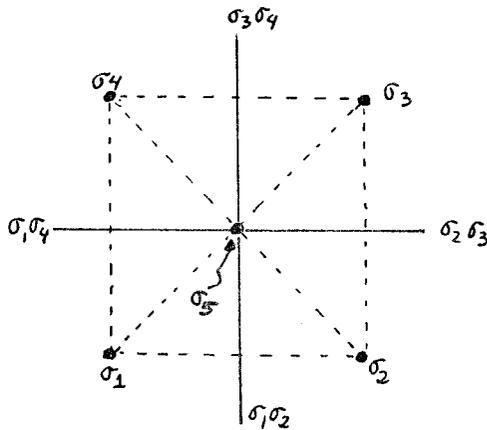


Fig.27 - Célula unitária da rede Union-Jack ($\sigma_i = \pm 1$) e o vértice associado.

Denominando os pesos de Boltzman $x = e^{-\beta J}$, $y_1 = e^{-\beta J_1}$, $y_2 = e^{-\beta J_2}$ e somando sobre o spin interno σ_5 é fácil verificar que os pesos de Boltzman da fase de spins e os pesos de Boltzman do modelo de oito vértices tipo II têm a seguinte associação

$$\lambda (1 + y_1^2 y_2^2) = cn\mu + \frac{cn\eta \operatorname{sn}\mu}{\operatorname{sn}\eta \operatorname{dn}\mu} = h_1 \quad (4.35a)$$

$$\lambda x^2 (y_1^2 + y_2^2) = cn\mu - \frac{cn\eta \operatorname{sn}\mu}{\operatorname{sn}\eta \operatorname{dn}\mu} = h_2 \quad (4.35b)$$

$$\lambda 2x y_1 y_2 = \frac{dn\eta \operatorname{sn}\mu}{\operatorname{sn}\eta \operatorname{dn}\mu} = h_t \quad (4.35c)$$

$$\lambda x y_1 (1+y_2^2) = \frac{-i\bar{k} \operatorname{sn} u \operatorname{cn} u}{\operatorname{dn} u} = h_a \quad (4.35d)$$

$$\lambda x y_2 (1+y_1^2) = 1 = h_r \quad (4.35e)$$

onde λ é uma normalização. Evidentemente os pesos faciais (lado esquerdo das equações (4.35)) satisfazem trivialmente a condição de fêrmions livres (da mesma maneira que, como já vimos, o lado direito). O modelo de Ising na rede Union-Jack é portanto equivalente do modelo de oito vértices tipo II.

Cabe aqui uma observação interessante. Na secção anterior vimos que a energia livre deve ser calculada, através das relações funcionais, em dois regimes: $0 < \bar{k} < 1$ e $1 < \bar{k} < \infty$. Logo as singularidades ocorrem em $\bar{k}=1$ e a parametrização dos pesos de Boltzman (fornecidas pelas equações de fatorização) nos permite a determinação imediata da criticalidade! (por dualidade, certamente não seria tão simples, pois a rede dual da Union-Jack é a 4-8).

O procedimento é realmente muito simples: subtraia membro a membro (4.35b) de (4.35a) e divida, também membro a membro, por (4.35c), o resultado será o seguinte

$$\frac{(1+y_1^2 y_2^2) - x^2 (y_1^2 + y_2^2)}{2 x y_1 y_2} = \frac{2 \operatorname{cn}(\eta, \bar{k})}{\operatorname{dn}(\eta, \bar{k})} \quad (4.36)$$

Mas $\operatorname{cn}(\eta, \bar{k}=1) = \operatorname{dn}(\eta, \bar{k}=1)$ e, portanto, a curva crítica do modelo de Ising na rede Union-Jack é a seguinte

$$(1+y_1^2 y_2^2) - x^2 (y_1^2 + y_2^2) = 4 x y_1 y_2 \quad (4.37)$$

Na figura 28 mostramos o diagrama de fases no caso simétrico $y_1=y_2=y$ e quando todas as interações são ferromagnéticas (x e y estão entre zero e um)

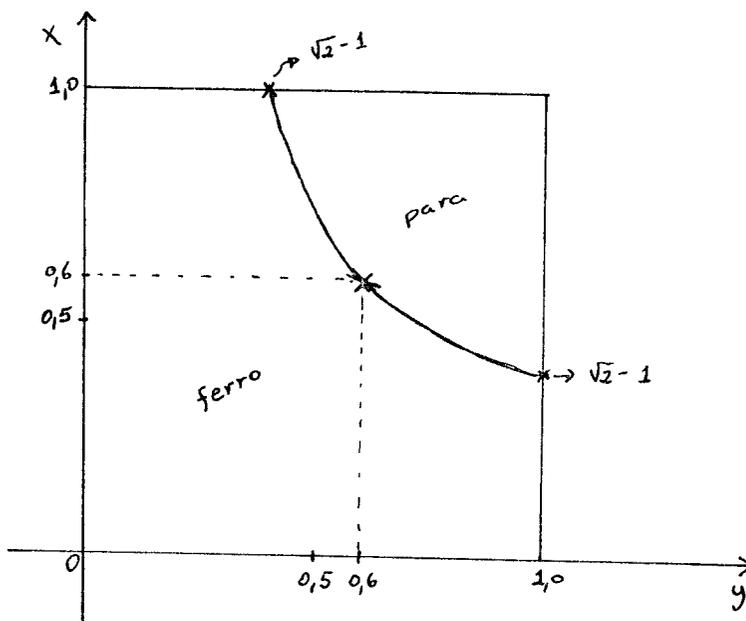


Fig.28 - Diagrama de fases do modelo de Ising na rede Union-Jack.

Nas fronteiras $x=1$ e $y=1$ o modelo se reduz ao Ising na rede quadrada. O ponto assinalado no meio corresponde àquele obtido por Utiyama⁽⁷⁸⁾ que estudou o caso completamente simétrico $x=y_1=y_2$.

O modelo de Ising na Union Jack exibirá transição de fase nas seguintes situações: x, y_1 e y_2 ferro; x ferro, y_1 e y_2 antiferro; x e y_1 antiferro; y_2 ferro; x e y_2 antiferro, y_1 ferro. As outras combinações são frustradas.

Podemos, das equação (4.35), calcular os pesos de Boltzmann do modelo de Ising

$$\frac{2y_1(u)}{1+y_1^2(u)} = \frac{dn\eta \operatorname{sn}u}{sn\eta \operatorname{dn}u} \quad (4.38a)$$

$$\frac{2y_2(u)}{1+y_2^2(u)} = \frac{dn\eta \operatorname{sn}(i\bar{k}'-u)}{sn\eta \operatorname{dn}(i\bar{k}'-u)} \quad (4.38b)$$

$$h_1(u)x(u) + \frac{h_2(u)}{x(u)} = \frac{-2i\bar{k} \sin \eta \cos u}{d\eta} \quad (4.38c)$$

Das equações acima obtêm-se as propriedades dos pesos de Boltzman x, y_1 e y_2

$$y_1(u) = -y_1(-u) \quad (4.39a)$$

$$y_2(u) = y_2(-u) \quad (4.39b)$$

$$y_1(u) = y_2(i\bar{k}' - u) \quad (4.39c)$$

$$x(u) = \frac{h_2(u)}{h_1(u)} x(-u) \quad (4.39d)$$

$$x(u) = x(i\bar{k}' - u) \quad (4.39e)$$

Se fizermos uma rotação de 90° na rede Union Jack teremos que $y_1 \leftrightarrow y_2$ e $x \leftrightarrow x$. De (4.39c) e (4.39e) vemos que isso é equivalente a fazer o parâmetro espectral ir de u para $i\bar{k}' - u$. Portanto, a função de partição por spin do modelo de Ising na rede Union Jack, k_I , obedece a relação de simetria

$$k_I(u) = k_I(i\bar{k}' - u) \quad (4.40)$$

Mais adiante veremos que a relação funcional que propusemos para o modelo de vértices levará exatamente ao resultado (4.40) para o modelo de spins.

As equações (4.38) apresentam, evidentemente, duas soluções para os pesos x, y_1 e y_2 . Em particular, observamos que os primeiros membros das equações (4.38a e b) tem necessariamente que

ser menores que um, quer as interações sejam ferro ou antiferromagnéticas (os pesos estarão entre zero e um e um e infinito, respectivamente). Desse fato segue-se que, como já vimos, na fase ordenada os parâmetros \bar{k}, μ, η assumem os seguintes valores: $0 < \bar{k} < 1$, $\mu = iv, v > 0$, $\eta = i\zeta, \zeta > 0$, $0 < \zeta < \bar{k}'$ e $\bar{k}' - v < \zeta$, ou seja a região física está contida no triângulo mostrado na figura abaixo.

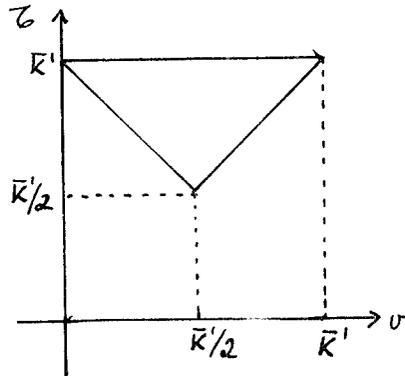


Fig.29 - O interior do triângulo corresponde à região física da fase ordenada.

Resolvendo as equações (4.38) encontramos as soluções

$$y_1^\pm(u) = \frac{\operatorname{sn} \eta \operatorname{dn} u \pm \sqrt{\operatorname{sn}^2 \eta - \operatorname{sn}^2 u}}{\operatorname{dn} \eta \operatorname{sn} u} \quad (4.41a)$$

$$y_2^\pm(u) = \frac{\operatorname{sn} \eta \operatorname{dn}(i\bar{k}' - u) \pm \sqrt{\operatorname{sn}^2 \eta - \operatorname{sn}^2(i\bar{k}' - u)}}{\operatorname{dn} \eta \operatorname{sn}(i\bar{k}' - u)} \quad (4.41b)$$

$$x^\pm(u) = \frac{-i\bar{k} \operatorname{sn}^2 \eta \operatorname{cn} u \operatorname{dn} u \pm i(1 - \bar{k}^2 \operatorname{sn}^2 \eta \operatorname{sn}^2 u) \sqrt{\operatorname{sn}(\eta + u) \operatorname{sn}(\eta - u)}}{(\operatorname{cn} u \operatorname{dn} u \operatorname{sn} \eta + \operatorname{cn} \eta \operatorname{sn} u) \operatorname{dn} \eta} \quad (4.41c)$$

Utilizando as equações acima e (4.39d) verificamos que

$$y_1^+(u) y_1^-(u) = 1 \quad (4.42a)$$

$$y_2^+(u) y_2^-(u) = 1 \quad (4.42b)$$

$$x^+(\mu) x^-(-\mu) = 1 \quad (4.42c)$$

Analisando-se os valores assumidos por essas soluções, identificamos

$$y_1^-(\mu) = y_1^f(\mu) \quad (4.43a)$$

$$y_1^+(\mu) = y_1^a(\mu) \quad (4.43b)$$

$$y_2^-(\mu) = y_2^f(\mu) \quad (4.43c)$$

$$y_2^+(\mu) = y_2^a(\mu) \quad (4.43d)$$

$$x^+(\mu) = x^f(\mu) \quad (4.43e)$$

$$x^-(-\mu) = x^a(\mu) \quad (4.43f)$$

onde f e a significam interações ferro e antiferromagnéticas, respectivamente.

Vemos com isso que as equações de equivalência (4.35) contêm as soluções ferro e antiferromagnéticas de y_1 e y_2 e somente a solução ferromagnética de x .

