UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE INSTITUTO DE MATEMÁTICA, ESTATÍSTICA E FÍSICA

Modelos de Spin-1 Integráveis de Partículas com Tamanho

Uma Aplicação do Ansatz do Produto Matricial*

Wagner M. Pintos

Trabalho de Dissertação realizado sob a orientação do Prof. Dr. Matheus Jatkoske Lazo e apresentado ao Programa de Pós Graduação em Física - FURG, em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

 $\begin{array}{c} {\rm Rio\ Grande\ -\ RS}\\ 2016 \end{array}$

^{*}Trabalho financiado pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Dedico este trabalho ao meu falecido e grande amigo Airton (Leitão) Torma, que nos deixou muito cedo, e faz muita falta a todos que o conheceram.

I am made from the dust of the stars And the oceans flow in my veins Here I hide in the heart of the city Like a stranger coming out of the rain...

> **Rush** Trecho da música Presto.

Agradecimentos

- Agradeço primeiramente aos meus pais, por todo o apoio incondicional durante todos os momentos dificies que percorri.
- Ao meu orientador Matheus Lazo, por todo o apoio durante este percurso. Aos diversos esclarecimentos e discussões a respeito deste trabalho.
- A minha mulher Kelly Lopes de Paixão, que tanto me apoiou. Te amo muito!
- A toda a minha família. Dedico este trabalho principalmente a minha avó Nilza de Soares Machado, alicerce da nossa família, que sempre me aconselhou a tomar as melhores decisões na minha vida.
- Ao instituto de Matemática, Estatística e Física IMEF, e seus funcionários.
- Aos colegas da pós graduação, das conversas a respeito da pesquisa até os cafés no Centro de Convivência da Universidade.
- Aos excelentes professores que fazem parte do Programa de Pós Graduação da Furg.

Abstract

In this work we formulate two spin-1 integrable models of particles with size. In stochastic version, the first model describes the dynamics of diffusion and reaction of a single species of molecules in a discrete one-dimensional lattice, where the size of the molecules is an integer multiple of the distance between the sites of the lattice. The second model describes the diffusion of two distinct types of molecules not necessarily equal in size. For the exact solution of the models, we use the so-called matrix product ansatz that is a new formulation of Bethe ansatz. We also present in this work a brief review of Ising Model, Heisenberg and Hubbard models, the Bethe ansatz and the matrix product ansatz.

Resumo

Neste trabalho formulamos dois modelos integráveis de spin-1 de partículas com tamanho. Na versão estocástica, o primeiro modelo descreve a dinâmica de reação e difusão de uma única espécie de moléculas em uma rede unidimensional discreta, onde o tamanho das moléculas é um múltiplo inteiro da distância entre os sítios da rede. Já o segundo modelo, descreve a difusão de dois tipos distintos de moléculas com tamanhos não necessariamente iguais. Para obter a solução exata dos modelos, usamos o chamado *ansatz* do produto matricial que é uma nova formulação do *ansatz* de Bethe. Também apresentamos neste trabalho uma breve revisão dos modelos de Ising, Heisenberg e Hubbard, do *ansatz* de Bethe e do *ansatz* do produto matricial.

Sumário

1	Intr	odução	1
2	Os	Modelos de Ising, Heisenberg e Hubbard	5
	2.1	O Modelo de Ising	5
		2.1.1 Considerações Gerais do Modelo	6
		2.1.2 A Obtenção de Propriedades Físicas	$\overline{7}$
		2.1.3 O Modelo de Ising Unidimensional	8
	2.2	O Modelo de Heisenberg	9
		2.2.1 Álgebra do Grupo $SU(2)$	10
		2.2.2 O Modelo XXX	12
		2.2.3 O Modelo XXZ	14
	2.3	O Modelo de Hubbard	17
3	O A	Ansatz de Bethe	20
	3.1	Introdução	20
	3.2	Aplicação do Ansatz ao Modelo de Heisenberg	21
	3.3	A analise da Equação de Bethe	29
4	O A	Ansatz do Produto Matricial	30
	4.1	Introdução	30
	4.2	O Modelo de Heisenberg Anisotrópico com Exclusão	30
	4.3	A Aplicação do MPA	32
	4.4	A Equação de Bethe	37
5	Mo	delos de Spin 1 de Partículas com Tamanho	39
	5.1	Introdução	39
	5.2	Modelos de Spin 1 com uma lei de conservação	39
	5.3	Modelos de Spin 1 e duas leis de conservação	49
	5.4	O caso mais geral	53

6	Conclusões 6.1 Considerações Finais e Perspectivas Futuras	59 59	
Α	Figuras da Lei de Tamanho A.1 Representando as constantes Γ_{mo}^{kl}	60 60	
Re	Referências Bibliográficas		

Capítulo 1

Introdução

O objetivo principal deste trabalho é a formulação de modelos integráveis de spin-1 de partículas com tamanho. Para obter a solução exata dos modelos usaremos o chamado *ansatz* do produto matricial que é uma nova formulação do *ansatz* de Bethe – BA (que podem ser vistos como uma generalização não-linear da série de Fourier). Antes de iniciar a descrição dos modelos e do *ansatz* do produto matricial – MPA, é importante explicar o termo "modelos integráveis" que tem origem no estudo de modelos de teorias de campo em 1 + 1 espaço-tempo dimensões. Este termo se refere a uma família particular de equações diferenciais exatamente solúveis cuja solução pode ser obtida por meio da versão quântica do método de espalhamento inverso. O exemplo mais famoso de modelo integrável é a equação Sine-Gordon

$$\Box \psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) + \mathbf{m}^2 \sin \psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = 0 \tag{1.0.1}$$

para campos escalares $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})$ relativísticos, onde $\Box \equiv \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \partial_{\mathbf{t}}$. Por outro lado, o BA foi desenvolvido primeiramente em um contexto diferente. Descrevemos abaixo a sequência histórica do desenvolvimento deste *ansatz* assim como do novo *ansatz* do produto matricial.

A história do surgimento e desenvolvimento de sistemas exatamente solúveis, contendo muitos corpos em interação, teve origem em diferentes áreas da Física. Como por exemplo, no estudo de redes de spins unidimensionais iniciado por Bethe nos anos 30, nos trabalhos de Onsanger e Baxter em mecânica estatística clássica em duas dimensões, e na teoria de espalhamento de muitos corpos com matriz S fatorizável (veja, por exemplo, [VEKB92]). Embora estes modelos exatamente solúveis sejam de natureza distintas, todos eles podem ser descritos por um ansatz apropriado. Este ansatz é tradicionalmente chamado de ansatz de Bethe, desde sua formulação original por Hans Bethe em 1931 [Bet31]. Este ansatz foi posteriormente generalizado por Hulthen, Yang e Yang, Lieb, Sutherland, Baxter, Gaudin, e outros [Bax07; Gau83; LM96; Yan83]. Um sistema de muitos corpos é considerado exatamente solúvel ou integrável, se seu Hamiltoniano têm um número infinito de cargas independentes conservadas (para um modelo de rede de spins uni-dimensional) ou na matriz de transferência (associada a um modelo bi-dimensional da mecânica estatística). Enquanto modelos não interagentes são trivialmente integráveis, pois neste caso a dinâmica de muitos corpos se reduz à dinâmica de um único corpo, os modelos de muitos corpos interagentes nem sempre têm solução exata. Com o *ansatz* de Bethe os modelos interagentes exatamente solúveis se reduzem a um problema de dois corpos interagentes. Isto significa que a matriz de espalhamento de muitas partículas é igual ao produto de matrizes de espalhamento de duas partículas. Este fato leva a necessidade de satisfazer uma relação de auto-consistência para a matriz de espalhamento de duas partículas. Esta relação é conhecida como equação de Yang-Baxter [Jim90], sendo o ponto fundamental para a exata solubilidade desses modelos.

Em desenvolvimento paralelo, o método do espalhamento inverso quântico foi construído em [EKSF80; SF78; Skl82]. Este método relaciona o *ansatz* de Bethe à teoria das equações diferenciais completamente integráveis. Estas equações diferenciais, chamadas de equações de sólitons, podem ser resolvidas através do método do espalhamento inverso clássico, que por sua vez pode ser visto como uma generalização não-linear da transformada de Fourier. No método do espalhamento inverso quântico surge um objeto matemático, chamado de matriz \mathbf{R} , que desempenha um papel fundamental no estudo dos modelos exatamente solúveis. Uma importante propriedade da matriz \mathbf{R} é que ela satisfaz a equação de Yang-Baxter:

$$\mathbf{R}_{12}(\mu - \nu)\mathbf{R}_{13}(\mu)\mathbf{R}_{23}(\nu) = \mathbf{R}_{23}(\nu)\mathbf{R}_{13}(\mu)\mathbf{R}_{12}(\mu - \nu), \qquad (1.0.2)$$

onde os objetos R_{ab} são operadores lineares no produto tensorial de três espaços lineares $V_{123} =$ $V_1 \otimes V_2 \otimes V_3$, e os parâmetros $\mu \in \nu$, chamados de parâmetros espectrais, são números complexos. O operador R_{ab} é o *embedding* canônico de um operador R_{ab} que atua em $V_a \otimes V_b$ em V_{123} (por exemplo, $R_{12} = R_{12} \otimes I_3$, onde I_3 é o operador identidade em V_3). Para uma revisão sobre as soluções da equação de Yang-Baxter (1.0.2) veja, por exemplo, [Jim90]. É ainda importante mencionar que a matriz R é um gerador de modelos exatamente solúveis. Isto porque, dada uma representação para a matriz R, é possível construir um modelo de vértice da mecânica estatística exatamente solúvel. Com esta técnica muitos modelos foram formuladas e exatamente resolvidos (veja, por exemplo [LDF87]). Além disso, baseado neste método foi formulado o ansatz de Bethe algébrico. Este ansatz também está relacionado à teoria da matriz S fatorizável de Zamolodchikov [ZZ79]; à teoria dos modelos de redes exatamente solúveis da mecânica estatística (veja, por exemplo, [Bax07; Gau83; LM96; Yan83]); e à teoria de campos conforme [AABZ84; AABZ86]. Esta relação entre modelos integráveis da teoria de campo (relacionados a equações diferenciais com soluções exatas) e modelos de redes bi-dimensionais da mecânica estatística (relacionados a um problema de auto-valores de uma matriz de transferência T) é obtida a partir da discretização do espaço-tempo [AABZ84; AABZ86].

Desde o trabalho pioneiro de Bethe [Bet31] para a resolução do modelo Heisenberg, o *ansatz* de Bethe, assim como suas generalizações em diferentes formulações (coordenada e algébrico), provou ser uma ferramenta muito eficiente para a descrição dos auto-vetores de um grande

número de cadeias quânticas unidimensionais, e matrizes de transferência bi-dimensionais para problemas muito mais complexos do que o do modelo de Heisenberg (para uma revisão veja, por exemplo, [Bax07; Gau83; LM96; Yan83] e também [EK94; Sch77]). Por outro lado, apesar de todo o sucesso do ansatz de Bethe na resolução desses problemas, um grande número de modelos de interesse físico não podem ser tratados de forma exata. No entanto, a partir de meados dos anos 80 [IAT88; DPAH88; MFW92; AKZ92], descobriu-se que vários modelos não exatamente solúveis têm a auto-função do seu estado fundamental (auto-vetor com menor autovalor) exatamente descrita através de um *ansatz* chamado de *ansatz* do produto matricial. É importante salientar que, diferentemente do ansatz de Bethe, que descreve auto-vetores em geral, no caso desse *ansatz* do produto matricial, apenas o estado fundamental do sistema pode ser exatamente descrito. Neste ansatz, as amplitudes do estado fundamental são expressas em termos de um produto de matrizes, ou mais geralmente em termos de um produto de geradores de álgebras quadráticas [FCAR98]. Em um contexto distinto, este ansatz do produto matricial também foi aplicado com sucesso no cálculo da solução exata para a distribuição estacionária de probabilidades de alguns modelos estocásticos uni-dimensionais [BDP93]. Isto foi possível graças a similaridade entre a equação mestra, que descreve as flutuações temporais desses modelos, e a equação de Schrödinger com tempo Euclidiano. Tal similaridade permite associar um Hamiltoniano quântico a esses processos estocásticos. O exemplo mais simples de um desses processos estocásticos é o problema de difusão assimétrica de partículas excludentes em uma rede discreta unidimensional, onde o operador de evolução temporal, que governa as flutuações temporais do modelo, coincide com o Hamiltoniano anisotrópico do modelo de Heisenberg [Der; Lig99; Sch00; FCAR94], também chamado de modelo XXZ anisotrópico. Este modelo de exclusão assimétrica é exatamente solúvel pelo ansatz de Bethe, devido a sua relação com o modelo de Heisenberg.

Do estudo dos processos estocásticos unidimensionais, surgiu recentemente uma formulação diferente de um ansatz do produto matricial, chamado de ansatz do produto matricial dinâmico [SS95a; SS95b]. Diferentemente do ansatz anterior, para os modelos onde ele pode ser aplicado, este ansatz permite escrever as distribuições de probabilidades, para tempos arbitrários, em termos de um produto de matrizes dependentes do tempo. Este ansatz do produto matricial dinâmico mostrou-se inicialmente válido no problema de difusão assimétrica de partículas na rede [SS95a; SS95b; SW99], e mais recentemente [VPS; PS02] sua validade foi também confirmada para os casos do modelo exatamente integrável de difusão assimétrica de duas espécies de partículas na rede.

A validade deste *ansatz* para sistemas exatamente solúveis, descrevendo auto-estados quaisquer em termos de um produto de matrizes dependentes do tempo, motivou a conjetura de que todos os Hamiltonianos unidimensionais e matrizes de transferências bi-dimensionais exatamente solúveis, relacionados ou não aos processos estocásticos, poderiam também ser resolvidos por um ansatz do produto matricial [CJ04a; CJ04b; CJ03; CJ06] apropriado. Neste ansatz, diferentemente do ansatz do produto matricial dinâmico, as matrizes não dependem do tempo e sua validade é esperada para todos os modelos solúveis pelo ansatz de Bethe, descrevendo assim, quaisquer auto-funções em termos de produtos de matrizes. Usando este novo ansatz foi possível derivar resultados previamente obtidos através do ansatz de Bethe para um grande número de redes quânticas com uma ou duas leis de conservação globais, como por exemplo, o modelo XXZ; o modelo de spin-1 de Fateev-Zamolodchikov; o modelo de Izergin-Korepin; o modelo de Sutherland; o modelo t-J; o modelo de Hubbard, e outros [CJ04a; CJ04b]; assim como a solução exata do problema estocástico de exclusão assimétrica de partículas com tamanhos arbitrários [CJ03] e generalizações; e modelos de vértices com a solução exata da matriz de transferência do modelo de seis-vértices definido na rede quadrada [J07]. Neste ansatz do produto matricial, as componentes das auto-funções dos modelos exatamente solúveis, que de acordo com o ansatz de Bethe são normalmente dadas por uma combinação não linear de ondas planas, agora são descritas por produtos de operadores, ou matrizes, com propriedades algébricas apropriadas. Estas propriedades algébricas das matrizes que definem o ansatz são fixadas impondo a validade da equação de auto-valor para o operador do modelo integrável. A maior vantagem do ansatz, na solução e na busca de novos modelos exatamente solúveis, é sua simplicidade de ser implementado de forma unificada para os mais diversos problemas [CJ04a; CJ04b; CJ03; CJ06].

Neste trabalho faremos uma revisão de alguns modelos integráveis, do ansatz de Bethe em sua formulação original (chamado de anstaz de Bethe coordenada), e do novo ansatz do produto matricial. Além disso, formulamos modelos integráveis de spin-1 de partículas com tamanho. No capítulo 2 são apresentados os modelos de Ising, Heisenberg e Hubbard. O capítulo 3 é dedicado à obtenção da solução do modelo de Heisenberg pelo ansatz de Bethe coordenada. O solução do modelo de Heisenberg anisotrópico com exclusão de longa distância, obtida pelo ansatz do produto matricial, é apresentado no capítulo 4. No capítulo 5 formulamos os modelos de spin-1 de partículas com tamanho e obtemos suas soluções através do ansatz do produto matricial. Finalmente, no capítulo 6 apresentamos nossas conclusões e perspectivas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Os Modelos de Ising, Heisenberg e Hubbard

Neste capítulo vamos fazer uma revisão de três modelos unidimensionais muito importantes para a física do Estado Sólido. São eles, os modelos de Ising, Heisenberg e por fim, o modelo de Hubbard. Discutiremos a Hamiltoniana para cada um dos três modelos. A partir da formulação da Hamiltoniana do sistema estudado, extrairemos propriedades termodinâmicas dos modelos. Estamos ainda interessados em casos particulares onde esses modelos possuem solução exata. Para que isto aconteça, os modelos quânticos em rede discreta (Heisenberg e Hubbard) devem ser unidimensionais, e os modelos clássicos em rede discreta (Ising), devem ser em uma ou duas dimensões. Além disso, nos modelos que estudaremos, vamos considerar apenas interações entre primeiros vizinhos. Vale a ressalva de que, modelos com dimensão maior tornam o estudo muito complexo, e não tem como resultado uma solução analítica, sendo necessário o uso de métodos aproximativos, campo médio ou soluções numéricas.