Antes de mostrarmos que a solução antiferromagnética de x também pode ser obtida, façamos a conexão entre as energias livres do modelo de vértices e o Ising.

Seja uma rede quadrada com N vértices do modelo de oito vértices tipo II. Então de (4.35) teremos a seguinte relação entre a função de partição do modelo de vértices, Z_V , e do modelo de Ising, Z_I

$$\lambda^N Z_I = Z_V \quad (4.44)$$

Observando que para cada vértice temos dois spins (veja figura 27), podemos escrever para as energias livres reduzidas por vértice, f_V , e por spin, f_I

$$f_V(\mu) = 2 f_I(\mu) + \ln \lambda(\mu) \quad (4.45)$$

Se estivermos na fase ordenada $f_V(\mu)$ é a própria energia calculada na secção 4.2.4. (equação (4.33)).

Utilizando as equações (4.35) e (4.39) vemos que os efeitos da transformação $\mu \rightarrow -\mu$ são: a nível de vértices $h_1 \leftrightarrow h_2$, a nível de spin: $\lambda(\mu) \rightarrow \lambda(-\mu)$ e a solução $X^-(\mu) \rightarrow X^-(-\mu) = X^a(\mu)$. Mas a energia livre por vértices f_V é invariante pela troca $h_1 \leftrightarrow h_2$ (basta multiplicar as linhas quânticas e auxiliares do vértice pela matriz de Pauli σ_x) e, portanto podemos escrever

$$f_V(\mu) = 2 f_I(\mu) + \ln \lambda(-\mu) \quad (4.46)$$

Resultado: se $X=X^f$ ou $X=X^a$ utilizamos (4.45) e (4.46), respectivamente, para o cálculo da energia livre por spin do modelo de Ising associado. A função λ pode ser obtida substituindo as soluções (4.41) em (4.35e).

Finalmente, vamos verificar que a relação funcional que propusemos para o modelo de vértices implica na relação de simetria para o modelo de spin (equação (4.40))

$$f(\mu + i\bar{K}') = \ln \left[\frac{cn(\mu + i\bar{K}')}{cn\mu} \right] + f_V(-\mu) \quad (4.47)$$

Substituindo (4.45) em (4.47) teremos

$$2f_{\text{I}}(\mu+i\bar{\kappa}') = \ln \left[\frac{\text{cn}(\mu+i\bar{\kappa}')}{\text{cn}\mu} \right] + \ln \left[\frac{\lambda(-\mu)}{\lambda(\mu+i\bar{\kappa}')} \right] + 2f_{\text{I}}(-\mu) \quad (4.48)$$

Da equação (4.35a) podemos escrever

$$\lambda(-\mu) [1 + y_1^2(\mu) y_2^2(\mu)] = \frac{\bar{\kappa} \text{sn}\eta \text{cn}\mu \text{cn}(i\bar{\kappa}'+\mu) + i \text{cn}\eta}{\bar{\kappa} \text{sn}\eta \text{cn}(i\bar{\kappa}'+\mu)} \quad (4.49a)$$

$$\lambda(\mu+i\bar{\kappa}') [1 + y_1^2(\mu) y_2^2(\mu)] = \frac{\bar{\kappa} \text{sn}\eta \text{cn}(\mu+i\bar{\kappa}') \text{cn}\mu + i \text{cn}\eta}{\bar{\kappa} \text{sn}\eta \text{cn}\mu} \quad (4.49b)$$

Dividindo (4.48a) por (4.48b) temos

$$\frac{\lambda(-\mu)}{\lambda(\mu+i\bar{\kappa}')} = \frac{\text{cn}\mu}{\text{cn}(\mu+i\bar{\kappa}')} \quad (4.50)$$

que substituída em (4.48) nos fornece

$$f_{\text{I}}(i\bar{\kappa}'-\mu) = f_{\text{I}}(\mu) \quad (4.51)$$

4.3.2. Limites na rede quadrada

Nesta secção vamos mostrar a conexão existente entre a parametrização dos pesos de Boltzman do modelo de Ising numa rede quadrada que advém do modelo de oito vértices simétrico resolvido por Baxter e aquela que advém do modelo de oito vértices tipo II quando a rede Union Jack se degenera numa rede quadrada.

O modelo de Ising é mapeado no modelo de oito vértices simétrico ⁽⁴³⁾ (ver figura 20) superpondo-se duas redes quadradas como na figura 15 e usando-se a prescrição da figura 27. A fase ordenada do Ising não se encontra no chamado regime principal ⁽⁴³⁾ mas

sim no regime em que $a \leftrightarrow c$, $b \leftrightarrow d$, $d \rightarrow -d$. Essas operações deixam invariante a função de partição ⁽⁴³⁾. Procedendo desta maneira podemos escrever

$$a = \rho \operatorname{sn}(2\eta', k) = 1 \quad (4.52a)$$

$$b = \rho k \operatorname{sn}(\theta, k) \operatorname{sn}(\theta + 2\eta', k) \operatorname{sn}(2\eta', k) = x_1^1 x_2^1 \quad (4.52b)$$

$$c = \rho \operatorname{sn}(\theta + 2\eta', k) = x_1^1 \quad (4.52c)$$

$$d = -\rho \operatorname{sn}(\theta, k) = x_2^1 \quad (4.52d)$$

onde ρ é uma normalização, x_1^1 e x_2^1 são os pesos de Boltzman das ligações noroeste-sudeste e nordeste-sudoeste, respectivamente e usamos a normalização que spins no mesmo estado tem energia de interação zero.

Multiplicando (4.52c) por (4.52d), membro a membro, e dividindo pelo resultado da multiplicação de (4.52a) e (4.52b) obtemos

$$\operatorname{sn}(2\eta', k) = \frac{i}{\sqrt{k}} \Rightarrow 2\eta' = \frac{iK'}{2} \quad (4.53)$$

De (4.52a, c e d) segue imediatamente que

$$x_1^1 = \frac{\operatorname{sn}\left(\theta + \frac{iK'}{2}, k\right)}{\operatorname{sn}\left(\frac{iK'}{2}, k\right)} \quad (4.54a)$$

$$x_2^1 = \frac{-\operatorname{sn}(\theta, k)}{\operatorname{sn}\left(\frac{iK'}{2}, k\right)} \quad (4.54b)$$

A região física dos parâmetros é a seguinte (na fase ordenada): $0 < k < 1$, $\theta = -i\lambda$, $0 < \lambda < K'/2$.

Analise agora o modelo de Ising na Union Jack quando $X=1$; nesta situação ele se degenera no modelo de Ising na rede quadrada.

De (4.38c) e (4.35a e b) temos

$$\frac{-i\bar{k} \operatorname{sn}(\eta, \bar{k})}{\operatorname{dn}(\eta, \bar{k})} = 1 \Rightarrow \eta = i\bar{k}' \quad (4.55)$$

Por outro lado, das equações (4.38a e b) e (4.55) obtemos

$$y_1 = \frac{i [\operatorname{dn}(u, \bar{k}) - 1]}{\bar{k} \operatorname{sn}(u, \bar{k})} \quad (4.56a)$$

e

$$y_2 = \frac{i [\operatorname{dn}(i\bar{k}' - u, \bar{k}) - 1]}{\bar{k} \operatorname{sn}(i\bar{k}' - u, \bar{k})} \quad (4.56b)$$

Estamos aptos agora a estabelecer a conexão entre os parâmetros θ, k e u, \bar{k} . Façamos em (4.56a) uma transformação de Landen (veja apêndice B)

$$\bar{k} = \frac{2\sqrt{k}}{1+k} \quad (4.57)$$

de maneira que o peso y_1 pode ser escrito como

$$y_1 = \frac{\operatorname{sn}\left(\frac{u}{1+k}, k\right)}{\operatorname{sn}\left(\frac{iK'}{2}, k\right)} \quad (4.58)$$

Identificando a expressão acima com (4.54a) encontramos

$$\mu = (1+k) \left[\theta + i \frac{K(k')}{2} \right] \quad (4.59)$$

As equações (4.57) e (4.59) estabelecem a conexão que desejávamos.

Por completeza, resta-nos dizer que o outro limite em que a Union Jack se degenera numa rede quadrada, qual seja $y_1 = y_2 = 1$, corresponde a fazer $\mu = \gamma = \frac{i\bar{K}'}{2}$.

CAPÍTULO V

SOLUÇÃO DE MODELOS DE SPIN COM SIMETRIA $Z(N)$

5.1. Preâmbulo

Modelos de spin com simetria $Z(N)$ têm sido abundantemente estudados não só pela riqueza de informações que fornecem sobre os mecanismos de transição de fase mas também pela possibilidade de realizações experimentais desses modelos (os sistemas experimentais mais comuns são gases raros adsorvidos em algum tipo de substrato). Além disso, eles apresentam a peculiaridade de permitir um tratamento exato ainda que, na maioria dos casos, restrito à curva auto-dual. Frise-se, ainda, o interesse que a simetria $Z(N)$ desperta na área da cromodinâmica quântica, em problemas como o do confinamento dos quarks. Por tudo isso, o estudo de modelos com simetria $Z(N)$ se reveste hoje de uma importância muito grande.

Neste Capítulo fazemos, inicialmente, uma apresentação dos modelos de spin com simetria $Z(N)$ exatamente solúveis numa rede quadrada. Discutimos, em seguida, as peripécias e malabarismos que eram necessários para a obtenção de resultados exatos nas redes triangular e hexagonal e propomos um método que simplifica de veras o problema. Mostramos que se o modelo envolve somente interações de primeiros vizinhos e satisfaz a relação triângulo-estrela então a solução da rede triangular pode ser obtida a partir da solução da rede quadrada. Reobtemos, em seguida, os resultados do modelo de Potts escalar por esse método e estendemos as soluções auto-duais de Fateev e Zamolodchikov para a rede triangular.⁽⁸²⁾

No final do Capítulo, discutimos a criticalidade do modelo de Potts escalar nas redes de Kagomé e de dados e fazemos uma conjectura baseada na degenerescência dessas redes.

5.2. Modelos de spin com simetria $Z(N)$

Seja uma rede planar com N sítios. A cada sítio j associaremos uma variável de spin σ_j que pode assumir os valores discretos: $0, 1, \dots, q-1$. A hamiltoniana mais geral com simetria $Z(q)$ é dada por⁽⁵⁴⁾:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\alpha=1}^{\bar{q}} J_{\alpha} \left[\cos \frac{2\pi}{q} \alpha (\sigma_i - \sigma_j) - 1 \right] \quad (5.1)$$

onde \bar{q} é o maior inteiro contido em $q/2$, $\langle ij \rangle$ significa soma somente sobre primeiros vizinhos e estamos normalizando a energia de interação a zero quando os spins vizinhos estiverem no mesmo estado. A hamiltoniana (5.1) tem como casos particulares importantes, o modelo de Potts escalar

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{\sigma_i \sigma_j} - 1) \quad (5.2)$$

e o modelo de Potts vetorial ou do relógio ("clock model")

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left[\cos \frac{2\pi}{q} (\sigma_i - \sigma_j) - 1 \right] \quad (5.3)$$

Para $q=2$, a hamiltoniana (5.1) reduz-se àquela do próprio modelo de Ising; para $q=3$ corresponde ao modelo de três estados do Potts escalar. Para $q \geq 4$ o modelo passa a exibir, para determinados valores dos acoplamentos J_{α} , mais de uma transição e apresenta um rico diagrama de fases⁽⁵⁴⁾, permitindo inclusive uma variação contínua dos expoentes críticos ao longo da curva crítica. Como vimos no Capítulo II, quando este modelo de spins está definido na rede quadrada ou nas redes da figura 8 podemos associar, via prescrição da figura 5, um modelo de q^3 vértices que conservam carga módulo q .

5.3. Solução Exata na Rede Quadrada

Historicamente, o primeiro desses modelos que teve uma solução exata foi o caso $q=2$ do modelo de Ising que Onsager resolveu em 1944. Foram necessários mais 29 anos para que se obtivesse a solução exata do caso particular do modelo de Potts escalar na rede quadrada e mesmo assim, somente na temperatura crítica. O procedimento utilizado na derivação original foi bastante indireto. Vamos apresentar de maneira sucinta, as linhas gerais dessa derivação.

A função de partição do modelo de Potts escalar de q estados é dada por

$$Z = \sum_{\text{conf.}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j}} \quad (5.4)$$

onde o primeiro somatório é realizado sobre todas as possíveis configurações e estamos normalizando a zero a energia de interação se spins vizinhos se encontram em estados diferentes. A função de partição (5.4) pode ainda ser reescrita como

$$Z = \sum_{\text{conf.}} \prod_{\langle ij \rangle} [1 + v \delta_{\sigma_i \sigma_j}] \quad (5.5)$$

onde $v = e^{\beta J} - 1$.

Se a rede tem E ligações entre os spins então a expressão (5.5) conterá 2^E termos. A eles associaremos um gráfico G da rede colocando barras sempre que escolhermos o termo $v \delta_{\sigma_i \sigma_j}$. Dessa maneira, existe uma correspondência biunívoca entre gráficos na rede e os termos da expansão de (5.5) e a função de partição assume a forma

$$Z = \sum_G q^c v^l \quad (5.6)$$

onde a soma é sobre os gráficos possíveis, \mathcal{L} é o número de barras e C é o número de componentes (isto é, o número de sítios isolados mais os agrupamentos de spins no mesmo estado). A expressão (5.6) é um caso particular do chamado polinômio de Whitney.

Temperley e Lieb ⁽⁴⁰⁾ mostraram que (5.6) é equivalente a um modelo de seis vértices alternado nas duas direções da rede ("staggered") e definido numa rede medial. O procedimento utilizado porém, baseado numa álgebra de operadores, é bastante complexo e de validade restrita à rede quadrada. Ao leitor interessado aconselhamos a derivação desse mesmo resultado obtida por Baxter, Kelland e Wu ⁽⁴¹⁾ que, além de mais simples, posto que se baseia numa decomposição gráfica, tem validade em qualquer tipo de rede planar. Como exemplo desses resultados exibimos na figura 28 uma rede quadrada de spins e a rede medial associada do modelo de seis vértices alternado.

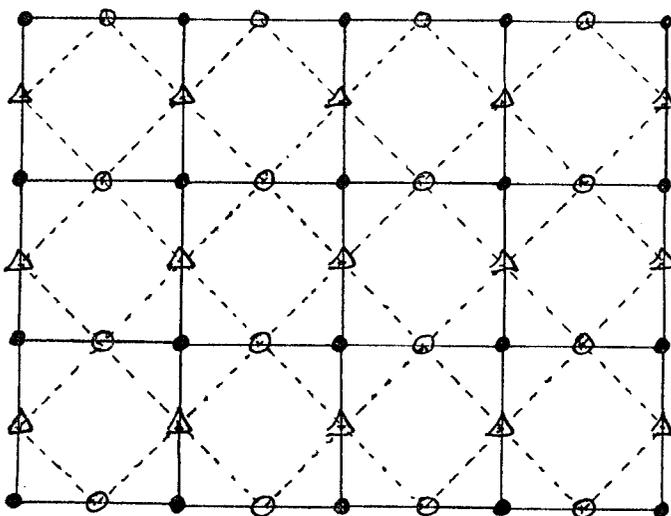


Fig.28 - Círculos cheios e linhas contínuas correspondem à rede de spins; círculos vazios, triângulos e linha tracejada à rede medial do seis vértices alternado.

Os vértices mostrados na figura 29 abaixo têm os seguintes pesos :

Nas linhas verticais (triângulos)

$$\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6 = 1, 1, x_v, x_v, s^{-1} + x_v s, s + x_v s^{-1}$$

Nas linhas horizontais (círculos vazios)

$$\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6 = x_h, x_h, 1, 1, s^{-1} + x_h s, s + x_h s^{-1}$$

onde x_v ou $h = q^{-1/2} v$ ou h , $s = \exp \theta/2$ e $q^{1/2} = 2ch\theta$

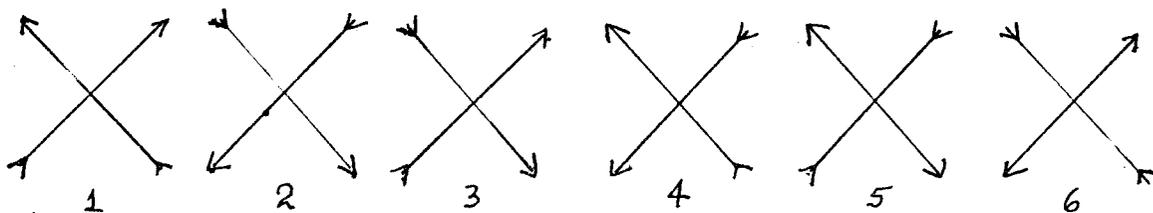


Fig.29 - Os seis vértices associados (não simétrico)

O modelo de seis vértices alternado, infelizmente, não tem solução a não ser que a alternância deixe de existir podendo - se então utilizar os resultados de Lieb para o seis vértices homogêneo. Isto ocorre na temperatura crítica .

Cumpra-nos salientar ainda que essas equivalências são tão rigorosamente corretas somente para o modelo de Potts com interação ferromagnética ⁽⁷³⁾!

No que diz respeito à hamiltoniana (5.1) só recentemente Fateev e Zamolodchikov ⁽⁸⁰⁾ encontraram algumas soluções auto-duais na rede quadrada . Eles mostraram a existência dessas novas soluções utilizando a relação triângulo-estrela (na sua versão auto-dual) e, calcados nos trabalhos de Pokrowsky e Baxter, obtiveram a energia livre por spin a partir das relações funcionais de inversão e simetria (que estudamos nos capítulos II e IV).

5.4. Solução exata nas redes triangular e hexagonal

5.4.1. Soluções anteriores

A extensão dos resultados exatos do modelo de Potts crítico para rede triangular (ou a sua rede dual que é a hexagonal) é ainda mais rebuscada. Em primeiro lugar observemos que o modelo de Potts definido numa rede triangular corresponde, via o mapeamento estudado na secção anterior, a um modelo de seis vértices numa rede de Kagomé! (que é a rede medial tanto da rede triangular como da hexagonal). Ora, não se conheciam soluções do seis vértices nessa rede e isso protelou por cinco anos a extensão de resultados exatos para a rede triangular; para quebrar as algemas era necessário resolver o seis vértices na rede de Kagomé.

Baxter se desvencilhou dessas algemas de maneira bastante engenhosa (como sempre). Em 1974, Kelland⁽⁸¹⁾ havia estudado e resolvido (usando a hipótese de Bethe) um modelo de vinte vértices numa rede triangular. As configurações permitidas de vértices eram somente aquelas que conservavam carga exatamente e estão mostradas na figura 30.

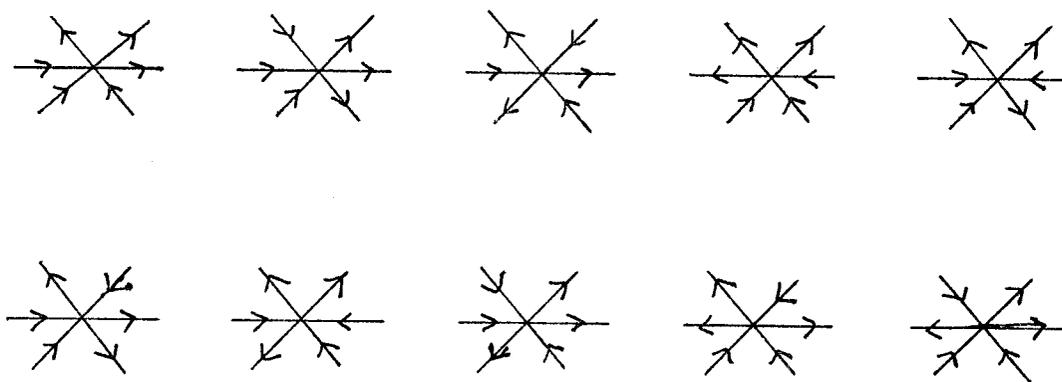


Fig.30 - O modelo de vinte vértices simétrico por reversão de todas as flechas.

As entidades básicas na rede de Kagomé são triângulos . O modelo de Potts está associado à rede de Kagomé que tem em cada uma das 3 sub-redes um seis vértices com pesos de Boltzman diferentes (representamos isso na figura 31 através de círculo, triângulo e quadrado). Ora se todos os triângulos da rede de Kagomé colapsassem da maneira mostrada na figura 31 então poderia se encontrar soluções para o seis vértices na rede de Kagomé através da solução de Kelland do modelo de vinte vértices na rede triangular. Foi exatamente este o procedimento de Baxter⁽¹³⁾. Ele mostrou que a solução de Kelland correspondia precisamente à solução do Potts crítico na rede triangular.

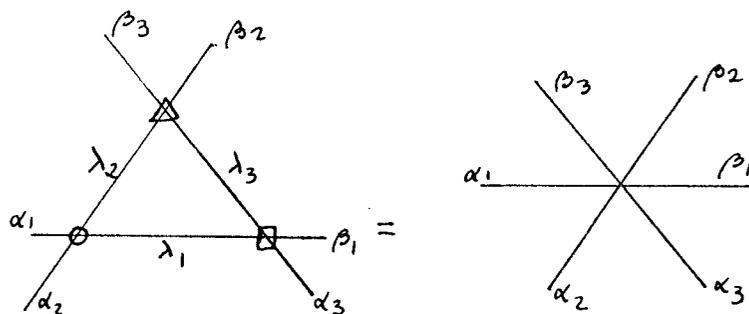


Fig.31 - Colapso do seis vértices na Kagomé no modelo de vinte vértices, $\alpha_i, \beta_i, \lambda_i = \pm 1$, e λ_i estão somados.

Vemos com tudo isso que duas equivalências eram necessárias para a obtenção do Potts crítico na rede triangular.

Em pior situação ainda se encontravam as soluções de Feteev e Zamolodchikov em que a primeira equivalência (isto é, com um seis vértices na rede medial) sequer existia.

Na próxima seção mostraremos que a extensão de resultados exatos para redes triangulares pode ser simplificada de maneira drástica.

5.4.2. Solução a partir da rede quadrada

Em seu livro Baxter ⁽⁴³⁾ derivou a solução do modelo de Ising na rede triangular usando a equivalência entre um modelo de oito vértices na rede de Kagomé e dois modelos de Ising desacoplados definidos nas redes triangular e hexagonal ⁽⁴³⁾. Nós mostraremos que desde que a interação seja somente de primeiros vizinhos e obedeça à relação triângulo-estrela a energia livre por spin do modelo definido na rede triangular pode ser obtida a partir da solução do mesmo modelo na rede quadrada. ⁽⁸²⁾

Façamos primeiro uma superposição de uma rede triangular e de uma rede hexagonal como mostrado na figura 32. Em cada sítio dessas redes definimos variáveis de spin que podem assumir os valores discretos: $0, 1, \dots, q-1$. Com a prescrição dada na figura 33 nós associamos às duas redes desacopladas um modelo de q^3 vértices na rede de Kagomé. Observe que esta rede de Kagomé tem três tipos de vértices. Se o modelo de spins satisfaz a relação triângulo-estrela então o modelo de vértices obedece as equações de fatorização (veja Capítulo II) e sua função de partição é Z invariante ⁽⁸³⁾ de maneira que podemos escrever

$$-\beta F_K = -\frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \beta F_i \quad (5.7)$$

onde F_K é a energia livre por vértice da rede Kagomé e F_i é a energia livre por vértice do tipo i na rede quadrada.