Inicialmente, estudaremos o Modelo de Ising. Este modelo de spins clássicos foi o primeiro modelo proposto para se estudar o ferromagnetismo. Veremos como a Energia do modelo é construída através dos spins dos seus constituintes e, em seguida, como é possível obter quantidades físicas, tais como: Calor Específico, Energia Livre, e propriedades magnéticas como a susceptibilidade magnética e o comportamento da magnetização do objeto estudado. Em seguida, mostraremos como lidar com o Modelo Quântico de Heisenberg, introduzindo o modelo isotrópico XXX e o anisotrópico XXZ, apenas introduzindo uma constante de anisotropia Δ . A base matemática para a construção desses modelos é a álgebra do grupo SU(2), conhecida como a Álgebra do Momento Angular. Em suma, abordaremos um pouco a respeito do modelo de Hubbard, este que surgiu na tentativa de explicar a transição Metal-Isolante e o comportamento magnético dos metais de transição. O modelo de Hubbard também é muito utilizado ao tratarmos de materiais supercondutores em altas temperaturas.

2.1 O Modelo de Ising

O Modelo de Ising, proposto pelo físico e matemático alemão Ernest Ising (1900-1998) foi a primeira tentativa de explicar o fenômeno do Magnetismo através de uma teoria microscópica. Curiosamente, o estudo foi sugerido pelo seu orientador, também alemão, Wilhenlm Lenz (18881957). O modelo unidimensional foi resolvido na sua tese de Doutorado, em 1924. Modelos em duas dimensões são, no geral, mais difíceis de serem solucionados, devido justamente à sua complexidade. Neste caso, a solução levou exatos 20 anos para ser obtida pelo físico Lars Onsager, vencedor do prêmio nobel de química, em 1968. Onsager mostrou que em duas dimensões, existia uma temperatura critica tal qual, abaixo dela o modelo estudado era magnetizado. Em 1924, os resultados teóricos mostravam que o modelo unidimensional apresentava uma fase ferromagnética apenas a temperatura nula, falhando na descrição do magnetismo dos materiais. Na época não se sabia que a ausência da fase ferromagnética era um efeito da baixa dimensão do modelo (unidimensional).

Muitos modelos na física da matéria condensada podem ser vistos como uma extensão direta do Modelo de Ising. Veremos na próxima secção que o modelo de Heisenberg será uma extensão do modelo aqui estudado. Existem outros casos que evidenciam isto, porém não trataremos aqui[Bax07][ADK10].

2.1.1 Considerações Gerais do Modelo

O modelo é o de um magneto. Assumimos que um magneto é composto por moléculas que estão vinculadas em sítios numa grade regular. Cada molécula possui o seu magneto microscópico, uma espécie de agulha magnética, que irá se orientar sobre um certo eixo preferencial. Por simplicidade, Ising considerou que cada i-ésima molécula possuí-a duas possíveis configurações, denominada pela variável clássica de spin σ_i , "up" (+1 paralelo ao eixo) ou "down" (-1 anti-paralelo ao eixo), tal que:

$$\boldsymbol{\sigma} = \{\boldsymbol{\sigma}_1, \dots, \boldsymbol{\sigma}_N\},\tag{2.1.1}$$

seja o conjunto com todos os N spins do sistema. Vale ressaltar que no modelo quântico Heisenberg mudou esta variável 'clássica' por operadores de spins.

O nosso interesse é o de extrair informação física do modelo estudado. Para isso, precisamos construir a Hamiltoniana que, obviamente, será função dos spins σ 's. Costuma-se construí-la em duas partes

$$\mathsf{E}(\sigma) = \mathsf{E}_0(\sigma) + \mathsf{E}_1(\sigma), \tag{2.1.2}$$

sendo que, $E_0(\sigma)$, advém das forças intermoleculares dentro do magneto. Já $E_1(\sigma)$ é resultado da interação entre os spins individuais e o campo magnético externo aplicado, ou seja

$$\mathsf{E}_1(\sigma) = -\mathsf{H}\sum_{\mathfrak{i}}\sigma_{\mathfrak{i}},\tag{2.1.3}$$

de tal maneira que H é proporcional a componente do campo Magnético na direção do eixo pre-

ferencial antes citado. Portanto temos que realizar esta soma sobre todos os sítios. Ressaltamos que σ_i é o momento magnético da molécula i. Outro fato interessante é que, fisicamente, o momento magnético de uma molécula irá apontar para qualquer direção, não apenas up or down. Estudaremos em seguida um modelo mais geral, e com spin quântico, o Modelo de Heisenberg.

Devido toda esta discussão, podemos escrever a função de partição como sendo:

$$Z(H,T) = \sum_{\sigma} \exp\left\{-\left[E_0(\sigma) - H\sum_{i} \sigma_i\right]/kT\right\}.$$
(2.1.4)

Finalmente, o termo $E_0(\sigma)$ da Hamiltoniana (2.1.2) é devido a interação dos spins na grade. Define-se, no caso mais simples, com interação entre dois sítios por

$$\mathsf{E}_{0}(\sigma) = -J \sum_{\mathbf{i},\mathbf{j}} \sigma_{\mathbf{i}} \sigma_{\mathbf{j}}, \qquad (2.1.5)$$

onde a constante J define o tipo de interação, isto é, se for positivo, temos um modelo ferromagnético. Pois o estado de menor energia ocorre quando todos os spins apontam na mesma direção. Neste caso a interação ferromagnética tende a alinhar os spins do sistema ao campo aplicado. Se o valor for negativo, teremos o caso anti-ferromagnético. Para J nulo, não há interação entre os spins.

2.1.2 A Obtenção de Propriedades Físicas

A energia livre de um sistema termodinâmico é sempre proporcional ao tamanho do sistema. Espera-se portanto, que o limite

$$f(H,T) = -kT \lim_{N \to \infty} N^{-1} \ln Z_N(H,T), \qquad (2.1.6)$$

onde f(H, T) é a densidade por sítios da energia livre, exista. Já a energia interna por sítio pode ser obtida a partir de (2.1.6) como:

$$\mathfrak{u}(\mathsf{H},\mathsf{T}) = -\mathsf{T}^2 \frac{\partial}{\partial \mathsf{T}} \left[\frac{\mathsf{f}(\mathsf{H},\mathsf{T})}{\mathsf{T}} \right]. \tag{2.1.7}$$

Portanto o calor específico por sitio é dado por

$$C(H,T) = \frac{\partial}{\partial T} u(H,T). \qquad (2.1.8)$$

Analisando o comportamento do calor específico para dimensões maiores ou iguais à dois, verifica-se que mesmo a campo magnético nulo, mesmo em uma aproximação [Bax07] o calor específico é descontínuo para uma certa temperatura chamada de temperatura crítica. Diferenciando a função de partição com relação ao campo magnético e usando a expressão para energia livre, mostra-se que:

$$\mathcal{M}(\mathsf{H},\mathsf{T}) = -\frac{\partial}{\partial\mathsf{H}}\mathsf{f}(\mathsf{H},\mathsf{T}),\tag{2.1.9}$$

e como a Energia não muda ao trocarmos a orientação dos campos e magnetizações e as funções de partição e energia livre são funções pares de H, temos que M é uma função impar

$$M(-H,T) = -M(H,T).$$
 (2.1.10)

Conhecida a Magnetização $\mathcal{M}(H, T)$, temos que:

$$\chi(H,T) = \frac{\partial \mathcal{M}(H,T)}{\partial H}.$$
 (2.1.11)

2.1.3 O Modelo de Ising Unidimensional

Consideramos por simplicidade, uma grade unidimensional com N sítios, j = 1, ..., N, com interação apenas entre os spins vizinhos. Neste caso a função de partição é dada por:

$$Z_{N} = \sum_{\sigma} \exp\left\{K\sum_{j} \sigma_{j}\sigma_{j+1} + h\sum_{j} \sigma_{j}\right\},$$
(2.1.12)

onde definimos K = J/kT e h = H/kT. Devido a interação apenas entre primeiros vizinhos, a exponencial da função de partição pode ser fatorada em termos envolvendo apenas dois spins próximos, portanto

$$Z_{N} = \sum_{\sigma} \mathbf{V}(\sigma_{1}, \sigma_{2}) \mathbf{V}(\sigma_{2}, \sigma_{3}) \mathbf{V}(\sigma_{3}, \sigma_{4}) ... \mathbf{V}(\sigma_{N}, \sigma_{1}), \qquad (2.1.13)$$

onde

$$\mathbf{V}(\sigma, \sigma') = \exp\left[\mathsf{K}\sigma\sigma' + \frac{1}{2}\mathsf{h}(\sigma + \sigma')\right], \qquad (2.1.14)$$

são elementos de uma matriz simétrica \mathbf{V} , tal que

$$\mathbf{V}(\sigma, \sigma') = \mathbf{V}(\sigma', \sigma). \tag{2.1.15}$$

Desta forma, a função de partição pode ser reescrita como:

$$Z_{N} = \operatorname{Trace} V^{N}, \qquad (2.1.16)$$

tal que \mathbf{V} corresponde a soma sobre todas as configurações dos sítios com a rede. Esta matriz é conhecida por matriz de transferência.

Seja, \vec{x}_1 e \vec{x}_2 auto-vetores de V, e \vec{P} uma matriz dois-por-dois que diagonaliza o sistema, podemos mostrar que:

$$\mathsf{Z}_{\mathsf{N}} = \lambda_1^{\mathsf{N}} + \lambda_2^{\mathsf{N}}, \qquad (2.1.17)$$

onde escolhemos λ_1 como sendo o maior dos auto-valores, ou seja, $|\lambda_1/\lambda_2| > 1$, resolvendo a equação de auto-valores e auto-vetores, obtemos que

$$f(H,T) = -kT \ln[e^{K} \cosh(h) + (e^{2K} \sinh^{2}(h) + e^{-2K})^{\frac{1}{2}}].$$
(2.1.18)

Assim, a Magnetização será:

$$M(H,T) = \frac{e^{\kappa} \sinh(h)}{[e^{2\kappa} \sinh^2(h) + e^{-2\kappa}]^{\frac{1}{2}}},$$
(2.1.19)

que é uma função analítica [Bax07] dependente de qualquer valor real de H e temperatura positiva. Porém, uma função analítica não possui derivadas descontínuas. Portanto, nestas condições T > 0, não haverá transição de fase, pois se h = 0 temos M(0, T) = 0. Só haverá magnetização por sítio não nula quando T = 0, o que é inconsistente para descrever o ferromagnetismo a temperatura não nula.

Podemos calcular o valor médio da interação entre quaisquer dois sítios como sendo

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \mathsf{Z}_{\mathsf{N}}^{-1} \mathsf{Trace} \mathbf{S} \mathbf{V}^{\mathsf{j}-\mathsf{i}} \mathbf{S} \mathbf{V}^{\mathsf{N}+\mathsf{i}-\mathsf{j}},$$
 (2.1.20)

onde S é uma matriz diagonal e a condição $0 \le j - i \le N$ seja satisfeita. O mesmo vale para

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{\text{Trace} S V^N}{Z_N},$$
 (2.1.21)

sendo que vale ressaltar a invariância sobre translação que é explicitamente mostrada nas expressões acima. Surge uma nova forma de calcular a magnetização do sistema, visto que

$$M(H,T) = \langle \sigma_i \rangle. \tag{2.1.22}$$

2.2 O Modelo de Heisenberg

E convencional introduzir as bases matemáticas aqui utilizadas antes de prosseguir com o estudo do Modelo descrito na próxima seção. Trataremos com elementos de um certo espaço vetorial \mathbf{U} , cujos elementos são obtidos a partir do produto Tensor $\mathbf{U} \otimes \mathbf{U}$.

Define-se as matrizes

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{A} \otimes \mathbb{I}, \quad \mathbf{B}_2 = \mathbb{I} \otimes \mathbf{B}, \tag{2.2.1}$$

tal que $\{A, B\} \in \mathbb{V}$. Algumas propriedades do produto tensor são:

$$(A \otimes B)(C \otimes D) = AC \otimes BD,$$

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1},$$

$$(A \otimes B)^{T} = A^{T} \otimes B^{T}.$$
(2.2.2)

Vamos usar as matrizes de Pauli, mais a identidade, que juntas formam uma base para as matrizes 2×2 . O produto tensor de $A \otimes B$ será então uma matriz de dimensão 4×4 . Assim, dado as matrizes

$$\mathsf{A} = \begin{pmatrix} \mathsf{a}_{11} & \mathsf{a}_{12} \\ \mathsf{a}_{21} & \mathsf{a}_{22} \end{pmatrix},\tag{2.2.3}$$

e também

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix},$$
 (2.2.4)

o produto tensor $A\otimes B$ é definido como:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{pmatrix}.$$
(2.2.5)

2.2.1 Álgebra do Grupo SU(2)

Este grupo nada mais é do que o grupo que define a álgebra do momento angular, dada por

$$[J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k, \qquad (2.2.6)$$

de modo que J^{\pm} , e J^z são os geradores desta álgebra. Outras relações satisfeitas são:

$$[J^+, J^-] = 2J^z, \quad [J^z, J^{\pm}] = \pm J^{\pm}.$$
 (2.2.7)

Mais a respeito dá álgebra SU(2) e da matemática aqui descrita pode ser vista em [ADK10]. O Modelo de Heisenberg, cuja fundamentação matemática é a álgebra do grupo SU(2), nada mais é que uma versão quantica do modelo de Ising para explicar o fenômeno do magnetismo. Estudaremos o caso unidimensional, caso este que deu origem a uma área de estudos chamada de sistemas integráveis quânticos.

Consideramos que cada sitio de uma grade unidimensional possui uma agulha magnética quântica de spin $\frac{1}{2}$, livre para rotacionar. Representamos o espaço local de auto-estados do sistema por \mathbb{C}^2 com base na direção de z composta pelos vetores de estado que possuirá as componentes de spin $|\uparrow\rangle \in |\downarrow\rangle$ dada por

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}. \tag{2.2.8}$$

A dimensão total W do espaço é proporcional ao produto tensor de spins consistindo em um número N de sítios

$$W = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2.$$
(2.2.9)

Os operadores de spin são representados, para cada sítio, como:

$$\mathbf{S}_{\mathbf{i}}^{\xi} = \frac{1}{2}\sigma_{\mathbf{i}}^{\xi}, \quad \xi \in \{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}\},\tag{2.2.10}$$

onde as matrizes de Pauli são dadas por

$$\sigma^{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\sigma^{y} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$
$$\sigma^{z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

A Hamiltoniana do modelo de Heisenberg vem do produto escalar de dois magnetos (acoplamentos de dipolos magnéticos), considerando apenas a interação dos vizinhos próximos. Portanto:

$$\mathsf{H} = \sum_{i} \left(\mathsf{J}_{\mathsf{x}} \sigma_{i}^{\mathsf{x}} \sigma_{i+1}^{\mathsf{x}} + \mathsf{J}_{\mathsf{y}} \sigma_{i}^{\mathsf{y}} \sigma_{i+1}^{\mathsf{y}} + \mathsf{J}_{z} \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} \right),$$
(2.2.11)

onde o acoplamento J_{ξ} é tido como constante sobre a grade. Este é o modelo XYZ (Quando $J_x \neq J_y \neq J_z$). Quando $J_x = J_y \neq J_z$ temos o modelo XXZ, e quando $J_x = J_y = J_z$ temos o modelo XXX. Em seguida, apresentaremos outro caso.

Novamente surge a importância das condições de contorno para a grade. Tais condições podem ser justificadas pelas interações dos elementos da grade com as bordas. Então, sempre que necessário, faremos:

$$\alpha + N \equiv \alpha, \tag{2.2.12}$$

conhecida como condição periódica de contorno¹.