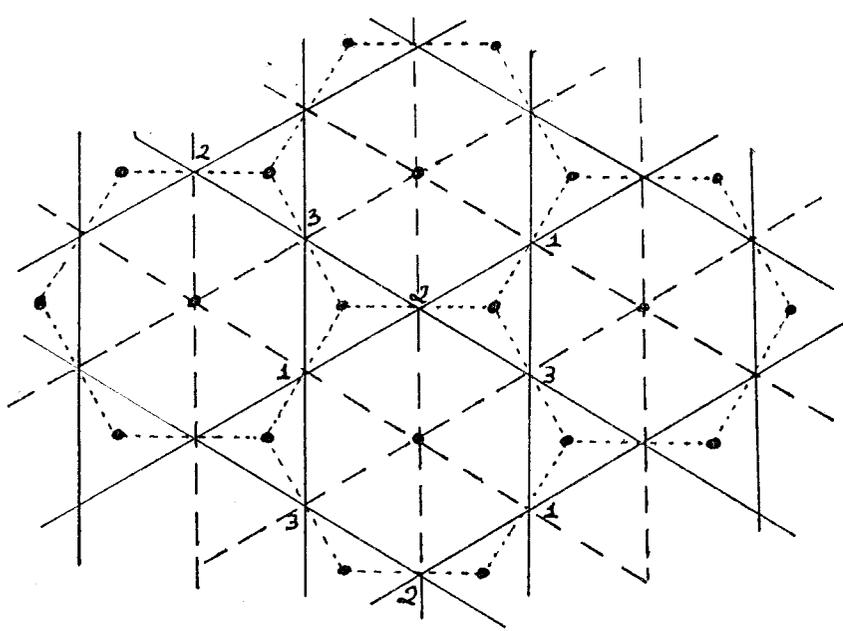


Fig.32 - --- rede hexagonal; — — —, rede triangular; — — —, três tipos de vértices na rede Kagomé (1,2,3).

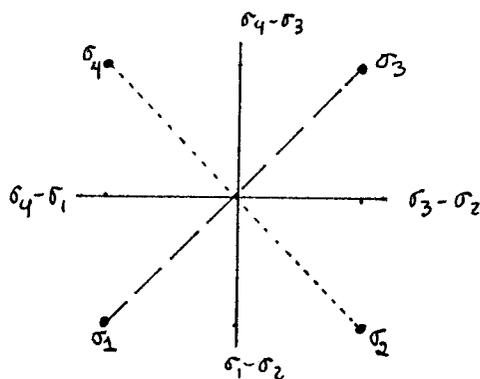


Fig.33 - Prescrição do vértice. A diferença $\sigma_i - \sigma_j$ é módulo q .

A uma rede de Kagomé com N vértices corresponde uma rede triangular com $N/3$ sítios e uma rede hexagonal com $2N/3$ sítios (como estamos interessados no limite termodinâmico as condições de contorno dessas redes são irrelevantes) de modo que

$$-\beta F_K = -\frac{1}{3}\beta F_t - \frac{2}{3}\beta F_h \quad (5.8)$$

onde F_t e F_h são as energias livres por spin das redes triangular e hexagonal respectivamente.

Procedendo alã Pokrowsky e Bashilov ⁽⁵²⁾ nōs podemos escrever a relação triângulo-estrela como equações funcionais

$$\sum_{\sigma=0}^{q-1} K_{\sigma\sigma'}(\theta_1) K_{\sigma_2\sigma}(\theta_2) K_{\sigma_3\sigma}(\theta_3) = \lambda(\theta_1, \theta_2, \theta_3) K_{\sigma_2\sigma_3}(\pi-\theta_1) K_{\sigma_3\sigma_1}(\pi-\theta_2) K_{\sigma_1\sigma_2}(\pi-\theta_3) \quad (5.9)$$

onde $K_{\sigma\sigma'}(\theta_i)$ e $K_{\sigma\sigma'}(\pi-\theta_i)$ são os pesos de Boltzman nas ligações do tipo i das redes hexagonal e triangular respectivamente, $\lambda(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ é uma função simétrica dos parâmetros espectrais θ_i e $\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 = \pi$.

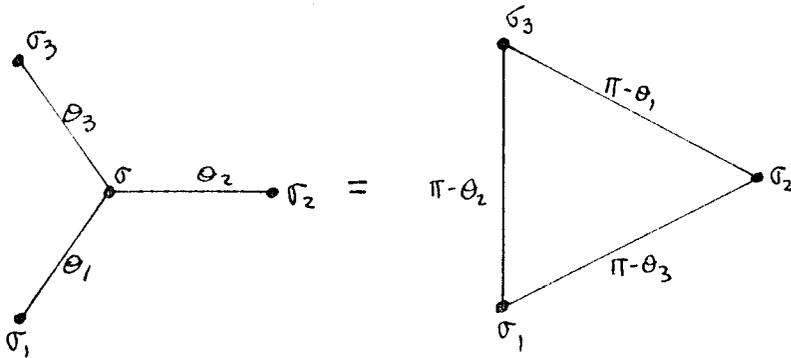


Fig.34 - Relação triângulo-estrela

Fazendo uma dizimação de spins da rede hexagonal através da relação triângulo-estrela nós obtemos

$$-\beta F_h = \frac{1}{2} \ln \lambda - \frac{1}{2} \beta F_t \quad (5.10)$$

Combinando as expressões (5.7), (5.8) e (5.10) nós temos

$$-\beta F_t = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \beta F_i - \frac{1}{2} \ln \lambda \quad (5.11)$$

A equação acima é a expressão chave desse nosso trabalho. Se um determinado modelo de spins com interação de primeiros vizinhos satisfaz a relação triângulo-estrela (o que implica na sua solubilidade na rede quadrada) então a solução exata pode ser estendida às redes triangular e hexagonal através da equação (5.11).

Vamos agora rederivar a solução do modelo de Potts crítico na rede triangular, utilizando a expressão (5.11). Os pesos de Boltzman para esse modelo são dados por

$$K_{\sigma\sigma'}(\theta_i) = 1 + v(\theta_i) \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5.12)$$

onde $v(\theta_i)$ é dada por (Pokrowsky e Bashilov ⁽⁵²⁾)

$$v(\theta_i) = 2 \operatorname{ch}(\mu\pi) \operatorname{sh}[\mu(\pi - \theta_i)] / \operatorname{sh}(\mu\theta_i) \quad (5.13)$$

e $q^{1/2} = 2 \operatorname{ch}(\mu\pi)$.

A energia livre por vértice do tipo i na rede quadrada tem a seguinte expressão (Pokrowsky e Bashilov ⁽⁵²⁾)

$$-\beta F_i = \frac{1}{2} \ln q + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}[\pi x(1-\gamma)] \operatorname{tgh}(\pi \gamma x) \operatorname{ch}[\gamma x(\pi - 2\theta_i)]}{x \operatorname{sh}(\pi x)} dx \quad (5.14a)$$

$$-\beta F_i = \frac{1}{2} \ln 4 + \ln \left[\frac{\theta_i(\pi - \theta_i)}{(2\pi)^2} \right] + 2 \ln \left[\frac{\Gamma(\theta_i/2\pi) \Gamma(\frac{1}{2} - \frac{\theta_i}{2\pi})}{\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{\theta_i}{2\pi}) \Gamma(1 - \frac{\theta_i}{2\pi})} \right] \quad (5.14b)$$

$$-\beta F_i = \frac{1}{2} \ln q + \mu\pi + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\mu\pi n} \operatorname{tgh}(\mu\pi n) \operatorname{ch}[\mu n(\pi - 2\theta_i)]}{n} \quad (5.14c)$$

onde as equações (5.14a, b e c) correspondem respectivamente aos casos $q < 4$, $q = 4$ e $q > 4$ e $\gamma = -i\mu$.

A função λ pode ser obtida diretamente da relação triângulo-estrela e vale

$$\lambda(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \sqrt{q} \prod_{i=1}^3 \frac{\text{sh}[\mu(\pi - \theta_i)]}{\text{sh}(\mu\theta_i)} \quad (5.15)$$

Finalmente, usando as equações (5.11), (5.14) e (5.15) nós obtemos a energia livre por spin do modelo de Potts crítico na rede triangular.

$$-\beta F_t = \frac{1}{2} \ln q + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{sh}[\pi x(1-\delta)] \text{sh}(2x\tau\theta_i)}{x \text{sh}(\pi x) \text{ch}(\pi\delta x)} dx \quad (5.16a)$$

$$-\beta F_t = \frac{1}{2} \ln 4 + \sum_{i=1}^3 \left\{ \ln\left(\frac{\theta_i}{2\pi}\right) + \ln \left[\frac{\Gamma\left(\frac{\theta_i}{2\pi}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\theta_i}{2\pi}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \frac{\theta_i}{2\pi}\right) \Gamma\left(1 - \frac{\theta_i}{2\pi}\right)} \right] \right\} \quad (5.16b)$$

$$-\beta F_t = \frac{1}{2} \ln q + \mu\pi + \sum_{i=1}^3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\mu\pi n} \text{sh}(2\mu n\theta_i)}{n \text{ch}(\mu\pi n)} \quad (5.16c)$$

onde, novamente, (5.16a,b e c) correspondem aos casos $q < 4$, $q = 4$ e $q > 4$, respectivamente. A conexão com os parâmetros utilizados na solução original obtida por Baxter et al ⁽¹³⁾ é a seguinte: $\lambda = \mu\pi$, $\alpha_j = \mu(\pi - \theta_j)$ e $\tau_j = (\pi - \theta_j)/2\pi$.

Vamos agora obter uma solução nova para redes triangulares. Recentemente, Fateev e Zamolodchikov ⁽⁸⁰⁾ encontraram soluções auto-duais da relação triângulo-estrela em modelos de spin com simetria $Z(N)$. Para o peso estatístico, que determina a interação entre dois spins σ e σ' em sítios vizinhos da rede quadrada, eles obtiveram a seguinte parametrização

$$K_n(\theta_i) = \prod_{k=0}^{n-1} \frac{\text{sen} \left(\frac{\pi k}{N} + \frac{\theta_i}{2N} \right)}{\text{sen} \left[\frac{\pi(k+1)}{N} - \frac{\theta_i}{2N} \right]} \quad (5.17)$$

onde N é número de estados de spin, $n = \sigma - \sigma'$ (módulo N) θ_i são os parâmetros espectrais e $\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 = \pi$.

As funções $K_n(\theta_i)$ têm as seguintes propriedades $K_n = K_{-n} = K_{N-n}$ e K_0 é escolhido igual a um. A energia livre por vértice do tipo i na rede quadrada é dada pela expressão abaixo

$$-\beta F_i = \int_0^{\infty} \frac{\text{sh} \left(\frac{x \theta_i}{2} \right) \text{sh} \left[\frac{x}{2} (\pi - \theta_i) \right] \text{sh} \left[\frac{\pi x}{2} (N-1) \right]}{x \text{ch}^2 \left(\frac{\pi x}{2} \right) \text{ch} \left(\frac{\pi N x}{2} \right)} dx \quad (5.18)$$

Fazendo uso da relação triângulo-estrela nós encontramos a função λ

$$\lambda(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \sqrt{N} \prod_{\ell=1}^3 \prod_{k=1}^{\lfloor N/2 \rfloor} \frac{\text{sen} \left[\frac{\pi}{N} \left(k - \frac{1}{2} \right) + \frac{\theta_\ell}{2N} \right]}{\text{sen} \left[\frac{\pi k}{N} - \frac{\theta_\ell}{2N} \right]} \quad (5.19)$$

onde $\lfloor N/2 \rfloor$ significa o maior inteiro menor que $N/2$. Finalmente usando as relações (5.11), (5.18) e (5.19) nós podemos obter a solução na rede triangular

$$-\beta F_t = \frac{1}{2} \ln N - \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^3 \int_0^{\infty} \frac{\text{sh} \left[\frac{\pi x}{2} (N-1) \right] \text{sh} (x \theta_\ell)}{x \text{ch} \left(\frac{\pi N x}{2} \right) \text{ch} \left(\frac{\pi x}{2} \right) \text{sh} (\pi x)} dx \quad (5.20)$$

5.5. Criticalidade na redes Kagom  e de dados

5.5.1. Conjecturas anteriores

Muito embora o modelo de Ising seja exatamente sol vel a qualquer temperatura em redes planares, a sua generaliza o, isto  , o modelo de Potts escalar somente o   na temperatura cr tica. Mais intrigante ainda   o fato de, at  agora, os resultados exatos valerem apenas para as redes quadrada, triangular e hexagonal; n o se conhecem sequer as temperaturas cr ticas a n o ser nessas redes. Isto tem gerado uma s rie de conjecturas sobre a criticalidade do modelo de Potts em outras redes e, em particular, para a rede de Kagom  (e sua rede dual: a de dados) que passaremos a analisar (As c lulas unit rias dessas redes est o mostradas na Fig. 8).

De uma maneira geral, as conjecturas existentes se baseiam na rela o tri ngulo-estrela do modelo de Potts e faremos ent o um estudo cuidadoso dessa rela o.

N o escreveremos, desta vez, as equa es da rela o tri ngulo-estrela (veja figura 34) como equa es funcionais e utilizaremos a normaliza o da energia de intera o igual a zero quando os spins forem diferentes. Dessa maneira, o modelo de Potts tem as seguintes equa es para a rela o tri ngulo-estrela (veja figura 34).

$$\sum_{\sigma=0}^{q-1} e^{\beta(L_1 \delta_{\sigma\sigma_1} + L_2 \delta_{\sigma\sigma_2} + L_3 \delta_{\sigma\sigma_3})} = \lambda e^{\beta(J_1 \delta_{\sigma_2\sigma_3} + J_2 \delta_{\sigma_3\sigma_1} + J_3 \delta_{\sigma_1\sigma_2})} \quad (5.21)$$

Chamando $x_i = e^{\beta L_i}$ e $y_i = e^{\beta J_i}$ constatamos que a rela o tri ngulo-estrela para o modelo de Potts implica na exist ncia de um total de cinco equa es, a saber

$$\lambda y_1 y_2 y_3 = x_1 x_2 x_3 + q - 1, \quad \sigma = 0, \dots, q-1 \quad (5.22a)$$

$$\begin{array}{c} \sigma \\ \diagdown \quad \diagup \\ \sigma' \end{array} \quad \lambda y_1 = x_1 + x_2 x_3 + q^{-2} \quad , \quad \sigma \neq \sigma' \quad (5.22b)$$

$$\begin{array}{c} \sigma \\ \diagdown \quad \diagup \\ \sigma' \end{array} \quad \lambda y_2 = x_2 + x_1 x_3 + q^{-2} \quad , \quad \sigma \neq \sigma' \quad (5.22c)$$

$$\begin{array}{c} \sigma \\ \diagdown \quad \diagup \\ \sigma' \end{array} \quad \lambda y_3 = x_3 + x_1 x_2 + q^{-2} \quad , \quad \sigma \neq \sigma' \quad (5.22d)$$

$$\begin{array}{c} \sigma'' \\ \diagdown \quad \diagup \\ \sigma \end{array} \quad \lambda = x_1 + x_2 + x_3 + q^{-3} \quad , \quad \sigma \neq \sigma' \neq \sigma'' \quad (5.22e)$$

Substituindo (5.22e) nas equações anteriores eliminamos a normalização λ . Dessa maneira as equações (5.22b,c e d) nos fornecem os y_i como funções dos x_i . Substituindo-as em (5.22a) encontraremos uma função $f(x_1, x_2, x_3) = 0$ dada por

$$f(x_1, x_2, x_3) = (x_1 - 1)(x_2 - 1)(x_3 - 1) \left[x_1 x_2 x_3 - x_1 x_2 - x_1 x_3 - x_2 x_3 + (1 - q)(x_1 + x_2 + x_3) + 3q - 1 - q^2 \right] \quad (5.23)$$

Portanto a relação triângulo-estrela do modelo de Potts admite solução se e somente se a equação (5.23) estiver satisfeita. Evidentemente a expressão entre colchetes de (5.23) deve ser nula. Mas essa é exatamente a equação do modelo de Potts crítico na rede hexagonal! Se tivéssemos eliminado λ, x_1, x_2, x_3 em favor de y_1, y_2 e y_3 então teríamos obtido a condição

$$y_1 y_2 y_3 - y_1 - y_2 - y_3 + 2 - q = 0 \quad (5.24)$$

que é exatamente a equação do modelo de Potts crítico na rede triangular!

Resultado: as equações triângulo-estrela do modelo de Potts só têm solução se e somente se os x_i e os y_i satisfazem a equação crítica do modelo nas redes hexagonal e triangular, respectivamente. A única exceção que existe é o caso $q=2$ (modelo de Ising)

pois o número de equações independentes reduz-se a quatro, uma vez que é impossível a configuração (5.22e)!

E aí reside o erro da conjectura feita por C. Tsallis ⁽⁸⁴⁾ na rede 3-12 (e em consequência, na Kagomé). Inadvertidamente, ele omite a equação (5.22e) na relação triângulo-estrela do Potts, escrevendo somente 4 equações (eliminando-se a normalização λ , restam as equações de números (8), (9) e (10) do trabalho de Tsallis). É claro que os resultados dele valem para o modelo de Ising mas não para o modelo de Potts com $q > 2$.

O erro da conjectura de F.Y. Wu ⁽⁸⁵⁾ é de outra natureza. Em seu trabalho ele está interessado num modelo de Potts (interação de primeiros vizinhos) na rede triangular agregado a uma interação de 3 spins em todos os triângulos da rede. Baxter havia anteriormente encontrado a curva crítica do modelo em que a interação de 3 spins ocorre alternadamente nos triângulos da rede. Wu faz então, uma hipótese sobre a curva crítica do modelo mais geral (em que a interação de 3 spins ocorre em todos os triângulos) e a partir dela monta um sistema de equações triângulo-estrela (equação (10) de Wu ⁽⁸⁵⁾) no qual o triângulo tem interação Potts e de 3 spins e a estrela somente a interação Potts. Degenerando todos os triângulos da rede triangular em estrelas obtém-se a rede de dados e a partir da sua hipótese de criticalidade do modelo que contém interação Potts e 3 spins, ele conjectura a criticalidade do Potts na rede de dados (e, naturalmente, na rede Kagomé que é sua dual). Ele próprio reconhece em trabalho posterior ⁽⁸⁶⁾ o erro da sua hipótese inicial.

5.5.2. Conjectura a partir da degenerescência das redes

Nas conjecturas anteriores a degenerescência da rede Kagomé na rede quadrada (quando uma das interações vai a zero) é utilizada para checar o resultado. Nós queremos inverter este procedimento, ou seja, usar a simetria e as degenerescências da rede pa-

ra obter o máximo de informações possíveis sobre a criticalidade da rede.

Vejamos, por exemplo, como poderíamos obter a curva crítica do modelo de Potts (completamente anisotrópico) na rede triangular conhecendo a sua curva crítica na rede quadrada.

$$x_1 x_2 - x_1 - x_2 + 1 - q = 0 \quad (5.25)$$

Ora, a simetria da rede triangular impõe que a curva crítica seja simétrica nos pesos de Boltzman x_1, x_2 e x_3 (correspondentes às três direções da rede). Além disso, se qualquer um dos x_i for a um (acoplamento zero nessa direção) nós recuperamos a rede quadrada. Face à expressão (5.25) nós devemos ter somente potências lineares de x_1, x_2 e x_3 . A equação mais geral que podemos escrever com essa simetria e potências é a seguinte

$$x_1 x_2 x_3 + c_0 (x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3) + c_1 (x_1 + x_2 + x_3) + c_2 = 0 \quad (5.26)$$

onde c_0, c_1 e c_2 são coeficientes a serem determinados. Fazendo $x_3 = 1$, obtemos

$$x_1 x_2 (1 + c_0) + (c_1 + c_0)(x_1 + x_2) + c_1 + c_2 = 0 \quad (5.27)$$

Igualando (5.27) e (5.25), teremos

$$1 + c_0 = 1 \quad (5.28a)$$

$$c_1 + c_0 = -1 \quad (5.28b)$$

$$c_1 + c_2 = 1 - q \quad (5.28c)$$

donde $C_0=0$, $C_1=-1$, $C_2=2-q$ que substituídos em (5.26) fornecem exatamente a curva crítica do Potts na rede triangular.

Para a rede de Kagomé, entretanto, se $x_3 \rightarrow 1$ então ela se degenera numa rede quadrada decorada cuja curva crítica exata é fácil de ser obtida⁽⁵⁰⁾

$$\begin{aligned} & x_1^2 x_2^2 - 2x_1^2 x_2 - 2x_1 x_2^2 + x_1^2 + x_2^2 + 4(1-q)x_1 x_2 + \\ & + (1-q)(q^2 - 3q + 1) - 2(1-q)^2(x_1 + x_2) = 0 \end{aligned} \quad (5.29)$$

Devemos então procurar por uma expressão que seja simétrica nas variáveis x_1, x_2, x_3 e no máximo quadrática nessas variáveis (para poder gerar a curva crítica da rede quadrada decorada (5.29) no limite $x_3 \rightarrow 1$).

$$\begin{aligned} & C_0 + C_1(x_1 + x_2 + x_3) + C_2(x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3) + C_3(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) + \\ & + C_4(x_1 x_2^2 + x_1^2 x_2 + x_1^2 x_3 + x_1 x_3^2 + x_2 x_3^2 + x_2^2 x_3) + C_5 x_1 x_2 x_3 + C_6(x_1^2 x_2 x_3 + \\ & + x_1 x_2^2 x_3 + x_1 x_2 x_3^2) + C_7(x_1^2 x_2^2 + x_1^2 x_3^2 + x_2^2 x_3^2) + C_8(x_1^2 x_2^2 x_3 + x_1^2 x_2 x_3^2 + \\ & + x_1 x_2^2 x_3^2) + x_1^2 x_2^2 x_3^2 = 0 \end{aligned} \quad (5.30)$$

Tomando o limite $x_3 \rightarrow 1$ em (5.30) e igualando a (5.29) obtemos

$$C_7 + C_8 + 1 = 1 \quad (5.31a)$$

$$C_4 + C_6 + C_8 = -2 \quad (5.31b)$$

$$C_3 + C_4 + C_7 = 1 \quad (5.31c)$$

$$C_2 + C_5 + C_6 = 4(1-q) \quad (5.31d)$$

$$c_1 + c_2 + c_4 = -2(1-q)^2 \quad (5.31e)$$

$$c_0 + c_1 + c_3 = (1-q)(q^2 - 3q + 1) \quad (5.31f)$$

As seis equações acima são, evidentemente, insuficientes para se determinar os nove coeficientes. Entretanto, olhemos para o limite em que $x_3 \rightarrow \infty$. Neste caso, toda uma linha de spins estarão no mesmo estado. Se neste limite olharmos para a rede dual ($x_3^D \rightarrow 1$) então a rede se torna unidimensional como mostra a figura 35.