2.2.2 O Modelo XXX

O Modelo XXX é o caso isotrópico de (2.2.11) quando $J_x = J_y = J_z = -\frac{1}{2}$. Para isso, vamos reescrever a Hamiltoniana em termos das matrizes $\sigma_1 = \sigma \otimes \mathbb{I}$; e também $\sigma_2 = \mathbb{I} \otimes \sigma$. Assim:

$$\sigma_1^{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(2.2.13)

$$\sigma_{1}^{y} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\mathbf{i} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{i} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(2.2.14)

$$\sigma_1^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (2.2.15)

Por outro lado:

¹Em um elemento de um determinado material, os átomos nos extremos opostos (bordas) devem ser considerados interagentes. As propriedades Termodinâmicas do sistema independem destas condições para sistemas finitos, entretanto, tais considerações geram importantes resultados realísticos que são medidos em laboratório.

$$\sigma_2^{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$
(2.2.16)

$$\sigma_{2}^{\mathsf{y}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{i} & 0 & 0 \\ \mathbf{i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mathbf{i} \\ 0 & 0 & \mathbf{i} & 0 \end{pmatrix},$$
(2.2.17)

$$\sigma_2^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (2.2.18)

Então, a Hamiltoniana de dois sítios pode ser escrita como:

$$H_{12} = -\frac{1}{2}(\sigma_1^{x}\sigma_2^{x} + \sigma_1^{y}\sigma_2^{y} + \sigma_1^{z}\sigma_2^{z}), \qquad (2.2.19)$$

onde foi escolhido o sinal negativo para J. Neste caso, a Hamiltoniana descreve a interação ferromagnética de dois magnetos com spin $\frac{1}{2}$.

Podemos ainda reescrever essa hamiltoniana (2.2.19) como

$$\mathsf{H}_{12} = \frac{1}{2}\mathbb{I} - \mathcal{P},\tag{2.2.20}$$

onde ${\mathcal P}$ é o operador que permuta a configuração entre os sítios 1 e 2, chamado de Operador de Permutação, dado na forma matricial por:

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$
(2.2.21)

O Operador Coproduto δ é definido por:

$$\delta(\mathfrak{X}) = \mathfrak{X}_1 + \mathfrak{X}_2 = \mathfrak{X} \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \mathfrak{X}, \qquad (2.2.22)$$

onde $\mathfrak{X} \in \{\sigma^{\pm}, \sigma^z\}$. O caso mais geral, para N partículas será:

$$\delta^{(N)}(\mathfrak{X}) = \sum_{\mathfrak{i}} \mathfrak{X}_{\mathfrak{i}} = \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathfrak{X} \otimes \mathbb{I} \otimes \cdots \otimes \mathbb{I}.$$
(2.2.23)

O coproduto comuta com a Hamiltoniana, visto que o argumento é função das matrizes de Pauli. Este fato advém da simetria da álgebra $\mathfrak{su}(\mathfrak{s})$. Ou seja,

$$\left[\mathsf{H},\boldsymbol{\delta}^{(\mathsf{N})}(\boldsymbol{\mathfrak{X}})\right] = 0, \tag{2.2.24}$$

onde para o caso de N sítios

$$\mathsf{H} = \frac{1}{2} \sum_{i} \left(\sigma_i^{\mathsf{x}} \sigma_{i+1}^{\mathsf{x}} + \sigma_i^{\mathsf{y}} \sigma_{i+1}^{\mathsf{y}} + \sigma_i^{\mathsf{z}} \sigma_{i+1}^{\mathsf{z}} \right), \qquad (2.2.25)$$

o caso mais geral (exatamente solúvel). A comutação da Hamiltoniana com $\Delta^{(N)}$ significa que a mesma conserva o número total de spins para cima.

2.2.3 O Modelo XXZ

Temos o modelo XXZ ao introduzir uma anisotropia no sistema na direção de z. Isto ocorre quando temos uma interação J_z diferente das outras componentes. Vamos escolher por simplicidade, $J_x = J_y = -\frac{1}{2}$ e $J_z = -\frac{\Delta}{2}$, onde Δ é chamado de parâmetro de Anisotropia. O modelo XXZ é também chamado de Modelo de Heisenberg-Ising. A Hamiltoniana desse modelo é dada por:

$$\mathsf{H} = \frac{1}{2} \sum_{i} \left(\sigma_{i}^{\mathsf{x}} \sigma_{i+1}^{\mathsf{x}} + \sigma_{i}^{\mathsf{y}} \sigma_{i+1}^{\mathsf{y}} + \Delta \sigma_{i}^{\mathsf{z}} \sigma_{i+1}^{\mathsf{z}} \right).$$
(2.2.26)

A expressão (2.2.26) está definida no espaço de Hilbert, cuja dimensão é a mesma dada pela equação (2.2.9). Para descobrirmos o comportamento exato deste modelo anisotrópico, devemos analisar o sistema sob ponto de vista da constante de acoplamento Δ . Devemos levar em consideração as condições de contorno (2.2.12) nos sítios. Esperamos também que a teoria descrita pelo modelo XXZ, bem como o XXX, seja invariante ao atuarmos o operador de translação.

O caso $\Delta \neq 1$ foi resolvido em 1931 pelo físico, vencedor do Prêmio Nobel de Física de de 1967, Hans Bethe. Surge então o famoso Ansatz de Bethe. Sendo que, para $\Delta = 1$, voltamos para o modelo de Heisenberg XXX. Ou seja, a interação dos spins de vizinhos na grade se dá de forma isotrópica (Mesmo comportamento em todas as direções.). Existem outros casos para a constante de acoplamento, se $\Delta \to 0$, o modelo é chamado de XY, pois a componente z dos spins não contribuirá para a energia. Quando analisarmos os extremos $\Delta \to \pm \infty$, voltamos para o Modelo de Ising. Para verificarmos isto, basta tomar:

$$\begin{aligned} \mathsf{H}_{\text{Ising}} &= \lim_{\Delta \to \pm \infty} \frac{\mathsf{H}}{\Delta} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i} \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i} \tau_{i} \tau_{i+1}, \end{aligned}$$
 (2.2.27)

de forma que $\tau = \pm 1$ (Spin). Dizemos, devido a este limite, que o modelo XXZ é o Modelo de Heisemberg-Ising. Definimos o operador total de spin σ^{ξ}

$$\delta(\sigma^{\xi}) \equiv \sigma^{\xi} = \sum_{i} \sigma^{\xi}_{i}, \qquad (2.2.28)$$

análogo ao visto em (2.2.23). É possível mostrar que, dada esta definição, a relação de comutação

$$\left[\mathsf{H}, \boldsymbol{\sigma}^{\boldsymbol{\xi}}\right] = 0, \tag{2.2.29}$$

é sempre válida. Esta comutação é consequência da conservação do spin total do sistema pela Hamiltoniana. Temos que ressaltar a importância da terceira componente da construção de (2.2.26), devido a interação Δ . Esta componente terá um espectro de valores dado por

$$\left\{\frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, \dots, -\frac{N}{2} + 2, -\frac{N}{2} + 1, -\frac{N}{2}\right\}.$$

Vimos o caso em que o modelo XXZ retorna para o modelo de Ising $\Delta \to \pm \infty$. Se Δ é muito grande,

$$\frac{H}{\Delta} = \frac{1}{2} \sum_{i} \tau_{i} \tau_{i+1} + \mathcal{O}(\Delta^{-1}), \qquad (2.2.30)$$

construímos os seguintes estados do sistema:

$$|\uparrow\uparrow\dots\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix},$$
 (2.2.31)

$$|\downarrow\downarrow\downarrow\ldots\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\cdots\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$
 (2.2.32)

Isto significa que todos os spins estão alinhados para cima ou para baixo, sendo a interação ferromagnética $\Delta \gg 1$.

Se $\Delta \ll 1$, ocorre justamente o oposto. Os spins antiparalelos são favorecidos e o modelo será anti-ferromagnético. Outros valores da constante de acoplamento torna o sistema não trivial.

Como exemplo dessa não trivialidade, vamos olhar para a Hamiltoniana de dois sítios, temos que

$$\mathsf{H}_{12} = -(\sigma^{\mathsf{x}} \otimes \sigma^{\mathsf{x}} + \sigma^{\mathsf{y}} \otimes \sigma^{\mathsf{y}} + \Delta \sigma^{\mathsf{z}} \otimes \sigma^{\mathsf{z}}) \tag{2.2.33}$$

mas, calculando separadamente termo a termo, obtemos:

$$\sigma^{\mathbf{x}} \otimes \sigma^{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
(2.2.34)

e também

$$\sigma^{\mathbf{y}} \otimes \sigma^{\mathbf{y}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad (2.2.35)$$

е

$$\Delta \sigma^{z} \otimes \sigma^{z} = \begin{pmatrix} \Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta \end{pmatrix}.$$
 (2.2.36)

Portanto

$$H_{12} = \begin{pmatrix} -\Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta & -2 & 0 \\ 0 & -2 & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta \end{pmatrix}.$$
 (2.2.37)

O Conjunto de auto-valores $p(\lambda)$ são extraídos ao calcularmos

$$\mathbf{p}(\boldsymbol{\lambda}) = \det(\mathbf{H}_{12} - \boldsymbol{\lambda}\mathbf{I}),$$

logo temos que calcular

$$\det \begin{pmatrix} -\Delta - \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta - \lambda & -2 & 0 \\ 0 & -2 & \Delta - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta - \lambda \end{pmatrix} = 0.$$
(2.2.38)

O resultado do determinante acima é

$$(-\Delta - \lambda)^2 (\Delta^2 - 2\lambda\Delta + \lambda^2 - 4) = 0 \qquad (2.2.39)$$

e as raízes são $\lambda = -\Delta$, $\lambda = \Delta - 2$ e $\lambda = \Delta + 2$. Se $\Delta > 1$ o estado fundamental do sistema possui energia $E = -\Delta$, sendo a energia correspondente aos auto-estados $|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle\rangle$, ou seja, o caso ferromagnético. A magnetização é equivalente ao Spin total S^z . Este resultado pode ser generalizado para qualquer valor para o número de sítios.

Quando $\Delta < 1$, o auto-estado correspondente à menor energia $\mathsf{E} = \Delta - 2$ será

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle$$

e a magnetização é nula. Neste caso temos um estado anti-ferromagnético. O estado fundamental é duplamente degenerado quando $\Delta = 1$. Neste caso temos o que é conhecida como uma transição quântica de fase, ou seja, uma transição que não ocorre devido a flutuações térmicas e sim ao variarmos os parâmetros na construção do Hamiltoniano. A introdução do parâmetro anisotrópico Δ nos possibilita distinguir a fase magnética do sistema, pois o comportamento seja ferromagnético ou anti-ferromagnético depende unicamente de como funciona o acoplamento dos spins da rede. Portanto, se $\Delta > 1$ o estado do sistema será ferromagnético, $\Delta < 1$ antiferromagnético e quando $\Delta = 1$ teremos um estado multi-degenerado.

2.3 O Modelo de Hubbard

O Modelo de Hubbard é um dos modelos mais importantes da física da matéria condensada. Trata-se de um caso especial da interação de elétrons com forças de curto alcance em uma dimensão. Este modelo foi introduzido na tentativa de explicar a transição Metal-Isolante (Transição de Mott) e o magnetismo dos chamados metais de transição. O modelo também descreve o comportamento dos materiais que possuem correlações entre os elétrons com bandas estreitas. Um exemplo disso são os materiais supercondutores em altas temperaturas [Rot66]. Neste caso, os elétrons de condução estão situados em sítios discretos em uma grade, podendo saltar de um sítio para um vizinho próximo. O modelo foi extensivamente estudado por Yang e Gaudin, e também por Lieb e Flicker em 1967. Em seguida alguns avanços foram obtidos por Lieb e Wu, em 1968. No modelo de Hubbard, os elétrons encontram-se em sítios discretos em uma grade, e os elétrons se movem pela grade seguindo uma dinâmica descrita por um Hamiltoniano com interações envolvendo apenas os vizinhos próximos. Se duas partículas (elétrons) estiverem no mesmo sítio, sua energia de interação é dada por uma constante $U \ge 0$. Logo esta energia potencial será proporcional a ao número de sítios duplamente ocupados. A energia potencial do sistema será o produto da energia de interação U pelo número de sítios ocupados. Por exemplo, se duas partículas estão no mesmo sítio a energia de interação U será sempre maior ou igual a zero. Contudo, temos que levar em consideração sempre que, pelo Principio da exclusão de Pauli, partículas com o mesmo spin estão proibidas de ocuparem o mesmo sítio. Então, estas interações serão dadas somente pelas partículas de spins opostos.

De acordo com [Wu68], os estados semi-cheios chamados na literatura por "half-filled" (um elétron por sítio), são sempre estados de um material isolante se U > 0. A transição de Mott de metal para isolante ocorre quando U = 0. Existe uma energia de "gap" que se opõe à adição de uma nova partícula ao sítio. Ou seja, a continuidade das excitações das ondas-de-spins não possuem essa energia de gap, o que confirmou a hipótese dos autores de que a dinâmica de baixas temperaturas (caso em que um elétron ocupa cada sitio) refere-se a um isolante ferromagnético de Heisenberg, composto por partículas de spin $\frac{1}{2}$.

Dada as auto-funções e auto-valores de uma Hamiltoniana geral envolvendo elétrons, ou seja, férmions de spin $\frac{1}{2}$, costuma-se escrever, em termos dos operadores criação e aniquilação de partículas, o seguinte:

$$\mathsf{H} = -t \sum_{j} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} a^{\dagger}_{j+1,\sigma} a_{j,\sigma} + \mathsf{U}(\mathfrak{n}_{1},\mathfrak{n}_{2},\ldots,\mathfrak{n}_{N}), \qquad (2.3.1)$$

sendo o número total de partículas dado pela soma

$$\mathbf{n}_{\mathbf{j}} = \mathbf{a}_{\mathbf{j},\uparrow}^{\dagger} \mathbf{a}_{\mathbf{j},\uparrow} + \mathbf{a}_{\mathbf{j},\downarrow}^{\dagger} \mathbf{a}_{\mathbf{j},\downarrow}, \qquad (2.3.2)$$

e todos os níveis de energia do Hamiltoniano irão depender do spin total do sistema. Do principio de Pauli, os níveis de energia dependem do spin S que assume os seguintes valores $(\frac{1}{2}N, \frac{1}{2}N - 1, \dots, \frac{1}{2}, 0)$. Os resultados dos estudos de Matthesis em 1961 em alguns casos unidimensionais com um número finito de férmions mostrou que, para 0 ou S = $\frac{1}{2}$, o modelo possuí-a tendência antiferromagnética. Recentemente, os estudos de Aizenman e Lieb em 1990 mostrou que a magnetização a uma temperatura $\beta = \frac{1}{kT}$ e campo magnético h, sendo N o número de partículas, satisfaz

$$0 < \mathcal{M}(\beta, h) < N \tanh(\beta h) \tag{2.3.3}$$

onde a magnetização é menos que o número de spins livres (menor que um gás fermiônico inte-

ragindo com energia cinética nula). Usando a nomenclatura bastante conhecida na literatura, junto ao princípio de Pauli, dois "spinless fermions" em uma rede não ocupam o mesmo estado quântico, e ao introduzirmos uma interação entre vizinhos próximos U, a Hamiltoniana pode ser construída da seguinte forma:

$$\mathscr{H}(\mathbf{t},\mathbf{U}) = -\mathbf{t}\sum_{\langle \mathbf{ij}\rangle}\sum_{\sigma} \mathbf{c}^{\dagger}_{\mathbf{i\sigma}}\mathbf{c}_{\mathbf{j\sigma}} + \mathbf{c}^{\dagger}_{\mathbf{j\sigma}}\mathbf{c}_{\mathbf{i\sigma}} + \mathbf{U}\sum_{\mathbf{i}=1}^{N} \mathbf{n}_{\mathbf{i\uparrow}}\mathbf{n}_{\mathbf{i\downarrow}}.$$
(2.3.4)

Outras formulações deste modelo podem ser vistas em [Tak99], onde a Hamiltoniana possui mais termos. Neste caso aqui citado, o Hamiltoniano define um problema de muitos corpos não trivial, porém continua sendo um modelo integrável.

Finalmente, apresentamos esta pequena revisão do modelo de Hubbard pois introduziremos, no capítulo 5 deste trabalho, uma Hamiltoniana de spin-1 com duas leis de conservação que pode ser vista como um caso particular do modelo de Hubbard no limite $U \longrightarrow \infty$. Neste caso as configurações da grade onde temos ocupação dupla ficam inacessíveis, resultado em apenas três configurações permitidas para cada sítio da rede (spin para cima, spin para baixo e vazio).

Capítulo 3

O Ansatz de Bethe

3.1 Introdução

Junto as descobertas dos físicos P. Dirac e W. Heisenberg a respeito da formulação da Mecânica Quântica, Hans Bethe, em 1931, obteve um resultado importante que estava em aberto ao obter a solução exata do modelo de Heisenberg. A importância deste modelo vai do tratamento de materiais super-condutores até teorias mais distintas envolvendo a Mecânica Quântica. Na tentativa de descrever a física dos materiais ferromagnéticos, Heisenberg propôs uma modificação ao modelo de Ising. Esta, se deu através da alteração das variáveis de spin clássicas por spins quânticos. Hans Bethe obteve a solução exata desse modelo a partir de um Ansatz conhecido atualmente como Ansatz de Bethe.

O chamado Ansatz de Bethe [KM98], inicialmente, propiciou a obtenção exata dos autoestados e auto-valores da versão unidimensional do modelo de Heisenberg para a interação dos spins de um material sólido. Suas contribuições foram de suma importância no desenvolvimento da física moderna, em especial da física do estado sólido e da mecânica estatística. Hans Bethe obteve seu Phd. em física teórica na Universidade de Muniche, sob orientação do extraordinário professor Arnold Sommerfeld, em 1928. Seu artigo (1931), foi publicado na revista Zeitshrift für Physik, num momento revolucionário no cenário da teoria quântica.

No modelo de Heisenberg os momentos magnéticos efetivos (átomos, elétrons) estão dispostos em uma rede cristalina ordenada. A interação entre esses momentos magnéticos quânticos da-se pelo produto escalar $J_{ij}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, onde \vec{S}_i é o operador de spin do momento magnético do sitio i da rede. E também, J_{ij} , que é a constante que representa a intensidade da interação entre momentos magnéticos distintos. O Ansatz de Bethe é um método exato para a obtenção dos auto-valores e auto-vetores resultantes do estudo de um modelo quântico de muitos corpos. Temos a vantagem de conseguir distinguir os auto-estados, e caracterizá-los (dado um conjunto de números quânticos) de acordo com alguma propriedade física.

3.2 Aplicação do Ansatz ao Modelo de Heisenberg

A Hamiltoniana do modelo de Heisenberg, ou modelo XXZ para uma rede unidimensional de spins \vec{S}_n , N sítios e número quântico $s = \frac{1}{2}$, e interação apenas entre os vizinhos próximos, é

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N} \left[(\sigma_{i}^{+} \sigma_{i+1}^{-} + \sigma_{i}^{-} \sigma_{i+1}^{+}) + 2\sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} \right], \qquad (3.2.1)$$

onde vale as condições periódicas de contorno

$$\boldsymbol{\sigma}_{N+1} = \boldsymbol{\sigma}_1. \tag{3.2.2}$$

Os operadores levantamento e abaixamento dos spins são dados por

$$\sigma_{n}^{\pm} = \frac{1}{2} (\sigma_{n}^{x} \pm i \sigma_{n}^{y}), \qquad (3.2.3)$$

de modo que σ^{x} , σ^{y} e σ^{z} são dados em termos das matrizes de Pauli. Também ressaltamos a validade das seguintes relações de comutação (constante $\hbar = 1$)

$$[\sigma_{\mathbf{n}}^{z}, \sigma_{\mathbf{n}'}^{\pm}] = \pm \sigma_{\mathbf{n}}^{\pm} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'}, \quad [\sigma_{\mathbf{n}}^{+}, \sigma_{\mathbf{n}'}^{-}] = 2\sigma_{\mathbf{n}}^{z} \delta_{\mathbf{n}\mathbf{n}'}. \tag{3.2.4}$$

A Hamiltoniana (3.2.1) atua no espaço de Hilbert, cuja dimensão é 2^N dado uma base de spin escrita $|\sigma_1, \ldots, \sigma_N\rangle$. Como consequência das relações de comutação, os operadores de spin (3.2.3), junto ao σ_n^z , respeitam as seguintes regras – sobre atuação nos vetores: $\sigma^+ | \ldots \uparrow \ldots \rangle \rightarrow 0$, $\sigma^+ | \ldots \downarrow \ldots \rangle \rightarrow | \ldots \uparrow \ldots \rangle$, $\sigma^- | \ldots \downarrow \ldots \rangle \rightarrow 0$, $\sigma^- | \ldots \uparrow \ldots \rangle \rightarrow | \ldots \downarrow \ldots \rangle$, $\sigma^z | \ldots \downarrow \ldots \rangle \rightarrow -\frac{1}{2} | \ldots \downarrow \ldots \rangle e \sigma^z | \ldots \uparrow \ldots \rangle \rightarrow +\frac{1}{2} | \ldots \uparrow \ldots \rangle$.

Em sua formulação original, o Ansatz de Bethe, aplicado ao modelo de Heisenberg, requer a chamada simetria de rotação. Esta, que diz respeito a simetria sob rotação com respeito ao eixo z do espaço dos spins. A componente total de spin em z

$$\sigma_{\rm T}^z = \sum_{n=1}^{\rm N} \sigma_n^z,$$

é uma quantidade conservativa e comuta com a Hamiltoniana (3.2.1). Veremos que a atuação da Hamiltoniana sobre a base $|\sigma_n\rangle$ resultará numa combinação linear dos vetores da base, envolvendo estados representados pelo número de spins down, dado por r. Escrevemos

$$\sigma_{\mathsf{T}}^z = \frac{\mathsf{N}}{2} - \mathsf{r}.\tag{3.2.5}$$

Podemos ainda mostrar que a Hamiltoniana de Heisenberg comuta com o operador de

permutação de Spins dado por

$$\mathsf{P}_{\mathbf{i}\mathbf{j}} = \frac{1}{2} \{ \vec{\sigma}_{\mathbf{i}} \otimes \vec{\sigma}_{\mathbf{j}} + \mathbb{I} \}, \tag{3.2.6}$$

para isto basta mostrarmos que

$$[J\sigma_{i}^{x}\sigma_{j}^{x} + J\sigma_{i}^{y}\sigma_{j}^{y} + J\sigma_{i}^{z}\sigma_{j}^{z}, \mathsf{P}_{ij}] = 0.$$
(3.2.7)

Ou melhor, escrevendo separadamente da seguinte forma:

$$J[\sigma_{i}^{x}\sigma_{j}^{x},\mathsf{P}_{ij}] + J[\sigma_{i}^{y}\sigma_{j}^{y},\mathsf{P}_{ij}] + J[\sigma_{i}^{z}\sigma_{j}^{z},\mathsf{P}_{ij}] = 0.$$
(3.2.8)

Contudo, faz-se necessário utilizar a seguinte identidade da comutação:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B.$$
(3.2.9)

Se usarmos essas relações, obteremos:

$$J\{\sigma_{i}^{x}[\sigma_{j}^{x}, P_{ij}] + [\sigma_{i}^{x}, P_{ij}]\sigma_{j}^{x}\} + J\{\sigma_{i}^{y}[\sigma_{j}^{y}, P_{ij}] + [\sigma_{i}^{y}, P_{ij}]\sigma_{j}^{y}\} + J\{\sigma_{i}^{z}[\sigma_{j}^{z}, P_{ij}] + [\sigma_{i}^{z}, P_{ij}]\sigma_{j}^{z}\} = 0 \quad (3.2.10)$$

É fácil ver que a expressão acima é igual a zero, visto que, sempre aparecerá na multiplicação um termo equivalente a zero, do tipo

$$[\sigma_{\mathbf{i}}^{\xi}, \sigma_{\mathbf{i}}^{\xi'}] = 0, \quad \mathbf{i} \neq \mathbf{j}, \tag{3.2.11}$$

pois diferentes sítios comutam com os outros demais. Aparecerão outros termos do tipo $[\sigma_i^{\xi}, \sigma_i^{\xi'}]$, que não necessariamente serão nulos. No entanto, esses termos aparecem em pares com sinais diferentes, cancelando-se. Uma consequência importante da comutação da Hamiltoniana com o operador de permutação é que os auto-estados da Hamiltoniana também serão auto-estados do operador de translação, quando impomos condições periódicas de contorno. O operador de translação é

$$\mathsf{T} = \mathsf{P}_{\mathsf{N}-1,\mathsf{N}}\mathsf{P}_{\mathsf{N}-2,\mathsf{N}-1}\dots\mathsf{P}_{2,3}\mathsf{P}_{1,2}.$$
(3.2.12)

O estado do sistema em que $\mathbf{r} = 0$, ou seja, todos os spins apontam para cima, corresponderá a um único vetor

$$|A\rangle = |\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\rangle,$$

de modo que, a equação de auto-valores $H |\psi\rangle = E_0 |\psi\rangle$, nos dá diretamente o valor da energia

do estado fundamental se J > 0,

$$\mathsf{E}_0 = -\frac{\mathsf{JN}}{4}.\tag{3.2.13}$$

Se r=1, teremos que diagonalizar a Hamiltoniana em um bloco cuja dimensão será $\mathsf{N}\times\mathsf{N},$ primeiramente fazendo

$$\left|\psi\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n} e^{ikn} \left|n\right\rangle, \qquad (3.2.14)$$

onde (3.2.14) são também auto-vetores do operador de translação, tendo como auto-valor $e^{\mathrm{i}k},$ onde

$$|\mathfrak{n}\rangle = |\uparrow\uparrow\dots\uparrow\downarrow\uparrow\dots\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, \qquad (3.2.15)$$

sendo n a posição do spin para baixo.

Para verificar que (3.2.14) é auto-vetor do operador de translação, vamos começar com uma combinação geral dos vetores de base $|n\rangle$,

$$\left|\psi\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} a(n) \left|n\right\rangle, \qquad (3.2.16)$$

Observando o caso em que N = 4, temos:

$$|\psi\rangle = a_1 |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + a_2 |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + a_3 |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + a_4 |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle.$$
(3.2.17)

Porém, o operador de Translação, faz a seguinte operação:

$$\mathsf{T}\left|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\right\rangle = \left|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\right\rangle, \quad \mathsf{T}\left|\mathsf{n}\right\rangle = \left|\mathsf{n}-1\right\rangle, \tag{3.2.18}$$

ou seja, translada a grade por inteira em uma unidade à esquerda. Se aplicarmos o operador T em (3.2.17), teremos:

$$\mathsf{T} |\psi\rangle = \mathfrak{a}_1 |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \mathfrak{a}_2 |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + \mathfrak{a}_3 |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + \mathfrak{a}_4 |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle . \tag{3.2.19}$$

onde usamos a condição periódica de contorno. Seja $e^{\mathbf{i}\mathbf{k}}$ o auto-valor do operador translação, então:

$$\mathsf{T} \left| \psi \right\rangle = e^{\mathbf{i} \mathbf{k}} \left| \psi \right\rangle, \qquad (3.2.20)$$

portanto,

$$\begin{aligned} a_{1} |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + a_{2} |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + a_{3} |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + a_{4} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle = e^{ik} (a_{1} |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + \\ &+ a_{2} |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + a_{3} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + a_{4} |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle). \end{aligned} (3.2.21)$$

Que tem como solução $\mathfrak{a}_1 = e^{ik}\mathfrak{a}_4$, $\mathfrak{a}_2 = e^{ik}\mathfrak{a}_1$, $\mathfrak{a}_2 = e^{ik}\mathfrak{a}_1$, $\mathfrak{a}_3 = e^{ik}\mathfrak{a}_2$ e $\mathfrak{a}_4 = e^{ik}\mathfrak{a}_3$. Logo temos que:

$$a_n = e^{ikn}, \quad k_m = \frac{2\pi m}{N}, \quad m = 0, 1, ..., N - 1.$$
 (3.2.22)

e também que $e^{ikN} = 1$. Se olharmos para a aplicação da Hamiltoniana (3.2.1) em $|n\rangle$, dado uma base com um spin down apenas (3.2.15), teremos:

$$\begin{split} \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} |\mathbf{n}\rangle &= \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} |\uparrow\uparrow\dots\uparrow\downarrow\uparrow\dots\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ &= \frac{1}{4} (1+1+\dots-1-1+\dots+1+1) |\mathbf{n}\rangle \\ &= \frac{1}{4} (\mathbf{n}-2-2+\mathbf{N}-\mathbf{n}) |\mathbf{n}\rangle \\ &= \frac{1}{4} (\mathbf{N}-4) |\mathbf{n}\rangle, \end{split}$$
(3.2.23)

e também que

$$\begin{split} \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{-} \sigma_{i+1}^{+} |n\rangle &= \sum_{i} \sigma_{i}^{-} \sigma_{i+1}^{+} |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ &= |n-1\rangle , \\ \sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{+} \sigma_{i+1}^{-} |n\rangle &= \sum_{n} \sigma_{i}^{+} \sigma_{i+1}^{-} |\uparrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ &= |n+1\rangle , \end{split}$$
(3.2.24)

onde usamos a condição periódica de contorno $|0\rangle \equiv |N\rangle \in |N+1\rangle \equiv |1\rangle$.

Com todos estes dados, obtemos a partir de uma equação de auto-valores usando os autoestados (3.2.14), uma expressão para a energia, dada por

$$\mathsf{E}_1 \mathfrak{a}(\mathfrak{n}) = -\frac{\mathsf{J}}{2} \left(\mathfrak{a}(\mathfrak{n}-1) + \mathfrak{a}(\mathfrak{n}+1) + 2 \left(\frac{\mathsf{N}-4}{4} \right) \mathfrak{a}(\mathfrak{n}) \right),$$

portanto

$$E_1 = -J\cosh k + E_0. \tag{3.2.25}$$

O real Ansatz começa a surgir quando olhamos para o caso em que r = 2. Bethe determinou uma expressão análoga à (3.2.16), do tipo:

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_{1 \leqslant n_1 < n_2 \leqslant \mathsf{N}} a(n_1, n_2) \left|n_1, n_2\right\rangle, \qquad (3.2.26)$$

e seu Ansatz para os coeficientes $\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1,\mathfrak{n}_2)$ foi uma combinação não linear de ondas planas

$$a(n_1, n_2) = Ae^{i(k_1n_1 + k_2n_2)} + A'e^{i(k_1n_2 + k_2n_1)}.$$
(3.2.27)

pois A e A' são funções de diferentes parâmetros espectrais $k_1 e k_2$.

A equação de auto-valor que temos que resolver, neste caso, será

$$\mathsf{H} \left| \mathbf{\psi} \right\rangle = \mathsf{E}_2 \left| \mathbf{\psi} \right\rangle, \tag{3.2.28}$$

e a mesma nos dará três tipos de relações para as amplitudes para os coeficientes $\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1,\mathfrak{n}_2)$. A primeira quando $1 < \mathfrak{n}_1, \mathfrak{n}_2 < \mathbb{N} \operatorname{com} \mathfrak{n}_1 + 1 < \mathfrak{n}_2$, nos fornecem as relações que fixam a forma do auto-valor. A segunda relação, quando $1 < \mathfrak{n}_1, \mathfrak{n}_2 < \mathbb{N} \operatorname{com} \mathfrak{n}_2 = \mathfrak{n}_1 + 1$, fixam a relações entre as constantes $\mathbb{A} \in \mathbb{A}'$. Finalmente, as relações onde $\mathfrak{n}_1 = 1$ ou $\mathfrak{n}_2 = \mathbb{L}$ ($\mathbb{L} \in \mathbb{A}$ dimensão da rede), fixam os parâmetros espectrais $k_1 \in k_2$. Vamos considerar inicialmente o primeiro caso. Se analisarmos uma base de spins $\mathfrak{r} = 2$ do tipo

$$|\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\dots\uparrow\downarrow\uparrow\dots\uparrow\downarrow\uparrow\dots\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, \qquad (3.2.29)$$

ao aplicarmos a Hamiltoniana (3.2.1), resultarão seis termos. Os dois primeiros sendo resultado do primeiro operador de spin $\sigma^+\sigma^-$, e os outros do $\sigma^-\sigma^+$. O resultado, olhando apenas para a atuação nas bases, será

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{+} \sigma_{i+1}^{-} |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle = |\mathbf{n}_{1} + 1, \mathbf{n}_{2}\rangle + |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2} + 1\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{-} \sigma_{i+1}^{+} |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle = |\mathbf{n}_{1} - 1, \mathbf{n}_{2}\rangle + |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2} - 1\rangle. \qquad (3.2.30)$$

O atuação do operador $\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$, no caso em que os spins satisfazem a condição $n_2 > n_1 + 1$, resultará em :

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle = \frac{1}{4} (\mathbf{n}_{1} - 2 - 2 + (\mathbf{n}_{2} - 1) - (\mathbf{n}_{1} + 1) - 2 + \mathbf{N} - \mathbf{n}_{2}) |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle$$
$$= \frac{1}{4} (\mathbf{N} - 8) |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle.$$
(3.2.31)