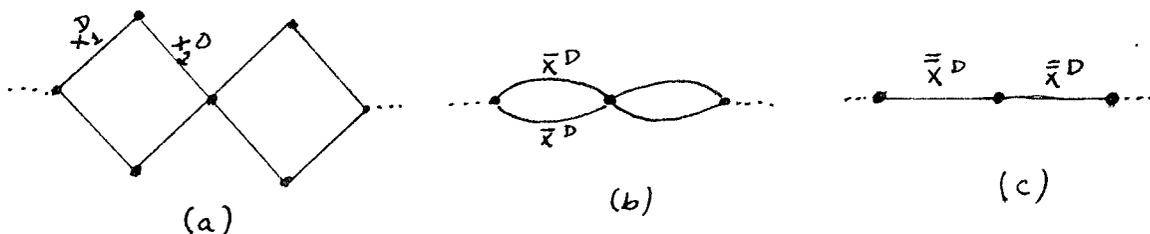


Fig.35 - Limite $x_3^D \rightarrow 1$ na rede de dados (a) e aplicação sucessiva do cálculo do peso de Boltzman equivalente para spins em série (b) e em paralelo (c).⁽⁵⁰⁾

Da figura acima segue-se imediatamente que

$$\bar{x}^D = \frac{x_1^D x_2^D + q - 1}{x_1^D + x_2^D + q - 2} \quad (5.32)$$

e

$$\bar{\bar{x}}^D = (\bar{x}^D)^2 \quad (5.33)$$

Quando a rede de dados colapsa na cadeia unidimensional a temperatura crítica deve tender a zero, ou seja, $\bar{\bar{x}}^D \rightarrow \infty$. Utilizando a transformação dual: $x_i^D = \frac{x_i + q - 1}{x_i - 1}$, vemos que $\bar{\bar{x}}^D \rightarrow \infty$ corresponde a

$$(x_1 x_2 - 1)^2 = 0 \quad (5.34)$$

Ora se tomarmos o limite $x_3 \rightarrow \infty$ em (5.30) obtemos

$$c_3 + c_4(x_1 + x_2) + c_7(x_1^2 + x_2^2) + c_6 x_1 x_2 + c_8(x_1^2 x_2 + x_1 x_2^2) + x_1^2 x_2^2 = 0 \quad (5.35)$$

Igualando (5.35) e (5.34) teremos

$$c_4 = c_7 = c_8 = 0 \quad (5.36a)$$

$$c_6 = -2 \quad (5.36b)$$

$$c_3 = 1 \quad (5.36c)$$

O sistema de equações (5.36) e (5.31) deixa indeterminado apenas um coeficiente de (5.30)

$$\begin{aligned} & x_1^2 x_2^2 x_3^2 - 2(x_1^2 x_2 x_3 + x_1 x_2^2 x_3 + x_1 x_2 x_3^2) + c_5 x_1 x_2 x_3 \\ & + (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) + (6 - 4q - c_5)(x_1 x_2 + x_1 x_3 + x_2 x_3) + \\ & + (c_5 - 2q^2 + 8q - 8)(x_1 + x_2 + x_3) + (-q^3 + 6q^2 - 12q + 8 - c_5) = 0 \end{aligned} \quad (5.37)$$

O modelo de Ising ($q=2$) corresponde a $c_5=0$. A hipótese malograda de Wu corresponde a $c_5=4-2q$. Infelizmente não vislumbramos, até agora, uma maneira de determinar o coeficiente c_5 , que deve provavelmente ser um polinômio em q .

CAPÍTULO VI

CONCLUSÃO

Neste trabalho estudamos alguns sistemas de spins e de vértices exatamente solúveis em duas dimensões. A partir da existência de soluções para as equações de fatorização e, em consequência, a comutação da matriz de transferência, mostramos ser possível se obter a energia livre no limite termodinâmico através do método de espalhamento inverso (quando se conhece o pseudo-vácuo) ou via relações funcionais para a função de partição.

Introduzimos um modelo de dez vértices assimétrico com dois e três estados nas ligações e o resolvemos pelo método de espalhamento inverso. Mostramos que ele exibe uma transição de fase de primeira ordem com um congelamento de vértices na fase ordenada.

Analisamos um modelo de oito vértices de férmions livres e propusemos uma nova relação funcional que nos permitiu calcular a energia livre por vértice do modelo. Mostramos que o modelo de spins associado corresponde ao modelo de Ising na rede Union Jack. Pretendemos utilizar este modelo exatamente solúvel para estudarmos o método de matrizes de transferência de canto ("corner transfer matriz") introduzido por Baxter para o cálculo de parâmetros de ordem.

Demonstramos que se um modelo de spin com interação de primeiros vizinhos satisfaz a relação triângulo estrela então os resultados obtidos na rede quadrada podem imediatamente ser estendidos, e de maneira simples, para as redes triangular e hexagonal, eliminando os contorcionismos necessários até então. Utilizando este método, reobtivemos o Potts crítico e estendemos as soluções auto-duais de Fateev e Zamolodchikov para a rede triangu-

lar.

Finalmente, analisamos as conjecturas existentes para a criticalidade do modelo de Potts nas redes de Kagomé e de dados , cuja principal conclusão nós acreditamos tenha sido a de inviabilizar o uso da relação triângulo estrela em outras redes, que não a triangular ou hexagonal. Conjecturamos ainda, a partir das degenerescências da rede Kagomé, uma expressão para a sua curva crítica a menos de uma constante. Uma análise numérica seria interessante para a determinação dessa constante.

APÊNDICE A

O CALOR LATENTE DO MODELO DE DEZ VÉRTICES

Como vimos no Capítulo III o modelo de dez vértices sofre uma transição de primeira ordem. Dependendo dos valores de ϵ_1 e ϵ_2 essa transição pode ocorrer ou no ponto $\eta = \pi$ e $v = \pi/2$ ou no ponto $\eta = \pi$ e $v = -\pi/2$ (veja figura 25). A determinação do calor latente é semelhante nos dois casos e nos restringiremos ao seu cálculo apenas no ponto $\eta = \pi$ e $v = \pi/2$.

Utilizando as equações (2.3), (3.57a) e (3.58a) podemos calcular a energia interna do sistema a temperaturas acima e abaixo da temperatura de transição \bar{T}

$$U(T_+) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln a - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{sh}[2x(\pi-\eta)] \text{sh}[x(\eta-2v)]}{x \text{sh}(\pi x) \text{ch}(\eta x)} dx \quad (\text{A.1})$$

$$U(T_-) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln a \quad (\text{A.2})$$

Desse modo o calor latente pode ser obtido pela expressão abaixo

$$L = \lim_{T \rightarrow \bar{T}} [U(T_+) - U(T_-)] = \lim_{\substack{\eta \rightarrow \pi \\ v \rightarrow \pi/2}} \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{sh}[2x(\pi-\eta)] \text{sh}[x(\eta-2v)]}{x \text{sh}(\pi x) \text{ch}(\eta x)} dx \right\} \quad (\text{A.3})$$

Uma vez que η e v estão próximos de π e $\pi/2$, respectivamente podemos expandir as funções hiperbólicas

$$\text{sh}[2x(\pi-\eta)] \sim 2x(\pi-\eta) \quad (\text{A.4a})$$

$$\text{sh}[x(\eta-2\sigma)] \sim x(\eta-2\sigma) \quad (\text{A.4b})$$

$$\text{ch}(\eta x) \sim \text{ch}(\pi x) \quad (\text{A.4c})$$

Substituindo essas expressões na equação (A.3) temos

$$L = \lim_{\substack{\eta \rightarrow \pi \\ \sigma \rightarrow \pi/2}} \left\{ -2 \frac{\partial}{\partial \beta} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\pi-\eta)(\eta-2\sigma)x \, dx}{\text{sh}(2\pi x)} \right\} \quad (\text{A.5})$$

Fazendo uso da integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{x \, dx}{\text{sh}(ax)} = \frac{\pi^2}{2a^2} \quad (\text{A.6})$$

a expressão (A.5) pode ser reduzida a

$$L = \frac{-1}{4} \lim_{\substack{\eta \rightarrow \pi \\ \sigma \rightarrow \pi/2}} \frac{\partial}{\partial \beta} [(\pi-\eta)(\eta-2\sigma)] \quad (\text{A.7})$$

Das equações (3.59) temos

$$\pi-\eta = \cos^{-1} \left[\frac{e^{\beta \epsilon_1} + e^{\beta \epsilon_2}}{2} \right] \quad (\text{A.8a})$$

$$\eta-2\sigma = \cos^{-1} \left[-\frac{e^{\beta \epsilon_1} + e^{\beta \epsilon_2}}{2} \right] - \cos^{-1} \left[\frac{2 - (e^{2\beta \epsilon_1} + e^{2\beta \epsilon_2})}{2(1 - e^{\beta(\epsilon_1 + \epsilon_2)})} \right] \quad (\text{A.8b})$$

substituindo-as na equação (A.7) obtemos o calor latente

$$L = \frac{1}{4} \left[\frac{\epsilon_1 e^{\bar{\beta} \epsilon_1} + \epsilon_2 e^{\bar{\beta} \epsilon_2}}{1 - e^{\bar{\beta}(\epsilon_1 + \epsilon_2)}} \right] \quad (\text{A.9})$$

onde $\bar{\beta} = \left(\frac{1}{k_B \bar{T}}\right)$ é obtida a partir da equação de criticalidade

$$e^{\bar{\beta}\epsilon_1} + e^{\bar{\beta}\epsilon_2} = 2$$

(A.10)

APÊNDICE B

PROPRIEDADES DAS FUNÇÕES ELÍPTICAS E DAS FUNÇÕES TETA

Neste Apêndice apresentamos de maneira sucinta algumas propriedades das funções elípticas e das funções teta que são úteis para uma melhor compreensão do Capítulo IV.

Integral elíptica completa de primeira espécie

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \alpha}} d\alpha \quad (\text{B.1})$$

Notação $K' = K(k')$, onde $k' = \sqrt{1 - k^2}$ é o módulo complementar.

Mudança de módulo:

$$K\left(\frac{k}{k'}\right) = k' K(k) \quad (\text{B.2a})$$

$$K\left(\frac{1}{k}\right) = k K(k) + i K(k') \quad (\text{B.2b})$$

$$K\left(\frac{1-k}{1+k}\right) = \frac{1+k}{2} K(k') \quad (\text{B.2c})$$

$$K\left(\frac{2\sqrt{k'}}{1+k}\right) = (1+k) K(k) \quad (\text{B.2d})$$

As funções elípticas sn , cn e dn têm as seguintes representações produto:

$$\text{sn } u = 2q^{1/4} k^{1/2} \text{sen}\left(\frac{\pi u}{2K}\right) \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1 - 2q^{2n} \cos\left(\frac{\pi u}{K}\right) + q^{4n}}{1 - 2q^{2n-1} \cos\left(\frac{\pi u}{K}\right) + q^{4n-2}} \quad (\text{B.3a})$$

$$cn u = 2q^{1/4} k'^{1/2} k^{-1/2} \cos\left(\frac{\pi u}{2K}\right) \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1 + 2q^{2n} \cos\left(\frac{\pi u}{K}\right) + q^{4n}}{1 - 2q^{2n-1} \cos\left(\frac{\pi u}{K}\right) + q^{4n-2}} \quad (\text{B.3b})$$

$$dn u = k'^{1/2} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1 + 2q^{2n-1} \cos\left(\frac{\pi u}{K}\right) + q^{4n-2}}{1 - 2q^{2n-1} \cos\left(\frac{\pi u}{K}\right) + q^{4n-2}} \quad (\text{B.3c})$$

onde $q = e^{-\frac{\pi K'}{K}}$

	períodos	zeros	polos
$sn u$	$4mK + 2nK'i$	$2mK + 2nK'i$	$2mK + (2n+1)K'i$
$cn u$	$4mK + 2n(K + K'i)$	$(2m+1)K + 2nK'i$	$2mK + (2n+1)K'i$
$dn u$	$2mK + 4nK'i$	$(2m+1)K + (2n+1)K'i$	$2mK + (2n+1)K'i$

u^*	$-u$	$K/2$	$iK'/2$	$u + K$	$u + iK'$
$sn u^*$	$-sn u$	$\frac{1}{\sqrt{1+k'}}$	$\frac{i}{\sqrt{k'}}$	$\frac{cn u}{dn u}$	$\frac{1}{k sn u}$
$cn u^*$	$cn u$	$\frac{\sqrt{k'}}$ $\sqrt{1+k'}$	$\frac{\sqrt{1+k'}}$ $\sqrt{k'}$	$-k' \frac{sn u}{dn u}$	$-\frac{i}{k} \frac{dn u}{sn u}$
$dn u^*$	$dn u$	$\sqrt{k'}$	$\sqrt{1+k'}$	$\frac{k'}{dn u}$	$-\frac{i}{k} \frac{cn u}{sn u}$

transformações de módulo:

1) $k \rightarrow 1/k$

$$sn(ku, 1/k) = k sn(u, k) \quad (\text{B.4a})$$

$$cn(ku, 1/k) = dn(u, k) \quad (\text{B.4b})$$

$$\operatorname{dn}(ku, 1/k) = \operatorname{cn}(u, k) \quad (\text{B.4c})$$

$$2) \quad k \rightarrow \frac{ik}{k'}$$

$$\operatorname{sn}(k'u, ik/k') = k' \frac{\operatorname{sn}(u, k)}{\operatorname{dn}(u, k)} \quad (\text{B.5a})$$

$$\operatorname{cn}(k'u, ik/k') = \frac{\operatorname{cn}(u, k)}{\operatorname{dn}(u, k)} \quad (\text{B.5b})$$

$$\operatorname{dn}(k'u, ik/k') = \frac{1}{\operatorname{dn}(u, k)} \quad (\text{B.5c})$$

$$3) \quad k \rightarrow \frac{2\sqrt{k}}{1+k} \quad (\text{transformação de Landen})$$

$$\operatorname{sn}\left[(1+k)u, \frac{2\sqrt{k}}{1+k}\right] = \frac{(1+k) \operatorname{sn}(u, k)}{1+k \operatorname{sn}^2(u, k)} \quad (\text{B.6a})$$

$$\operatorname{cn}\left[(1+k)u, \frac{2\sqrt{k}}{1+k}\right] = \frac{\operatorname{cn}(u, k) \operatorname{dn}(u, k)}{1+k \operatorname{sn}^2(u, k)} \quad (\text{B.6b})$$

$$\operatorname{dn}\left[(1+k)u, \frac{2\sqrt{k}}{1+k}\right] = \frac{1 - k \operatorname{sn}^2(u, k)}{1+k \operatorname{sn}^2(u, k)} \quad (\text{B.6c})$$

Identities:

$$\operatorname{sn}^2 u + \operatorname{cn}^2 u = 1 \quad (\text{B.7a})$$

$$\operatorname{dn}^2 u + k^2 \operatorname{sn}^2 u = 1 \quad (\text{B.7b})$$

$$\operatorname{sn}(u \pm v) = \frac{\operatorname{sn} u \operatorname{cn} v \operatorname{dn} v \pm \operatorname{sn} v \operatorname{cn} u \operatorname{dn} u}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 u \operatorname{sn}^2 v} \quad (\text{B.7c})$$

$$\operatorname{cn}(u \pm v) = \frac{\operatorname{cn} u \operatorname{cn} v \mp \operatorname{sn} u \operatorname{sn} v \operatorname{dn} u \operatorname{dn} v}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 u \operatorname{sn}^2 v} \quad (\text{B.7d})$$

$$\operatorname{dn}(u \pm v) = \frac{\operatorname{dn} u \operatorname{dn} v \mp k^2 \operatorname{sn} u \operatorname{sn} v \operatorname{cn} u \operatorname{cn} v}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 v \operatorname{sn}^2 u} \quad (\text{B.7e})$$

Vejamos agora algumas propriedades das funções teta que definiremos a partir dos produtos:

$$\theta_1(u) = 2q^{1/4} \operatorname{sn} u \prod_{n=1}^{\infty} (1 - 2q^{2n} \cos 2u + q^{4n})(1 - q^{2n}) \quad (\text{B.8a})$$

$$\theta_2(u) = 2q^{1/4} \cos u \prod_{n=1}^{\infty} (1 + 2q^{2n} \cos 2u + q^{4n})(1 - q^{2n}) \quad (\text{B.8b})$$

$$\theta_3(u) = \prod_{n=1}^{\infty} (1 + 2q^{2n-1} \cos 2u + q^{4n-2})(1 - q^{2n}) \quad (\text{B.8c})$$

$$\theta_4(u) = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - 2q^{2n-1} \cos 2u + q^{4n-2})(1 - q^{2n}) \quad (\text{B.8d})$$

u^*	$u + \pi$	$u + \pi\tau$	$u + \pi/2$	$u + \pi\tau/2$	$-u$	zeros
$\theta_1(u^*)$	$-\theta_1(u)$	$-\frac{e^{-2iu}}{q} \theta_1(u)$	$\theta_2(u)$	$i q^{-1/4} e^{-iu} \theta_4(u)$	$-\theta_1(u)$	$2m\frac{\pi}{2} + 2n\frac{\pi\tau}{2}$
$\theta_2(u^*)$	$-\theta_2(u)$	$\frac{e^{-2iu}}{q} \theta_2(u)$	$-\theta_1(u)$	$q^{-1/4} e^{-iu} \theta_3(u)$	$\theta_2(u)$	$(2m-1)\frac{\pi}{2} + 2n\frac{\pi\tau}{2}$
$\theta_3(u^*)$	$\theta_3(u)$	$\frac{e^{-2iu}}{q} \theta_3(u)$	$\theta_4(u)$	$q^{-1/4} e^{-iu} \theta_2(u)$	$\theta_3(u)$	$(2m-1)\frac{\pi}{2} + (2n-1)\frac{\pi\tau}{2}$
$\theta_4(u^*)$	$\theta_4(u)$	$\frac{e^{-2iu}}{q} \theta_4(u)$	$\theta_3(u)$	$i q^{-1/4} e^{-iu} \theta_1(u)$	$\theta_4(u)$	$2m\frac{\pi}{2} + (2n-1)\frac{\pi\tau}{2}$

onde $\tau = \frac{iK'}{K}$ e $q = e^{-\frac{\pi K'}{K}}$.

Definições:

$$\Theta(u) = \Theta_4\left(\frac{\pi u}{2K}\right) \quad (\text{B.9a})$$

$$H(u) = \Theta_1\left(\frac{\pi u}{2K}\right) \quad (\text{B.9b})$$

$$\Theta_1(u) = \Theta_3\left(\frac{\pi u}{2K}\right) \quad (\text{B.9c})$$

$$H_1(u) = \Theta_2\left(\frac{\pi u}{2K}\right) \quad (\text{B.9d})$$

Conexão com as funções elípticas:

$$\operatorname{sn} u = \frac{1}{\sqrt{K'}} \frac{H(u)}{\Theta(u)} \quad (\text{B.10a})$$

$$\operatorname{cn} u = \sqrt{\frac{K'}{K}} \frac{H_1(u)}{\Theta(u)} \quad (\text{B.10b})$$

$$\operatorname{dn} u = \sqrt{K'} \frac{\Theta_1(u)}{\Theta(u)} \quad (\text{B.10c})$$

APÊNDICE C
ADIÇÃO DE FUNÇÕES TETA

Neste apêndice queremos derivar as expressões (4.24) e (4.27). Começaremos pela primeira que envolve adição de funções teta.

Com o auxílio do apêndice B podemos escrever

$$\frac{\operatorname{sn}^2 \eta - \operatorname{sn}^2 u}{\operatorname{sn}^2 \eta \operatorname{dn}^2 u} = \frac{\operatorname{cn}^2 u - \operatorname{cn}^2 \eta}{\operatorname{sn}^2 \eta \operatorname{dn}^2 u} = \frac{H_1^2(u) \Theta^2(\eta) - H_1^2(\eta) \Theta^2(u)}{H^2(\eta) \Theta_1^2(u)} \quad (\text{C.1})$$

O numerador de (C.1), que chamaremos $G(\mu')$, pode ser reescrito

$$G(\mu') = \Theta_2^2(\mu') \Theta_4^2(\eta') - \Theta_2^2(\eta') \Theta_4^2(\mu') \quad (\text{C.2})$$

onde $\mu' = \frac{\pi u}{2k}$ e $\eta' = \frac{\pi \eta}{2k}$

Queremos reduzir a soma (C.2) a uma única expressão ou, no jargão, encontrar a regra de adição. As funções teta são funções inteiras e quase-periódicas e podem ser expressas como um produto dos seus zeros (como um polinômio). Não existe, porém, uma receita para a obtenção de $G(\mu')$. Usualmente fazem-se ensaios com algumas funções $G(\mu')$ mantendo-se em mente (se possível) os zeros da soma. Rebuscando-se tal solução, a adição estará correta quando todos os zeros da soma são também zeros da função encontrada $G(\mu')$ e vice-versa. Felizmente, os critérios de ordem e característica das funções teta auxiliam bastante no encaminhamento do problema.

A função $G(\mu')$ é uma função teta de segunda ordem e característica +1, isto é

$$G(\mu' + \pi) = + G(\mu') \quad (\text{C.3a})$$

$$G(\mu' + \pi\tau) = \left[\frac{1}{q} e^{-2\ell\mu} \right]^2 G(\mu') \quad (\text{C.3b})$$

A característica de uma função teta é o sinal que aparece em (C.3a) (no caso +1). A ordem de uma função teta é a potência que aparece em (C.3b) (no caso, 2).