Portanto, aplicando o Hamiltoniano na (3.2.26) obtemos

$$\begin{split} 2[\mathsf{E}-\mathsf{E}_0]\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1,\mathfrak{n}_2) &= J[4\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1,\mathfrak{n}_2)-\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1-1,\mathfrak{n}_2)\\ &\quad -\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1+1,\mathfrak{n}_2)-\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1,\mathfrak{n}_2-1)\\ &\quad -\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1,\mathfrak{n}_2+1)], \qquad \mathfrak{n}_2 > \mathfrak{n}_1+1. \quad (3.2.32) \end{split}$$

Já para o caso $n_2 = n_1 + 1$, teremos:

$$\sum_{i=1}^{N} S_{i}^{z} S_{i+1}^{z} |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle = \frac{1}{4} (1 + 1 + \dots - 1 + 1 - 1 + \dots + 1 + 1) |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle$$
$$= \frac{1}{4} (\mathbf{n}_{1}' - 2 - 1 + \mathbf{N} - \mathbf{n}_{2}') |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle$$
$$= \frac{1}{4} (\mathbf{N} - 4) |\mathbf{n}_{1}, \mathbf{n}_{2}\rangle, \qquad (3.2.33)$$

e também

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{+} \sigma_{i+1}^{-} |n_{1}, n_{1} + 1\rangle = |n_{1}, n_{1} + 2\rangle$$

$$\sum_{i=1}^{N} \sigma_{i}^{-} \sigma_{i+1}^{+} |n_{1}, n_{1} + 1\rangle = |n_{1} - 1, n_{1} + 1\rangle, \qquad (3.2.34)$$

Sendo assim, uma equação de auto-valor $H\left|\psi\right\rangle=E\left|\psi\right\rangle;$ para $(E_{0}=\frac{N}{4}),$ nos dará

$$2[\mathsf{E} - \mathsf{E}_0]\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1, \mathfrak{n}_2) = J[2\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1, \mathfrak{n}_2) - \mathfrak{a}(\mathfrak{n}_1, \mathfrak{n}_2 + 1)], \qquad \mathfrak{n}_2 = \mathfrak{n}_1 + 1. \quad (3.2.35)$$

Do primeiro conjunto (3.2.32), obtemos a energia usando (3.2.27)

$$\mathsf{E} - \mathsf{E}_0 = \mathsf{J} \sum_{j=1,2} (1 - \cos k_j), \tag{3.2.36}$$

já o segundo, se subtrairmos do primeiro, tomando $\mathfrak{n}_2=\mathfrak{n}_1+1,$ obtemos que

$$2a(n_1, n_1 + 1) = a(n_1, n_1) + a(n_1 + 1, n_1 + 1).$$
(3.2.37)

Usando agora a (3.2.27) na (3.2.37), conseguimos uma expressão que relaciona os coeficientes de (3.2.27) escrita da seguinte forma

$$\frac{A}{A'} = -\frac{e^{i(k_1+k_2)} + 1 - 2e^{ik_1}}{e^{i(k_1+k_2)} + 1 - 2e^{ik_2}} \equiv S(k_1, k_2).$$
(3.2.38)

Olhando para um número qualquer de r, generaliza-se a expressão dada em (3.2.26) da seguinte forma:

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_{1 \leqslant n_1 < \dots < n_r \leqslant N} a(n_1, \dots, n_r) \left|n_1, \dots, n_r\right\rangle, \qquad (3.2.39)$$

Considerando um conjunto $A = \{1, 2, ..., r\}$ de modo que as permutações $\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, ..., \mathcal{P}_j \in A$, ou seja, $(1, 2)(2, 1), (2, 3)(3, 2) \dots$, tem-se que as amplitudes em (3.2.39) são

$$\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1},\ldots,\mathfrak{n}_{r}) = \sum_{\mathcal{P}\in\{1,2,\ldots,r\}} A_{\mathcal{P}_{1}\mathcal{P}_{2}\ldots\mathcal{P}_{r}} \exp\left(\mathfrak{i}\sum_{j=1}^{r} k_{\mathcal{P}_{j}}\mathfrak{n}_{j}\right).$$
(3.2.40)

Onde $A_{\mathcal{P}_1\mathcal{P}_2...\mathcal{P}_r}$ são constantes e a soma corre sobre todas essas permutações dos elementos do conjunto { 1, 2, ..., r }. Para r = 2, por exemplo, retornamos à expressão (??). Uma extensão dos casos já estudados, para qualquer valor de r, será

e também, que:

$$2[\mathsf{E} - \mathsf{E}_{0}]\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1}, \dots, \mathfrak{n}_{r}) = J \sum_{(i \neq j_{\alpha}), j_{\alpha}+1}^{r} \sum_{\sigma \pm 1} [\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1}, \dots, \mathfrak{n}_{r}) - \mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1}, \dots, \mathfrak{n}_{i} + \sigma, \dots, \mathfrak{n}_{r})] + J \sum_{\alpha} [2\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1}, \dots, \mathfrak{n}_{r}) - \mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1}, \dots, \mathfrak{n}_{j_{\alpha}} - 1, \mathfrak{n}_{j_{\alpha}+1}, \dots, \mathfrak{n}_{r}) - \mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1}, \dots, \mathfrak{n}_{j_{\alpha}}, \mathfrak{n}_{j_{\alpha}+1} + 1, \dots, \mathfrak{n}_{r})] \mathfrak{n}_{j_{\alpha}+1} = \mathfrak{n}_{j_{\alpha}} + 1, \quad 1 < \mathfrak{n}_{1}, \mathfrak{n}_{r} < \mathsf{N}, \quad \mathfrak{n}_{j+1} > \mathfrak{n}_{j} + 1, \quad j \neq j_{\alpha}. \quad (3.2.42)$$

Análogo ao procedimento anterior, a expressão para a energia é obtida da (3.2.41) usando a (3.2.40)

$$\mathsf{E} - \mathsf{E}_0 = \mathsf{J} \sum_{j=1}^{\mathsf{r}} (1 - \cos \mathsf{k}_j), \tag{3.2.43}$$

e a expressão para a relação entre os coeficientes (3.2.40) é obtida substituindo (3.2.43) nos termos da equação de auto-valores quando $n_{j+1} = n_j + 1$

$$2\mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1},\ldots,\mathfrak{n}_{j},\mathfrak{n}_{j}+1,\ldots,\mathfrak{n}_{r}) = \mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1},\ldots,\mathfrak{n}_{j},\mathfrak{n}_{j},\ldots,\mathfrak{n}_{r}) + \mathfrak{a}(\mathfrak{n}_{1},\ldots,\mathfrak{n}_{j}+1,\mathfrak{n}_{j}+1,\ldots,\mathfrak{n}_{r}), \quad (3.2.44)$$

de onde obtemos

$$A_{\dots ij\dots} = -S(k_i, k_j)A_{\dots ji\dots}, \qquad (3.2.45)$$

fixando a relação entre os coeficientes $A_{\dots ij\dots}$ e $A_{\dots ji\dots}$. Onde,

$$S(k_{i},k_{j}) \equiv -\frac{e^{i(k_{i}+k_{j})}+1-2e^{ik_{i}}}{e^{i(k_{i}+k_{j})}+1-2e^{ik_{j}}}.$$
(3.2.46)

Usando este fato, temos para r = 2, $A_{12} = A e A_{21} = A'$

$$A = -S(k_1, k_2)A', (3.2.47)$$

com

$$S(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = -\frac{e^{\mathbf{i}(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2)} + 1 - 2e^{\mathbf{i}\mathbf{k}_1}}{e^{\mathbf{i}(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2)} + 1 - 2e^{\mathbf{i}\mathbf{k}_2}}.$$
(3.2.48)

Finalmente, analisando o caso $n_1 = 1$ ou $n_2 < L$, teremos da equação de auto-valor

$$E_{2}(1, n_{2}) = -Ja(n_{2}, L) - Ja(2, n_{2}) - Ja(1, n_{2} + 1) - Ja(1, n_{2} - 1) + 4ha(1, n_{2}), \quad (3.2.49)$$

sendo que o termo diagonal, multiplicado por h, envolve a constante J e também a energia E_0 , e fazendo uso das expressões (3.2.36), (3.2.38) e também da condição (3.2.48), junto a (3.2.49), mostramos que:

$$e^{\mathbf{i}\mathbf{k}_1\mathbf{L}} = -\mathbf{S}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2),$$

e também que:

$$e^{ik_2L} = -S(k_2, k_1).$$

Ou melhor,

$$e^{ik_j L} = -S(k_j, k_l), \quad j = 1, 2 \quad l = 1, 2 \quad j \neq l.$$
 (3.2.50)

Generalizando para qualquer r, obtemos a chamada equação de Bethe

$$e^{ik_jL} = -\prod_{l\neq j}^{r} S(k_j, k_l), \quad j = 1, \dots, r$$
(3.2.51)

que é um conjunto de r equações algébricas não lineares.

Considerando a invariância translacional devemos ter

$$a(n_1,n_2,\ldots,n_r)=e^{-\mathfrak{i}\mathfrak{m}P}a(n_1+\mathfrak{m},n_2+\mathfrak{m},\ldots,n_r+\mathfrak{m}),$$

pois $|\Psi\rangle$ também é auto-vetor do operador translação, e e^{iP} com $P = \frac{2\pi j}{N}$ sendo $j = 0, 1, \dots, N-1$ são os auto-valores do operador translação. Devido a (3.2.40) obtemos

$$P = \sum_{i=1}^{r} k_i; \quad P = \frac{2\pi j}{N}, \quad j = 0, 1, \dots, N - 1.$$
(3.2.52)
Finalmente, os parâmetros espectrais k_1, \ldots, k_r e consequentemente os auto-valores e autovetores, são fixados pelas soluções da equação de Bethe (3.2.51) para cada momento P.

3.3 A analise da Equação de Bethe

A equação de Bethe (3.2.51) é um sistema algébrico não linear de r variáveis complexas. Precisamos resolver este sistema para fixar os valores dos parâmetros espectrais e obter, assim, os auto-valores do sistema. Precisamos dos auto-valores para obter a termodinâmica do modelo. Apesar de complexo, esse conjunto de equações não lineares pode ser resolvido analiticamente no limite termodinâmico ($\mathbf{r} \rightarrow \infty$), mas para isso a equação de Bethe precisa ser rescrita de forma mais adequada. Vimos que a relação entre as amplitudes da função de onda do Ansatz de Bethe é dada pela expressão $S(\mathbf{k}_j, \mathbf{k}_l)$, e mais a frente veremos como se dá o comportamento do parâmetro anisotrópico Δ para o caso não trivial, ou seja, diferente de um. Veremos que neste caso, é possível escrever:

$$S(k_{j},k_{l}) = -\frac{e^{i(k_{j}+k_{l})} + 1 - 2\Delta e^{ik_{j}}}{e^{i(k_{j}+k_{l})} + 1 - 2\Delta e^{ik_{l}}}.$$
(3.3.1)

o que nada mais é que relações de fases de espalhamentos complexos. Essa relação entre as amplitudes da função de onda do ansatz de Bethe pode ser reescrita como [Mat94; B04; Fra11]

$$S(k_{i}, k_{l}) = e^{i\Theta(k_{j}, k_{l})}$$
 (3.3.2)

e sendo assim, da equação de Bethe, ao tomar o logaritmo, pode ser reescrita da seguinte forma [ADK10]:

$$k_j L = 2\pi\lambda_j - \sum_{l=1}^r \Theta(k_j, k_l), \qquad (3.3.3)$$

sendo λ_j números quânticos que podem assumir valores inteiros ou semi-inteiros (tais valores definem o auto-estado do sistema). Para lidar com a expressão isto, precisamos ainda utilizar uma reparametrização $k_j \rightarrow x_j$. A parametrização mais adequada depende do valor de **Delta** (para detalhes de cálculo veja o livro [Tak99]). O sistema é ferromagnético para $\Delta > 1$, anti-ferromagnético para $\Delta < -1$ e paramagnético para $-1 < \Delta < 1$).

Capítulo 4

O Ansatz do Produto Matricial

4.1 Introdução

As soluções exatas de modelos quânticos envolvendo Hamiltonianos podem ser obtidas utilizando o Ansatz de Bethe – BA, em suas diversas formulações. Na formulação original proposta por Bethe, chamado de Ansatz de Bethe Coordenada, as amplitudes das auto-funções são dadas por um somatório de ondas planas. Aqui, utilizaremos uma formulação diferente do BA, o chamado Ansatz do Produto Matricial MPA.

Ao longo dos anos, foram propostas na literatura especializada diversas formulações para o MPA. O MPA surgiu na tentativa de resolver problemas envolvendo redes quânticas não integráveis, um exemplo são os modelos sólidos de valência [AIH88][ADPM98][FMF92] [KAJ92]. O MPA também apareceu como uma formulação extremamente eficiente envolvendo uma vasta gama de problemas: Tal como no cálculo da distribuição de probabilidade estacionária para modelos estocásticos unidimensionais[B88][DBV93][AFCV98], na distribuição de probabilidade dependente do tempo aplicado a sistemas integráveis (extensão dinâmica do MPA)[BM95a][BM95b] [PVM02], na técnica de Matrizes de Transferência [AC06] [AIH88] e na evolução temporal de operadores que descrevem sistemas estocásticos [CJ03].

O MPA introduzido neste capítulo [AL04] relaciona as amplitudes das auto-funções como sendo dado por um produto de matrizes. Diferente do BA, onde os parâmetros espectrais junto as amplitudes das ondas planas são obtidos pelas equações de auto-valores do Hamiltoniano, no produto matricial, estas equações de auto-valor fixam as relações de comutação das matrizes dadas no modelo.

4.2 O Modelo de Heisenberg Anisotrópico com Exclusão

O modelo de Heisenberg com exclusão é uma generalização do modelo original onde spins up não podem estar a uma distância inferior a s = 1, 2, ... Identificando spins down como sítios vazios e spins up como sítios ocupados, o modelo descreve, em sua formulação estocástica, a difusão de partículas (ou moléculas) com tamanho s em uma rede discreta. A Hamiltoniana do Modelo XXZ com exclusão é escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{H}_{s} = -\mathscr{P}_{s} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{L} \left\{ \sigma_{i}^{x} \sigma_{i+1}^{x} + \sigma_{i}^{y} \sigma_{i+1}^{y} + \Delta \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z} \right\} \mathscr{P}_{s}, \tag{4.2.1}$$

de modo que o parâmetro Δ define a anisotropia do sistema. O projetor \mathscr{P}_s assegura que, no espaço de Hilbert em que estaremos trabalhando, nenhuma configuração tal que a distância entre dois spins up da rede for menor que s será considerada.

Considerando os operadores levantamento e abaixamento σ^+ e σ^- , verifica-se que, exceto por uma constante, a expressão (4.2.1) nada mais é que um caso particular de:

$$\mathsf{H}_{s} = -\mathscr{P}_{s} \sum_{i=1}^{\mathsf{L}} \left\{ \boldsymbol{\varepsilon}_{+} \boldsymbol{\sigma}_{i}^{-} \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{+} + \boldsymbol{\varepsilon}_{-} \boldsymbol{\sigma}_{i}^{+} \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{-} + \frac{\Delta}{2} (\boldsymbol{\sigma}_{i}^{z} \boldsymbol{\sigma}_{i+1}^{z} - 1) \right\} \mathscr{P}_{s}, \tag{4.2.2}$$

quando os parâmetros $\epsilon_{-} = \epsilon_{+} = 1$. Para $\epsilon_{+} + \epsilon_{-} = 1$ com $\Delta = 1$ o Hamiltoniano (4.2.2) descreve a matriz estocástica do processo de difusão de partículas onde a partícula move-se para direita com probabilidade ϵ_{+} , e para a esquerda com probabilidade ϵ_{-} , se os sítios vizinhos estiverem vazios.

Junto à expressão (4.2.2), utilizaremos as mesmas condições de contorno periódicas. Outro aspecto fundamental é a conservação de spin e invariância translacional. Devido a essas simetrias, as auto-funções $|\Psi_{n,P}\rangle$ podem ser escritas em termos do número n de spins up e dos auto-valores de momento P. A forma desta auto-função será:

$$|\Psi_{n,P}\rangle = \sum_{\{x_1,...,x_n\}} f(x_1,...,x_n) |x_1,...,x_n\rangle,$$
 (4.2.3)

em que o conjunto $\{(x_1, \ldots, x_n)\}$ denominará a localização dos n spins up considerados no modelo. Tal como no Ansatz de Bethe, faz-se necessário a inserção de um Ansatz para os coeficientes $f(x_1, \ldots, x_n)$. Segundo o MPA [AL04], considera-se

$$f(x_1, \dots, x_n) = \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_1 - 1} \mathsf{A}^{(s)} \mathsf{E}^{x_2 - x_1 - 1} \mathsf{A}^{(s)} \dots \mathsf{E}^{x_n - x_{n-1} - 1} \mathsf{A}^{(s)} \mathsf{E}^{\mathsf{L} - x_n} \Omega_{\mathsf{P}}], \tag{4.2.4}$$

de forma que sempre seja respeitada as seguintes restrições para as posições dos spins na rede.

$$\mathbf{x}_{i+1} \ge \mathbf{x}_i + \mathbf{s}, \quad \mathbf{i} = 1, \dots, \mathbf{N} - 1, \quad \mathbf{x}_1 \ge 1, \quad \mathbf{s} \le \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_1 \le \mathbf{L} - \mathbf{s}. \tag{4.2.5}$$

Vimos que o Ansatz que Bethe consiste em escrever a função de onda como sendo uma combinação de ondas planas, aqui faz-se o uso do traço do produto de matrizes, ou operadores, E, $A^{(s)} \in \Omega_P$. Para lidar com este Ansatz, precisamos saber qual é a Álgebra destes. O operador

translação desloca o spin em uma unidade, portanto se $1 < x_1 < L$,

$$\mathsf{T}\left|\mathsf{x}_{1}\right\rangle=\mathsf{e}^{\mathsf{i}\mathsf{P}}\left|\mathsf{x}_{1}-1\right\rangle,$$

ou seja

$$Tr[E^{x_1-1}A^{(s)}E^{L-x_1}\Omega_P] = e^{iP}Tr[E^{x_1-2}A^{(s)}E^{L-x_1+1}\Omega_P].$$

Portanto, fazendo uso das propriedades cíclicas do traço, reescrevemos a expressão acima da seguinte forma:

$$\mathsf{Tr}[\mathsf{E}^{\mathsf{x}_1-2}\mathsf{A}^{(\mathfrak{s})}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-\mathsf{x}_1}\Omega_\mathsf{P}\mathsf{E}] = e^{\mathfrak{i}\mathsf{P}}\mathsf{Tr}[\mathsf{E}^{\mathsf{x}_1-2}\mathsf{A}^{(\mathfrak{s})}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-\mathsf{x}_1}\mathsf{E}\Omega_\mathsf{P}],$$

logo, obtemos que:

$$\mathsf{E}\Omega_{\mathsf{P}} = e^{-\mathsf{i}\,\mathsf{P}}\Omega_{\mathsf{P}}\mathsf{E}.\tag{4.2.6}$$

Outra relação de comutação que obtem-se proveniente do mesmo resultado, quando $x_1=1$ e $x_n=L$ é a seguinte

$$A^{(s)}\Omega_{\mathsf{P}} = e^{-i\mathsf{P}}\Omega_{\mathsf{P}}A^{(s)}.$$
(4.2.7)

Dado o ansatz para os coeficientes da expressão (4.2.3), junto as relações de comutação (4.2.6) e (4.2.7), queremos resolver uma equação de auto-valores e auto-vetores do tipo

$$\mathsf{H}_{\mathsf{s}} |\Psi_{\mathsf{n},\mathsf{P}}\rangle = \epsilon_{\mathsf{n}} |\Psi_{\mathsf{n},\mathsf{P}}\rangle, \qquad (4.2.8)$$

sendo usada a Hamiltoniana (4.2.2) para os valores de n que veremos a seguir.

4.3 A Aplicação do MPA

Primeiramente, no caso mais simples em que n = 1, ou seja, apenas um spin up, a equação de auto-valores para $1 < x_1 < L$ nos fornece as relações:

$$\epsilon_{1} \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}}\Omega_{\mathsf{P}}] = -\epsilon_{+} \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-2}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}+1}\Omega_{\mathsf{P}}] -\epsilon_{-} \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-1}\Omega_{\mathsf{P}}] + \Delta \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}}\Omega_{\mathsf{P}}].$$
(4.3.1)

Analisando a condição de fronteira $x_1 = 1$, temos:

$$\varepsilon_{1} \operatorname{Tr}[A^{(s)} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-1} \Omega_{\mathsf{P}}] = -\varepsilon_{+} \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{\mathsf{L}-1} A^{(s)} \Omega_{\mathsf{P}}] -\varepsilon_{-} \operatorname{Tr}[\mathsf{E} A^{(s)} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-2} \Omega_{\mathsf{P}}] + \Delta \operatorname{Tr}[A^{(s)} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-1} \Omega_{\mathsf{P}}],$$

$$(4.3.2)$$

mas, das propriedades do traço, e da relação de comutação (4.2.6), reescrevemos

$$Tr[E^{L-1}A^{(s)}\Omega_{P}] = e^{iP(L-1)}Tr[A^{(s)}E^{L-1}\Omega_{P}],$$

$$Tr[EA^{(s)}E^{L-2}\Omega_{P}] = e^{iP}Tr[A^{(s)}E^{L-1}\Omega_{P}].$$

Sendo assim

$$\varepsilon_{1} \operatorname{Tr}[A^{(s)} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-1} \Omega_{\mathsf{P}}] = -\varepsilon_{+} e^{i\mathsf{P}(\mathsf{L}-1)} \operatorname{Tr}[A^{(s)} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-1} \Omega_{\mathsf{P}}] -\varepsilon_{-} e^{i\mathsf{P}} \operatorname{Tr}[A^{(s)} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-1} \Omega_{\mathsf{P}}] + \Delta \operatorname{Tr}[A^{(s)} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-1} \Omega_{\mathsf{P}}],$$

$$(4.3.3)$$

porem, usando (4.2.6) na expressão (4.3.1), é possível a seguinte expressão para energia

$$\varepsilon_1 = -\varepsilon_+ e^{-iP} - \varepsilon_- e^{iP} + \Delta. \tag{4.3.4}$$

Fazendo uso do resultado acima, temos:

$$[-\epsilon_{+}e^{-\mathfrak{i}\mathsf{P}}-\epsilon_{+}e^{\mathfrak{i}\mathsf{P}(\mathsf{L}-1)}]\mathsf{Tr}[\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-1}\Omega_{\mathsf{P}}]=0.$$

Logo $e^{-iP} = e^{iP(L-1)}$, então $e^{iPL} = 1$. Portanto o momento é dado por $P = \frac{2\pi j}{L}$, sendo $j = 0, 1, \dots, L-1$.

De acordo com [AL04], uma outra maneira de resolver a expressão (4.3.1) consiste em escrever a matriz $A^{(s)}$ em termos de uma nova matriz $A_k^{(s)}$,

$$A^{(s)} = A_{k}^{(s)} E^{2-s}, \qquad (4.3.5)$$

onde k é um parâmetro complexo. A relação de comutação entre os elementos $E \in A_k^{(s)}$ é dada sem perda de generalidade, pela relação de comutação

$$\mathsf{E}\mathsf{A}_{\mathsf{k}}^{(\mathsf{s})} = \mathsf{e}^{\mathsf{i}\mathsf{k}}\mathsf{A}_{\mathsf{k}}^{(\mathsf{s})}\mathsf{E}. \tag{4.3.6}$$

Substituindo (4.3.5) em (4.3.1), temos que

$$(\varepsilon_{1} - \Delta) \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1} \mathsf{A}_{k}^{(s)} \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}} \Omega_{\mathsf{P}}] = -\varepsilon_{+} \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-2} \mathsf{A}_{k}^{(s)} \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}+1} \Omega_{\mathsf{P}}] -\varepsilon_{-} \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}} \mathsf{A}_{k}^{(s)} \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-1} \Omega_{\mathsf{P}}].$$
(4.3.7)

Do traço, escrevemos

$$(\varepsilon_{1} - \Delta) \operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}_{k}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-s+2}\Omega_{\mathsf{P}}] = -\varepsilon_{+}\operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}_{k}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-s+2+1}\Omega_{\mathsf{P}}\mathsf{E}^{-1}] -\varepsilon_{-}\operatorname{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}_{k}^{(s)}\mathsf{E}^{2-s}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-s+2-1}\Omega_{\mathsf{P}}\mathsf{E}], \quad (4.3.8)$$

agora usando a relações (4.3.6), obtemos a energia:

$$\varepsilon_{k} = -\varepsilon_{+}e^{-ik} - \varepsilon_{-}e^{ik} + \Delta. \tag{4.3.9}$$

Vemos que a equação de auto-valor fixa o parâmetro espectral k = P e nos fornece a expressão para a energia do sistema.

Agora analisando o caso em que n = 2, da expressão (4.2.8), obtem-se, para o caso em que os spins obedecem $x_2 > x_1 + s$, $x_1 \neq 1$ e $x_2 \neq L$

$$\begin{split} \varepsilon_{2} \mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_{2}-x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{2}}\Omega_{\mathsf{P}}] &= -\varepsilon_{+}\mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-2}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_{2}-x_{1}}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{2}}\Omega_{\mathsf{P}}] \\ &-\varepsilon_{+}\mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_{2}-x_{1}-2}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{2}+1}\Omega_{\mathsf{P}}] \\ &-\varepsilon_{-}\mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_{2}-x_{1}-2}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{2}}\Omega_{\mathsf{P}}] \\ &-\varepsilon_{-}\mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_{2}-x_{1}}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{2}-1}\Omega_{\mathsf{P}}] \\ &+2\Delta\mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_{2}-x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{2}}\Omega_{\mathsf{P}}], \quad (4.3.10) \end{split}$$

e das propriedades do traço, rearranjando os termos teremos que

$$(\varepsilon - 2\Delta)\{\mathsf{E}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_2 - x_1 - 1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}\} = -\varepsilon_+\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_2 - x_1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E} - \varepsilon_-\mathsf{E}^2\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_2 - x_1 - 2}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E} -\varepsilon_+\mathsf{E}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_2 - x_1 - 2}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^2 - \varepsilon_-\mathsf{E}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{x_2 - x_1}\mathsf{A}^{(s)}.$$
(4.3.11)

Para resolver esta última equação é necessário reescrever a matriz $A^{(s)}$ em termos de duas novas matrizes $A_{k_1} \in A_{k_2}$, dependente dos parâmetros espectrais $k_1 \in k_2$ da seguinte forma:

$$A^{(s)} = \sum_{i=1}^{2} A^{(s)}_{k_{i}} E^{2-s}$$

= $(A_{k_{1}} + A_{k_{2}}) E^{2-s}.$ (4.3.12)

Note que, como k_i são parâmetros livres (até agora), a relação de comutação entre as matrizes E e $A_{k_i}^{(s)}$ são gerais. Essas comutações serão fixadas, junto com os parâmetros k_i pelas equações de auto-valor.

Substituindo em (4.3.11)

$$(\varepsilon - 2\Delta) \{ \mathsf{E}(\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^{\mathsf{x}_2 - \mathsf{x}_1 - 1} (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E} \} = -\varepsilon_+ (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^{\mathsf{x}_2 - \mathsf{x}_1} (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E} -\varepsilon_- \mathsf{E}^2 (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^{\mathsf{x}_2 - \mathsf{x}_1 - 2} (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E} -\varepsilon_+ \mathsf{E} (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^{\mathsf{x}_2 - \mathsf{x}_1 - 2} (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^2 -\varepsilon_- \mathsf{E} (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E}^{\mathsf{x}_2 - \mathsf{x}_1} (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^{2-s} \mathsf{E},$$

$$(4.3.13)$$

fazendo uso de

$$\mathsf{E}\mathsf{A}_{k_{i}}^{(s)} = e^{ik_{i}}\mathsf{A}_{k_{i}}^{(s)}\mathsf{E}, \tag{4.3.14}$$

obtemos:

$$(\varepsilon - 2\Delta)e^{ik_{1}}e^{ik_{2}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{2}} + (\varepsilon - 2\Delta)e^{ik_{2}}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{2}}A_{k_{1}} + (\varepsilon - 2\Delta)e^{ik_{1}}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{1}} + (\varepsilon - 2\Delta)e^{ik_{2}}e^{ik_{2}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{2}}A_{k_{2}} = -\varepsilon_{+}e^{ik_{2}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{2}} - \varepsilon_{-}e^{2ik_{1}}e^{ik_{2}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{2}} - \varepsilon_{+}e^{ik_{1}}e^{-ik_{2}}e^{ik_{2}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{2}} - \varepsilon_{-}e^{ik_{1}}e^{ik_{2}}e^{ik_{2}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{2}} - \varepsilon_{+}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{2}}A_{k_{1}} - \varepsilon_{-}e^{2ik_{2}}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{2}}A_{k_{1}} - \varepsilon_{+}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{2}}A_{k_{1}} - \varepsilon_{-}e^{2ik_{1}}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{2}}A_{k_{1}} - 2\varepsilon_{+}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{1}} - 2\varepsilon_{-}e^{2ik_{1}}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{1}},$$
 (4.3.15)

e simplificando, temos que

$$\begin{aligned} (\varepsilon - 2\Delta + 2\varepsilon_{+}e^{-ik_{1}} + 2\varepsilon_{-}e^{-ik_{1}})e^{ik_{1}}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{1}} \\ + (\varepsilon - 2\Delta + 2\varepsilon_{+}e^{-ik_{2}} + 2\varepsilon_{-}e^{ik_{2}})e^{ik_{2}}e^{ik_{2}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{2}}A_{k_{2}} \\ + (\varepsilon - 2\Delta + \varepsilon_{+}e^{ik_{1}} + \varepsilon_{-}e^{ik_{1}} + \varepsilon_{+}e^{-ik_{2}} + \varepsilon_{-}e^{ik_{2}})e^{ik_{1}}e^{ik_{1}}e^{ik_{2}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{1}}A_{k_{2}} \\ + (\varepsilon - 2\Delta + \varepsilon_{+}e^{-ik_{2}} + \varepsilon_{-}e^{ik_{2}} + \varepsilon_{+}e^{-ik_{1}} + \varepsilon_{-}e^{ik_{1}})e^{ik_{2}}e^{ik_{1}(2-s+x_{2}-x_{1})}A_{k_{2}}A_{k_{1}} = 0. \ (4.3.16)\end{aligned}$$

A relação acima é automaticamente satisfeita para $(A_{k_1})^2 = (A_{k_2})^2 = 0$, e para a energia:

$$\varepsilon = 2\Delta - \epsilon_{+}e^{-ik_{1}} - \epsilon_{-}e^{ik_{1}} - \epsilon_{+}e^{-ik_{2}} - \epsilon_{-}e^{ik_{2}}$$
$$= \epsilon(k_{1}) + \epsilon(k_{2}).$$
(4.3.17)

Analisando a condição de colisão, com $x_1 \neq 1$, $x_2 \neq L$ e $x_2 = x_1 + s$, ou seja, tomando as configurações que os spins estão lado a lado, ao aplicar o hamiltoniano (4.2.2) e resolver a equação (4.2.8), tem-se que

$$\begin{aligned} \varepsilon_{2} \mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{s-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-s}\Omega_{\mathsf{P}}] &= -\varepsilon_{+}\mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-2}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{s}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-s}\Omega_{\mathsf{P}}] \\ &-\varepsilon_{-}\mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{s}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-s-1}\Omega_{\mathsf{P}}] \\ &+\Delta\mathrm{Tr}[\mathsf{E}^{x_{1}-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{s-1}\mathsf{A}^{(s)}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-x_{1}-s}\Omega_{\mathsf{P}}], \quad (4.3.18)\end{aligned}$$

e da mesma forma que anteriormente:

$$(\varepsilon - \Delta) \{ \mathsf{E}(\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}(\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E} \} = -\varepsilon_+ (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^2 (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E} - \varepsilon_- \mathsf{E}(\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}) \mathsf{E}^2 (\mathsf{A}_{k_1} + \mathsf{A}_{k_2}).$$
(4.3.19)

Assim, resolvendo a expressão acima, obtemos

$$(\varepsilon - \Delta + \epsilon_{+}e^{-ik_{1}} + \epsilon_{-}e^{ik_{2}})e^{ik_{1}}e^{2ik_{2}}A_{k_{1}}A_{k_{2}} + (\varepsilon - \Delta + \epsilon_{+}e^{-ik_{2}} + \epsilon_{-}e^{ik_{1}})e^{ik_{2}}e^{2ik_{1}}A_{k_{2}}A_{k_{1}} = 0, \qquad (4.3.20)$$

porem, usando (4.3.17) e simplificando os termos,

$$(-\epsilon_{-}e^{ik_{1}}-\epsilon_{+}e^{ik_{2}}+\Delta)e^{ik_{2}}A_{k_{1}}A_{k_{2}} = -(-\epsilon_{+}e^{-ik_{1}}-\epsilon_{-}e^{ik_{2}}+\Delta)e^{ik_{1}}A_{k_{2}}A_{k_{1}}, \quad (4.3.21)$$

ou seja

$$A_{k_1}A_{k_2} = -\frac{\epsilon_+ + \epsilon_- e^{i(k_1 + k_2)} - \Delta e^{ik_1}}{\epsilon_+ + \epsilon_- e^{i(k_1 + k_2)} - \Delta e^{ik_2}} A_{k_2}A_{k_1}.$$
(4.3.22)

Basicamente, mostramos que

$$\sum_{j,l=1}^{2} \left[\epsilon_{-} + \epsilon_{+} e^{-i(k_{j}+k_{l})} - \Delta e^{-ik_{j}} \right] A_{k_{j}}^{(s)} A_{k_{l}}^{(s)} = 0, \qquad (4.3.23)$$

e isto nos levou ao seguinte resultado

$$A_{k_{j}}^{(s)}A_{k_{l}}^{(s)} = S(k_{j}, k_{l})A_{k_{l}}^{(s)}A_{k_{j}}^{(s)}, \quad l \neq j,$$
(4.3.24)

sendo

$$S(\mathbf{k}_{j},\mathbf{k}_{l}) = -\frac{\epsilon_{+} + \epsilon_{-}e^{i(\mathbf{k}_{j}+\mathbf{k}_{l})} - \Delta e^{i\mathbf{k}_{j}}}{\epsilon_{+} + \epsilon_{-}e^{i(\mathbf{k}_{j}+\mathbf{k}_{l})} - \Delta e^{i\mathbf{k}_{l}}}.$$
(4.3.25)

Veja a semelhança com o resultado do Ansatz de Bethe dado por (3.2.48), sendo aqui $\Delta = 2$, $\epsilon_+ = 1$, $\epsilon_- = 1$, j = 1 e l = 2.