Analisemos a função $F(\mu') = \theta_1(\eta' - \mu') \theta_1(\eta' + \mu')$. Ela também é uma função teta de segunda ordem e característica +1 pois

$$F(\mu' + \pi) = F(\mu') \quad (\text{C.4a})$$

$$F(\mu' + \pi\tau) = \left[\frac{1}{q} e^{-2\ell\mu} \right]^2 F(\mu') \quad (\text{C.4b})$$

Podemos então escrever*

$$\theta_2^2(\mu') \theta_4^2(\eta') - \theta_2^2(\eta') \theta_4^2(\mu') = C \theta_1(\eta' - \mu') \theta_1(\eta' + \mu') \quad (\text{C.5})$$

onde C é uma constante. Para a determinação de C façamos, por exemplo, $\mu' = \pi\tau/2$. Do Apêndice B segue-se que:

$$\theta_4\left(\frac{\pi\tau}{2}\right) = 0 \quad (\text{C.6a})$$

$$\theta_2\left(\frac{\pi\tau}{2}\right) = q^{-1/4} \theta_3(0) \quad (\text{C.6b})$$

$$\theta_1\left(\eta' - \frac{\pi\tau}{2}\right) \theta_1\left(\eta' + \frac{\pi\tau}{2}\right) = q^{-1/2} \theta_4^2(\eta') \quad (\text{C.6c})$$

Substituindo essas expressões em (C.5) com $\mu' = \pi\tau/2$

* Uma vez que a combinação linear de $n+1$ funções teta de ordem n é uma combinação linear dependente.

obtemos

$$C = \theta_3^2(0) \quad (C.7)$$

E, portanto, teremos

$$\theta_2^2(u')\theta_4^2(\eta') - \theta_2^2(\eta')\theta_4^2(u') = \theta_3^2(0)\theta_1(\eta'-u')\theta_1(\eta'+u')$$

ou

$$H_1^2(u)\Theta^2(\eta) - H_1^2(\eta)\Theta^2(u) = \Theta_1^2(0)H(\eta-u)H(\eta+u) \quad (C.8)$$

Vamos agora obter a expressão (4.27). Utilizando a expansão produto da função cn (apêndice B) podemos escrever

$$\begin{aligned} \ln \left[\frac{\text{cn}(u+ik')}{\text{cn}u} \right] &= \ln \left[\frac{\cos \frac{\Pi}{2k}(u+ik')}{\cos \left(\frac{\Pi u}{2k} \right)} \right] + \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \ln \left\{ \frac{[1-2q^{2n-1} \cos \left(\frac{\Pi u}{k} \right) + q^{4n-2}][1-2q^{2n} \cos \frac{\Pi}{k}(u+k+ik') + q^{4n}]}{[1-2q^{2n-1} \cos \frac{\Pi}{k}(u+ik') + q^{4n-2}][1-2q^{2n} \cos \frac{\Pi}{k}(u+k) + q^{4n}]} \right\} \end{aligned} \quad (C.9)$$

Os logaritmos que aparecem no segundo termo do segundo membro de (C.9) podem ser expandidos através da expressão

$$-\frac{1}{2} \ln [1-2p \cos x + p^2] = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{p^m}{m} \cos(mx) \quad (C.10)$$

De maneira que o segundo termo terá duas somas. Uma delas pode ser efetuada imediatamente via série geométrica: $\sum_{n=1}^{\infty} x^n = \frac{x}{1-x}$. De modo que o segundo termo pode ser reescrito como

$$2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m(1-q^{2m})} \left[q^m \left(\cos \frac{m\pi}{k} (u+ik') - \cos \left(\frac{m\pi u}{k} \right) \right) + \right. \\ \left. + q^{2m} \left(\cos \frac{m\pi}{k} (u+k) - \cos \frac{m\pi}{k} (u+k+ik') \right) \right] \quad (C.11)$$

Para o primeiro termo de (C.9) utilizamos a expansão

$$\ln \left[2 \cos \frac{x}{2} \right] = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1} \cos mx}{m} \quad (C.12)$$

de maneira que ele pode ser reescrito como

$$- \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} \left[\cos \frac{m\pi}{k} (u+k+ik') - \cos \frac{m\pi}{k} (u+k) \right] \quad (C.13)$$

Finalmente, somando (C.11) e (C.13) obtemos

$$\ln \left[\frac{cn(u+ik')}{cnu} \right] = -2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[2q^n + (-1)^n (1+q^{2n})] \operatorname{sen} \left(\frac{\pi n i k'}{2k} \right) \operatorname{sen} \frac{\pi n}{k} \left(u + \frac{ik'}{2} \right)}{n(1-q^{2n})} \quad (C.14)$$

REFERÊNCIAS

1. Stanley, H.E. (1971) "Phase transitions and critical phenomena", Claredon Press, Oxford.
2. Van der Waals, J.P. (1873), tese de doutorado.
3. Langevin, P. (1905), J.de Phys., 4, 678.
4. Weiss, P. (1907), J.de Phys., 6, 661.
5. Thompson, C.J. (1974), Commun.Math, Phys., 33, 53.
6. Ising, E. (1925), Z.Phys., 31, 253.
7. Onsager, L. (1944), Phys.Rev., 65, 117.
8. Peierls, R. (1936), Proc.Cambridge Phys.Soc. 32, 477.
9. Kramers, H.A. e Wannier, G.H. (1941), Phys.Rev. 60, 252.
10. Yang, C.N. (1952), Phys.Rev., 85, 809.
11. Potts, R.B. (1952), Proc.Camb.Philos.Soc. 48, 106.
12. Baxter, R.J. (1973), J.Phys.C., 6, L445.
13. Baxter, R.J., Temperley H.N.V. e Ashley S.E. (1978), Proc.R. Soc., A358, 535.
14. Alexander, S. (1975), Phys.Lett.A 54, 353.
15. Bretz, M. (1977), Phys.Rev.Lett. 38, 501.
16. Tejwani, M.J., Ferreira, O. e Vilches, E. (1980), Phys.Rev.Lett., 44, 152.
17. Berker, A.N., Ostlund S. e Putnam, F.A. (1978), Phys.Rev.B 17, 3650.
18. Gouyet, J.F., Sapoval, B. e Pfenty P. (1980). J.Phys.Lett., 41, L115.
19. Berlin, T.H. e Kac M. (1952), Phys.Rev. 86, 821.
20. Ashkin, J. e Teller, E. (1943), Phys.Rev. 64, 178.
21. Felício, J.R.D. (1982), tese de doutoramento, IFQSC/USP.
22. Baxter, R.J. e Wu F.Y. (1973), Phys.Rev.Lett. 31, 1294.
23. Pauling, L. (1935), J.Am.Chem.Soc. 57, 117.
24. Lieb, E.H. (1967), Phys.Rev.Lett., 18, 1046.

25. Baxter, R.J. (1972), *Annals of Phys.*, 70, 193.
26. Andrews, G.E., Baxter, R.J. e Forrester, P.J. (1984), *J. Stat. Phys.* 5, 193.
27. Baxter, R.J. (1980), *J. Phys. A* 13, L61.
28. Gibbs, J.W. (1902). "Elementary principles in statistical mechanics", Yale Univ. Press.
29. Alcaraz, F.C. e Köberle, R. (1980), *J. Phys. A* 13, L 153.
30. Alcaraz, F.C. e Jacobs, L. (1982), *J. Phys. A* 15, L 357.
31. Barber, M.N. e Duxbury, P.M. (1982), *J. Stat. Phys.* 29, 427.
32. Takahashi, H. (1941), *Proc. Phys. Mat. Soc. Jap* 23, 1069.
33. Bethe, H. (1931), *Z. Phys.* 71, 205.
34. Baxter, R.J. (1972), *An. of Phys.* 70, 323.
35. Schultz, C.L. (1981), *Phys. Rev. Lett.* 46, 629.
36. Perk, J.H. e Schultz, C.L. (1981), *Phys. Lett.* 84A, 407.
37. Belavin, A.A. (1981), *Nucl. Phys.* B52, 180.
38. Zamolodchikov, A.B. (1979), *Commun. Math. Phys.* 69, 165.
39. Kasteleyn, P.W. (1975), "Fundamental problems in statistical mechanics", N. Holland Pu. Co. Amsterdam.
40. Temperley, H.N.V. e Lieb, E.H. (1971), *Proc. R. Soc.* A322, 251.
41. Baxter, R.J., Kelland, S.B. e Wu F.Y. (1976), *J. Phys. A* 9, 397.
42. Baxter, R.J. (1980) "Fundamental problems in statistical mechanics", N. Holland, 109.
43. Baxter, R.J. (1982) "Exactly solved models in statistical mechanics" London: Academic.
44. Karowski, M., Thun H.J., Truong, T.T. e Weisz, P.H. (1977) *Phys. Lett.*, 67B, 321.
45. Zamolodchikov, A.B. (1977), *Commun. Math. Phys.*, 55, 183.
46. Zamolodchikov, A.B. e Zamolodchikov Al.B (1978), *Nucl. Phys.*, B133, 525.
47. Berg, B., Karowski, M., Kurak, V. e Weisz, P.H. (1978), *Nucl. Phys.* B134, 125.
48. Zamolodchikov, A.B. e Zamolodchikov Al.B (1979), *Ann. of Phys.*, 120, 253.

49. Zamolodchikov A.B. (1979), Commun.Math.Phys. 66, 1.
50. Szyzi, I. "Phase transitions and critical phenomena". Domb e Green, 1, 269.
51. Stephen, M.J. e Mittag, L. (1972), Phys.Lett., 41A, 357.
52. Pokrowski, S.V. e Bashilov, Y.A. (1982), Commun.Math.Phys. 84, 103.
53. Wu, F.Y. e Wang, Y.K. (1976), J.Math.Phys., 17, 439.
54. Alcaraz, F.C. (1980), tese de doutoramento, IFQSC/USP.
55. Stroganov, Y. (1979), Phys.Lett. 74A, 116.
56. Jaekel, M.T. e Maillard, J.M., "Inverse functional relation on the Potts model", preprint, CEN-Saclay (1982).
57. Baxter, R.J. (1982), J.Stat.Phys., 28, 1.
58. Onody, R.N. e Karowski, M. (1983), J.Phys.A 16, L 31.
59. Gardner, C.S., Greene, J.M., Kruskal, M.D. e Miura, R.M. (1967), Phys.Rev.Lett., 19, 1095.
60. Lax, P.D. (1968), Commun.Pure Appl.Math. 21, 467.
61. Sklyanin, E.K., Takhtadzhyan, L.A. e Faddeev, L.D. (1979) Teor. Mat.Fiz 40, 3.
62. Sklyanin, E.K. (1979), Sov.Phys.Dokl. 24, 107.
63. Takhtadzhyan, L.A. e Faddeev, L.D. (1979), Russian Math.Surveys 34, 11.
64. Thacker, H.B. (1980), J.Math.Phys., 21, 1115.
65. Baxter, R.J. (1973), Ann. of Phys. 76, 1.
66. Baxter, R.J. (1973), Ann.of Phys. 76, 25.
67. Baxter, R.J. (1973), Ann.of Phys. 76, 48.
68. Lieb, E.H. (1967), Phys.Rev. 162, 162.
69. Glasser, M.L., Abraham, D.B. e Lieb, E.H. (1972), J.Math.Phys. 13, 887.
70. Yang, C.N. e Yang C.P. (1966), Phys.Rev. 150, 321 e 327.
71. Yang, C.P. (1967), Phys.Rev.Lett. 19, 586.
72. Maillard, J.M. e Yarel, T. (1984), J.Phys.A 17, 1251 e 1257.
73. Sogo, K., Uchinami, M., Akutsu, Y. e Wadati, M. (1982), Prog.Theor. Phys., 68, 508.

74. Sogo, K., Akutsu, Y. e Abe T. (1983), Prog.Theor.Phys., 70, 730 e 739.
75. Fan, C. e Wu F.Y. (1970), Phys.Rev.B 2, 723.
76. Belavin, A.A. e Zamolodchikov, A.B. (1982), Phys.Lett., 116B, 165.
77. Gradshteyn, I.S. e Ryzhik, I.M. "Table of integrals, series, and products" Academic Press, New York.
78. Utiyama, T. (1951), Prog.Theor.Phys., 6, 907.
79. Baxter, R.J. (1982), J.Stat.Phys. 28, 1.
80. Fateev, V.A. e Zamolodchikov, A.B. (1982), Phys.Lett., 92A, 37.
81. Kelland, S.B. (1974), Aust.J.Phys., 27, 813.
82. Onody, R.N. e Kurak, V. (1984), J.Phys.A 17, L 615.
83. Baxter, R.J. (1978), Phil.Trans.R.Soc. 289, 315.
84. Tsallis, C. (1982), J.Phys.C 15, L 757.
85. Wu, F.Y. (1979), J.Phys.C 12, L 645.
86. Enting, I.G. e Wu F.Y. (1982), J.Stat.Phys., 28, 351.