Podemos ainda obter a relação de comutação das matrizes $A_{k_i}^{(s)}$ com Ω_P . Substituindo (4.3.5) em (4.2.7) obtemos

$$A_{k}^{(s)} E^{2-s} \Omega_{P} = e^{-iP} \Omega_{P} A_{k}^{(s)} E^{2-s}, \qquad (4.3.26)$$

agora usando (4.2.6)

$$e^{-iP(2-s)}A_{k}^{(s)}\Omega_{P}E^{2-s} = e^{-iP}\Omega_{P}A_{k}^{(s)}E^{2-s}, \qquad (4.3.27)$$

portanto

$$A_{k}^{(s)}\Omega_{P} = e^{-iP}e^{iP(2-s)}\Omega_{P}A_{k}^{(s)}, \qquad (4.3.28)$$

e assim, consegue-se uma nova relação de comutação

$$A_{k_j}^{(s)}\Omega_{\rm P} = e^{i{\rm P}(1-s)}\Omega_{\rm P}A_{k_j}^{(s)}.$$
(4.3.29)

4.4 A Equação de Bethe

Ao analisarmos as condições em que os spins estão nas extremidades da rede, no caso de termos $x_1 = 1$ ou $x_2 = L$, olhando (4.3.14)

$$\operatorname{Tr}\{A_{k_{1}}^{(s)}A_{k_{j}}^{(s)}\mathsf{E}^{L+2-2s}\Omega_{\mathsf{P}}\} = e^{-\mathfrak{i}(L+2-2s)k_{j}}\operatorname{Tr}\{A_{k_{1}}^{(s)}\mathsf{E}^{L+2-2s}A_{k_{j}}^{(s)}\Omega_{\mathsf{P}}\},\tag{4.4.1}$$

mas com (4.3.27) e também (4.3.24)

$$\begin{split} \mathsf{Tr}\{A_{k_{1}}^{(s)}A_{k_{j}}^{(s)}\mathsf{E}^{L+2-2s}\Omega_{\mathsf{P}}\} &= e^{-\mathfrak{i}k_{j}L}e^{2\mathfrak{i}k_{j}(s-1)}\mathsf{Tr}\{A_{k_{1}}^{(s)}\mathsf{E}^{L+2-2s}e^{\mathfrak{i}\mathsf{P}(1-s)}\Omega_{\mathsf{P}}A_{k_{j}}^{(s)}\}\\ &= e^{-\mathfrak{i}k_{j}L}e^{2\mathfrak{i}k_{j}(s-1)}e^{-\mathfrak{i}\mathsf{P}(s-1)}\mathsf{Tr}\{A_{k_{j}}^{(s)}A_{k_{1}}^{(s)}\mathsf{E}^{L+2-2s}\Omega_{\mathsf{P}}\}\\ &= e^{-\mathfrak{i}k_{j}L}e^{2\mathfrak{i}k_{j}(s-1)}e^{-\mathfrak{i}\mathsf{P}(s-1)}\mathsf{Tr}\{\mathsf{S}(k_{j},k_{1})A_{k_{1}}^{(s)}A_{k_{j}}^{(s)}\mathsf{E}^{L+2-2s}\Omega_{\mathsf{P}}\},\end{split}$$

portanto, com $P=k_{j}+k_{l},$ obtemos a equação de Bethe

$$e^{ik_jL} = S(k_j, k_l) \left(\frac{e^{ik_j}}{e^{ik_l}}\right)^{(s-1)}.$$
(4.4.2)

O caso geral para qualquer valor de n é uma extensão de tudo que foi discutido previamente. Neste caso, de (4.2.8) quando aplicado a amplitude $|\Psi_{n,P}\rangle$, lembrando as restrições (4.2.5), será

$$\begin{aligned} & \epsilon_{n} Tr[\dots E^{x_{i}-x_{i-1}-1}A^{(s)}E^{x_{i+1}-x_{i}-1}A^{(s)}\dots A^{(s)}E^{L-x_{n}}\Omega_{P}] \\ &= -\sum_{i=1}^{n} (\epsilon_{+}Tr[\dots E^{x_{i}-x_{i-1}-2}A^{(s)}E^{x_{i+1}-x_{i}}A^{(s)}\dots A^{(s)}E^{L-x_{n}}\Omega_{P}] \\ &+ \epsilon_{-}Tr[\dots E^{x_{i}-x_{i-1}-1}A^{(s)}E^{x_{i+1}-x_{i}-2}A^{(s)}\dots A^{(s)}E^{L-x_{n}+1}\Omega_{P}] \\ &- \Delta Tr[\dots E^{x_{i}-x_{i-1}-1}A^{(s)}E^{x_{i+1}-x_{i}-1}A^{(s)}\dots A^{(s)}E^{L-x_{n}}\Omega_{P}]), \end{aligned}$$
(4.4.3)

e a solução se dá devido ao fato que escrevemos a matriz $A^{(s)}$ tal qual (4.4.4), sendo uma soma de n parâmetros espectrais:

$$A^{(s)} = \sum_{j=1}^{n} A^{(s)}_{k_j} E^{2-s}.$$
(4.4.4)

Desta forma, junto as relações de comutação (4.3.6) e (4.3.29), é possivel obter as soluções de momento e energia do sistema

$$\varepsilon = \sum_{j=1}^{n} \varepsilon(k_j), \quad P = \sum_{j=1}^{n} k_j.$$
 (4.4.5)

Para o caso geral, sempre podemos reescrever qualquer traço do produto de matrizes, fazendo uso das relações algébricas entre as mesmas, na forma:

$$Tr\{A_{k_1}^{(s)}\dots A_{k_j}^{(s)}\dots A_{k_n}^{(s)}E^{L-n(s-1)}\Omega_P\} = Tr\{A_{k_1}^{(s)}\dots A_{k_{j-1}}^{(s)}A_{k_j}^{(s)}A_{k_{j+1}}^{(s)}\dots A_{k_n}^{(s)}E^{L-n(s-1)}\Omega_P\}$$

Sabemos o comportamento da álgebra das matrizes $A^{(s)}$, dado por (4.3.24). Podemos utilizar esta condição e permutar a componente $A_j^{(s)}$ até a primeira posição do traço. Em seguida, devido ao fato que tr{ABCD} = Tr{BCDA}, junto as relações (4.3.14) e (4.3.29) teremos que:

$$Tr\{A_{k_{1}}^{(s)} \dots A_{k_{j}}^{(s)} \dots A_{k_{n}}^{(s)} E^{L-n(s-1)}\Omega_{P}\} = \prod_{1}^{j-1} S(k_{1}, k_{j}) Tr\{A_{k_{j}}^{(s)} A_{k_{1}}^{(s)} \dots A_{k_{j-1}}^{(s)} A_{k_{j+1}}^{(s)} \dots A_{k_{n}}^{(s)} E^{L-n(s-1)}\Omega_{P}\}$$
$$= e^{-ik_{j}(L-n(s-1))} e^{iP(1-s)} \prod_{l=1}^{n} S(k_{j}, k_{l}) Tr\{A_{k_{1}}^{(s)} \dots A_{k_{j}}^{(s)} \dots A_{k_{n}}^{(s)} \dots E^{L-n(s-1)}\Omega_{P}\}, \qquad (4.4.6)$$

onde introduzimos $S(k_i, k_1) = -1$.

Portanto

$$e^{-ik_j(L-ns+n)}e^{iP(1-s)}\prod_{l=1}^n S(k_j,k_l) = 1,$$

ou melhor, escrevendo da seguinte forma

$$e^{ik_{j}L} = (-1)^{n} \prod_{l=1}^{n} \frac{\epsilon_{+} + \epsilon_{-} e^{i(k_{j}+k_{l})} - \Delta e^{ik_{j}}}{\epsilon_{+} + \epsilon_{-} e^{i(k_{j}+k_{l})} - \Delta e^{ik_{l}}} \left(\frac{e^{ik_{j}}}{e^{ik_{l}}}\right)^{(s-1)} \quad j = 1, \dots, n.$$
(4.4.7)

Note que o sinal de menos vem do fato que temos um sinal negativo dentro de $S(k_j, k_l)$, este que aparecerá devido as n permutações das matrizes $A^{(s)}$ dentro do traço.

Capítulo 5

Modelos de Spin 1 de Partículas com Tamanho

5.1 Introdução

Neste capítulo propomos dois modelos de spin 1 integráveis de partículas com tamanho com uma ou duas leis de conservação. O modelo com uma lei de conservação descreve, por exemplo, um processo de reação e difusão de um tipo de molécula em uma rede discreta onde o tamanho da molécula é um múltiplo inteiro da distância entre os sítios da rede. Neste modelo o spin total do sistema é conservado, ou seja, o número total de moléculas é conservado. O segundo modelo descreve, por exemplo, a difusão de dois tipos de moléculas em uma rede, onde o tamanho das moléculas também será um múltiplo inteiro da distância entre os sítios da rede. Neste modelo, além da conservação do spin total do sistema, também temos a conservação do número de moléculas de cada um dos dois tipos. Alguns modelos quânticos generalizados por este estudo são, por exemplo, generalizações dos modelos de Fateev-Zamolodchikov [BV80] e Izergin-Korepin [GE81], entre outros.

5.2 Modelos de Spin 1 com uma lei de conservação

Neste modelo consideramos apenas a interação entre os vizinhos próximos em uma rede unidimensional com spin total conservado e simetria unitária U(1). Tais interações entre os sítios vizinhos podem ser bem descritas através das matrizes de Weyl, de dimensão é 3x3. Tais matrizes possuem todos os elementos nulos, exceto num deles. Escrevemos elas da seguinte forma

$$(\mathsf{E}^{\mathsf{l},\mathsf{m}})_{\mathsf{i},\mathsf{j}} = \delta_{\mathsf{l},\mathsf{i}}\delta_{\mathsf{m},\mathsf{j}}, \quad \mathsf{l},\mathsf{m} = 0, 1, 2.$$

Ao aplicar a matriz de Weyl nos estados:

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0\\0 \end{pmatrix}, \tag{5.2.1}$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0\\1\\0 \end{pmatrix}, \tag{5.2.2}$$

ou

$$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0\\0\\1 \end{pmatrix}, \tag{5.2.3}$$

obtemos $E^{l,m} |m\rangle = |l\rangle$, (l, m = 0, 2, 1) ou $E^{l,m} |k\rangle = 0$ se $k \neq m$. Em outras palavras, a matriz de Weyl $E^{l,m}$ transforma um estado $|m\rangle$ em um estado $|l\rangle$. Cada sítio neste modelo poderá assumir uma das três possíveis configurações: O vácuo $|0\rangle$, ou seja, nenhuma partícula $(s_z = 1)$, uma partícula $|1\rangle$ $(s_z = 0)$, ou duas partículas $|2\rangle$ $(s_z = -1)$ por sítio.

Escrevemos a Hamiltoniana com condição periódica de contorno da seguinte forma, veja as figuras no Apêndice:

$$\begin{split} \mathsf{H}^{\mathrm{U}(1)} &= -\mathsf{P}_{s} \sum_{i=1}^{\mathsf{L}} \left[\sum_{\alpha=1}^{2} \left(\Gamma_{\alpha 0}^{0\alpha} \mathsf{E}_{i}^{\alpha,0} \mathsf{E}_{i+1}^{0,\alpha} + \Gamma_{0\alpha}^{\alpha0} \mathsf{E}_{i}^{0,\alpha} \mathsf{E}_{i+1}^{\alpha,0} \right) \right. \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{2} \left(\Gamma_{0\alpha}^{0\alpha} \mathsf{E}_{i}^{0,0} \mathsf{E}_{i+s}^{\alpha,\alpha} + \Gamma_{\alpha 0}^{\alpha0} \mathsf{E}_{i}^{\alpha,\alpha} \mathsf{E}_{i+s}^{0,0} \right) \\ &+ \Gamma_{20}^{11} \mathsf{E}_{i}^{2,1} \mathsf{E}_{i+s}^{0,1} + \Gamma_{02}^{11} \mathsf{E}_{i+1}^{2,0} \mathsf{E}_{i+s}^{0,1} + \Gamma_{11}^{20} \mathsf{E}_{i}^{1,2} \mathsf{E}_{i+s}^{1,0} + \Gamma_{11}^{02} \mathsf{E}_{i}^{1,0} \mathsf{E}_{i+s}^{1,0} \mathsf{E}_{i+1}^{0,2} \\ &+ \Gamma_{11}^{11} \mathsf{E}_{i}^{1,1} \mathsf{E}_{i+s}^{1,1} + \Gamma_{22}^{22} \mathsf{E}_{i}^{2,2} \mathsf{E}_{i+2s-1}^{2,1} + \Gamma_{21}^{12} \mathsf{E}_{i+2s-1}^{1,1} \mathsf{E}_{i+s}^{0,2} + \Gamma_{12}^{21} \mathsf{E}_{i+2s-1}^{1,2} \mathsf{E}_{i+2s-1}^{1,2} \mathsf{E}_{i+2s-1}^{0,2} \mathsf{E}_{i+2s-1}^{0,1} \\ &+ \Gamma_{12}^{12} \mathsf{E}_{i}^{1,1} \mathsf{E}_{i+s}^{2,2} + \Gamma_{21}^{21} \mathsf{E}_{i+2s-1}^{2,2} \mathsf{E}_{i+2s-1}^{1,1} + \mathsf{L}_{000}^{00} \right] \mathsf{P}_{s}, \tag{5.2.4}$$

de maneira que o número de partículas total seja conservado. As matrizes de Weyl troca a posição de uma configuração de spins. O parâmetro Γ_{mo}^{kl} funciona tal como os coeficientes ϵ_+ e ϵ_- visto no capítulo anterior. Os índices k, l representam a configuração inicial e os m, o a configuração final. Por exemplo, se tivermos Γ_{01}^{l0} , significa que houve a troca da posição da partícula com um sítio vazio, portanto $|1\rangle |0\rangle \rightarrow |0\rangle |1\rangle$. Veja o apêndice para uma descrição mais detalhada. E finalmente, P_s é um projetor que exclui do espaço de Hilbert configurações onde as partículas estão a uma distância menor que seus tamanhos. Tomamos como bons números quânticos para o momento do sistema, tal qual no Ansatz de Bethe visto no capítulo anterior, os seguintes valores

$$P = \frac{2\pi l}{L}, \quad l = 0, 1, \dots, L - 1,$$
 (5.2.5)

pois a condição de contorno é periódica (Invariância Translacional) e sendo a dimensão total

da rede equivalente a L.

Escreveremos o auto-estado do sistema como a seguir

$$|\Psi_{\mathbf{n},\mathbf{P}}\rangle = \sum_{\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_n} \mathbf{f}(\mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_n) | \mathbf{x}_1,\dots,\mathbf{x}_n\rangle, \qquad (5.2.6)$$

de modo que as coordenadas (x_1, \ldots, x_n) representem as posições das configurações de spin sujeitas a seguinte restrição $x_{i+1} \ge x_i, x_{i+2} > x_i$. Formulamos um ansatz do produto matricial para as amplitudes da função (5.2.6). Para nós, o conjunto de matrizes E representarão os sítios vazios. As matrizes A representarão os sítios ocupados por uma partícula, ou seja a configuração $|1\rangle$. Quando houver dupla ocupação, ou seja, a configuração $|2\rangle$, aparecerá na equação da amplitude da autofunção $|\Psi_{n,P}\rangle$ um termo envolvendo as matrizes B, escrito da forma $BE^{-1}B$. O sistema como um todo só será integrável (solução exata) para alguns valores do acoplamento Γ_{mo}^{k1} . O MPA neste caso, é escrito como sendo

$$f(x_1, \dots, x_n) = Tr\{E^{x_1 - 1}AE^{x_2 - x_1 - 1}A \dots AE^{x_n - x_{n-1} - 1}AE^{L - x_n}\Omega_P\},$$
 (5.2.7)

sem ocupação dupla, e, quando houver dupla ocupação, por exemplo na posição $x_{i+1}=x_i,$ teremos que

$$f(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n)$$

= Tr{E^{x₁-1}A ... E^{x_i-x_{i-1}-1}BE⁻¹BE^{x_{i+2}-x_i-1} ... E^{x_n-x_{n-1}-1}AE^{L-x_n}Ω_P} (5.2.8)

A inclusão da matriz Ω_P se dá justamente devido ao fato de que é necessário incluir elementos que nos possibilite fixar os momentos de (5.2.6). Para que isto ocorra, inserimos as seguintes relações algébricas

$$A\Omega_{\rm P} = e^{-iP}\Omega_{\rm P}A, \quad B\Omega_{\rm P} = e^{-iP}\Omega_{\rm P}B, \quad E\Omega_{\rm P} = e^{-iP}\Omega_{\rm P}E, \tag{5.2.9}$$

envolvendo todas as matrizes das amplitudes da função (5.2.6). Tendo tudo isto em mente, sabemos que a Hamiltoniana satisfaz uma equação de auto-valores do tipo

$$\epsilon_{\mathbf{n}} |\Psi_{\mathbf{n},\mathbf{P}}\rangle = \mathbf{H} |\Psi_{\mathbf{n},\mathbf{P}}\rangle.$$
 (5.2.10)

Ao considerar o caso mais simples, ou seja, para n = 1, verifica-se que

$$(\epsilon_{1} - (2\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{10}^{01} - \Gamma_{01}^{01})) \operatorname{Tr} \{ \mathsf{E}^{x-1} \mathsf{A} \mathsf{E}^{L-x} \Omega_{\mathsf{P}} \} = -\Gamma_{01}^{10} \operatorname{Tr} \{ \mathsf{E}^{x-2} \mathsf{A} \mathsf{E}^{L-x+1} \Omega_{\mathsf{P}} \}$$
$$-\Gamma_{10}^{01} \operatorname{Tr} \{ \mathsf{E}^{x} \mathsf{A} \mathsf{E}^{L-x-1} \Omega_{\mathsf{P}} \}$$
(5.2.11)

e escrevendo, sem perda de generalidade,

$$A^{(s)} = A_{k_1} E^{2-s}, (5.2.12)$$

junto a relação

$$\mathsf{E}\mathsf{A}_{\mathsf{k}} = \mathsf{e}^{\mathsf{i}\mathsf{k}}\mathsf{A}_{\mathsf{k}}\mathsf{E},\tag{5.2.13}$$

obtemos a energia

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -(\Gamma_{01}^{10} e^{-i\mathbf{k}} + \Gamma_{10}^{01} e^{i\mathbf{k}} - (-2\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{10}^{10} + \Gamma_{01}^{01})).$$
(5.2.14)

Obteremos resultados distintos ao analisar a equação de auto-valor quando n = 2. Pois as coordenadas $x_2 \ge x_1 + s$, $x_2 = x_1 + s$ e $x_2 = x_1$ irão gerar relações distintas. Se não analisarmos o caso onde haverá colisão, o resultado da análise das equações de auto-valor resultarão em algo bem similar ao caso em que n = 1. Quando houver duas partículas, escrevemos a matriz $A^{(s)}$ como uma composição de duas novas matrizes dependentes de dois parâmetros espectrais (Como fizemos para o modelo de Heisenberg).

$$A^{(s)} = (A_{k_1} + A_{k_2})E^{2-s}, (5.2.15)$$

e os valores da energia e do momento serão

$$\epsilon(\mathbf{k}_n) = \sum_j \epsilon(\mathbf{k}_j), \quad \mathbf{P} = \sum_j \mathbf{k}_j.$$
 (5.2.16)

Olhando para as componentes f(x, x), onde inclui a colisão, teremos:

$$\epsilon_2 f(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = -\Gamma_{02}^{20} f(\mathbf{x} - 1, \mathbf{x} - 1) - \Gamma_{20}^{02} f(\mathbf{x} + 1, \mathbf{x} + 1) -\Gamma_{20}^{11} f(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{s}) - \Gamma_{02}^{11} f(\mathbf{x} - 1, \mathbf{x} + \mathbf{s} - 1) + (2\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{02}^{02} - \Gamma_{20}^{20}) f(\mathbf{x}, \mathbf{x}),$$
(5.2.17)

já para f(x, x + s), temos que

$$\epsilon_{2}f(x,x+s) = -\Gamma_{01}^{10}f(x-1,x+s) - \Gamma_{10}^{01}f(x,x+s+1) -\Gamma_{11}^{20}f(x,x) - \Gamma_{11}^{02}f(x+1,x+1) + (3\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01} - \Gamma_{11}^{11})f(x,x+s).$$
(5.2.18)

Resolvemos as duas equações acima considerando

$$A^{(s)} = (A_{k_1} + A_{k_2})E^{2-s}, (5.2.19)$$

$$B^{(s)} = (B_{k_1} + B_{k_2})E^{2-s}, (5.2.20)$$

sendo que

$$EB_{k_j} = e^{ik_j}B_{k_j}E, \quad (B_{k_j})^2 = 0,$$
 (5.2.21)

e vale ressaltar que as matrizes A_{k_j} e B_{k_j} possuem o mesmo conjunto de parâmetros espectrais complexos $k_j.$

Reescrevendo a equação (5.2.18) explicitamente em termos dos traços, vemos que

$$\begin{split} \varepsilon_{2} \mathrm{Tr} \{ \mathsf{E}^{x-1} \mathsf{A} \mathsf{E}^{s-1} \mathsf{A} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x-s} \Omega_{\mathsf{P}} \} &= -\Gamma_{01}^{10} \mathrm{Tr} \{ \mathsf{E}^{x-2} \mathsf{A} \mathsf{E}^{s} \mathsf{A} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x-s} \Omega_{\mathsf{P}} \} \\ -\Gamma_{10}^{01} \mathrm{Tr} \{ \mathsf{E}^{x-1} \mathsf{A} \mathsf{E}^{s} \mathsf{A} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x-s-1} \Omega_{\mathsf{P}} \} - \Gamma_{11}^{20} \mathrm{Tr} \{ \mathsf{E}^{x-1} \mathsf{B} \mathsf{E}^{-1} \mathsf{B} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x} \Omega_{\mathsf{P}} \} \\ -\Gamma_{11}^{02} \mathrm{Tr} \{ \mathsf{E}^{x} \mathsf{B} \mathsf{E}^{-1} \mathsf{B} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x-1} \Omega_{\mathsf{P}} \} \\ &+ (3\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01} - \Gamma_{11}^{11}) \mathrm{Tr} \{ \mathsf{E}^{x-1} \mathsf{A} \mathsf{E}^{s-1} \mathsf{A} \mathsf{E}^{\mathsf{L}-x-s} \Omega_{\mathsf{P}} \}, \end{split}$$
(5.2.22)

e assim obtemos

$$\sum_{q,r} N(k_q, k_r) A_{k_q} A_{k_r} = \sum_{q,r} C_1(k_q, k_r) B_{k_q} B_{k_r}, \qquad (5.2.23)$$

sendo os coeficientes $N(k_{\mathfrak{q}},k_{r})$ dados por

$$N(k_{q}, k_{r}) = \left\{ \Gamma_{01}^{10}(e^{-ik_{1}} + e^{-ik_{2}}) + \Gamma_{10}^{01}(e^{ik_{1}} + e^{ik_{2}}) - (\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{11}^{11} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{01}^{01}) \right\} e^{-ik_{q}} - \Gamma_{01}^{10}e^{2ik_{q}} - \Gamma_{10}^{01}e^{-iP}e^{2ik_{r}},$$
(5.2.24)

e, ao lado direito $C_1(k_q,k_r)$

$$C_1(k_q, k_r) = \Gamma_{11}^{20} e^{-iP} e^{i(1-s)k_r} + \Gamma_{11}^{02} e^{i(1-s)k_r}.$$
(5.2.25)

O que resulta na seguinte relação

$$N(k_1, k_2)A_{k_1}A_{k_2} + N(k_2, k_1)A_{k_2}A_{k_1} = C_1(k_1, k_2)(B_{k_1}B_{k_2} + B_{k_2}B_{k_1}).$$
(5.2.26)

Já, da primeira equação (5.2.17), escrevendo os traços separadamente, temos que

$$f(x, x) = Tr\{E^{x-1}BE^{-1}BE^{L-x}\Omega_{P}\}$$
(5.2.27)

$$f(x - 1, x - 1) = Tr\{E^{x-2}BE^{-1}BE^{L-x+1}\Omega_{P}\}$$
(5.2.28)

$$f(x+1, x+1) = Tr\{E^{x}BE^{-1}BE^{L-x-1}\Omega_{P}\}$$
(5.2.29)

$$f(x, x + s) = Tr\{E^{x-1}AE^{s-1}AE^{L-x-s}\Omega_{P}\}$$
(5.2.30)

$$f(x-1, x+s-1) = Tr\{E^{x-2}AE^{s-1}AE^{L-x-s+1}\Omega_{P}\}$$
(5.2.31)

e assim, mostra-se que

$$\sum_{q,r} C_0(k_q, k_r) B_{k_q} B_{k_r} = \sum_{q,r} C_2(k_q, k_r) e^{ik_q} A_{k_q} A_{k_r}.$$
 (5.2.32)

Tal como anterior,

$$C_{0}(\mathbf{k}_{q},\mathbf{k}_{r}) = \left\{ \Gamma_{01}^{10}(e^{-i\mathbf{k}_{1}} + e^{-i\mathbf{k}_{2}}) + \Gamma_{10}^{01}(e^{i\mathbf{k}_{1}} + e^{i\mathbf{k}_{2}}) + (2\Gamma_{01}^{01} + 2\Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{02}^{02} - \Gamma_{20}^{20} - 2\Gamma_{00}^{00}) \right\} e^{i(1-s)\mathbf{k}_{r}} e^{2i\mathbf{k}_{q}} - \Gamma_{02}^{20} e^{i\mathbf{P}} e^{i(1-s)\mathbf{k}_{r}} e^{2i\mathbf{k}_{q}} - \Gamma_{02}^{20} e^{i\mathbf{P}} e^{i(1-s)\mathbf{k}_{r}} e^{2i\mathbf{k}_{q}},$$
(5.2.33)

e também

$$C_2(k_q, k_r) = \Gamma_{02}^{11} + \Gamma_{20}^{11} e^{iP}.$$
(5.2.34)

Através da expressão (5.2.17) obtemos:

$$C_0(k_1, k_2)(B_{k_1}B_{k_2} + B_{k_2}B_{k_1}) = C_2(k_1, k_2)(e^{ik_1}A_{k_2}A_{k_1} + e^{ik_2}A_{k_1}A_{k_2}).$$
(5.2.35)

De (5.2.26) e (5.2.35), verificamos que

$$A_{k_1}A_{k_2} = S(k_1, k_2)A_{k_2}A_{k_1}, \qquad (5.2.36)$$

onde

$$S(\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2}) = -\frac{C_{0}(\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2})N(\mathbf{k}_{2},\mathbf{k}_{1}) - C_{1}(\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2})C_{2}(\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2})e^{\mathbf{i}\mathbf{k}_{1}}}{C_{0}(\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2})N(\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2}) - C_{1}(\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2})C_{2}(\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2})e^{\mathbf{i}\mathbf{k}_{2}}}.$$
(5.2.37)

Podemos fazer uso da equação (5.2.26) para eliminar o conjunto de matrizes B_k , assim o traço ficará escrito em termos apenas das matrizes A_k . Sendo assim, teremos uma amplitude sempre

proporcional ao produto das matrizes $A_{k_1}A_{k_2}\ldots A_{k_n},$ então o traço será do tipo

$$Tr\{A_{k_1}A_{k_2}\ldots A_{k_n}E^L\Omega_P\}.$$

E, das propriedades cíclicas do traço, obtém-se a equação que fixa os parâmetros espectrais $k_{\rm j},$ dada por

$$e^{ik_jL} = S(k_j, k_l), \quad j = 1, 2, \dots \quad j \neq l.$$
 (5.2.38)

Para n = 3, diferentes configurações das amplitudes (5.2.7) e (5.2.8) poderão ocorrer. Na situação em que não ocorre colisão $x_3 > x_2 + s > x_1 + s$, obtém-se a energia generalizando o resultado de n = 2, ou seja, basta adicionar uma partícula. Ou então, escreve-se a matriz $A^{(s)}$ representada pelas matrizes A_{k_1} , $A_{k_2} \in A_{k_3}$. As componentes $f(x_1, x_1, x_3) \in f(x_1, x_1 + s, x_3)$ com $x_3 > x_2 + s$ e as $f(x_1, x_2, x_2) \in f(x_1, x_2, x_2 + s)$ com $x_1 < x_2 - s$ nos dará uma generalização de (5.2.26) e (5.2.35), com três partículas.

Para este caso com três partículas, as relações de colisão nos darão dois conjuntos de expressões. Para as compenentes f(x, x, x + 2s - 1) teremos

$$\epsilon_{3}f(x, x, x + 2s - 1) = -\Gamma_{02}^{20}f(x - 1, x - 1, x + 2s - 1) -\Gamma_{10}^{01}f(x, x, x + 2s) - \Gamma_{21}^{12}f(x, x + s, x + s) -\Gamma_{02}^{11}f(x - 1, x + s - 1, x + 2s - 1) + (\underbrace{3\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{02}^{02} - \Gamma_{21}^{21} - \Gamma_{10}^{10}}_{\delta})f(x, x, x + 2s - 1)$$
(5.2.39)

e para f(x, x + s, x + s)

$$\begin{aligned} \varepsilon_{3}f(x, x + s, x + s) &= -\Gamma_{01}^{10}f(x - 1, x + s, x + s) \\ -\Gamma_{20}^{02}f(x, x + s + 1, x + s + 1) - \Gamma_{12}^{21}f(x, x, x + 2s - 1) \\ &-\Gamma_{20}^{11}f(x, x + s, x + 2s) \\ + \underbrace{(3\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{20}^{20} - \Gamma_{12}^{12} - \Gamma_{01}^{01})}_{\gamma}f(x, x + s, x + s) \end{aligned}$$
(5.2.40)

Dada as expressões acima, teremos que

$$\sum_{q,r,s} D_1(k_q, k_r, k_s) B_{k_q} B_{k_r} A_{k_s} + \Gamma_{21}^{12} e^{i(-k_q + (1-s)k_s)} A_{k_q} B_{k_r} B_{k_s} + \Gamma_{02}^{11} e^{i(2k_q - k_r)} A_{k_q} A_{k_r} A_{k_s} = 0, \qquad (5.2.41)$$

sendo:

$$D_1(k_q, k_r, k_s) = (\epsilon_3 - \delta)e^{i(-k_q - sk_r)} + \Gamma_{02}^{20}e^{i(-2k_q - (1+s)k_r)} + \Gamma_{10}^{01}e^{i(-k_q - sk_r + k_s)}$$

Também, do segundo conjunto, temos

$$\sum_{q,r,s} D_2(k_q, k_r, k_s) A_{k_q} B_{k_r} B_{k_s} + \Gamma_{12}^{21} e^{i(-k_q - sk_r)} B_{k_q} B_{k_r} A_{k_s} + \Gamma_{20}^{11} e^{i(-k_q + k_s)} A_{k_q} A_{k_r} A_{k_s} = 0, \qquad (5.2.42)$$

onde

$$D_{2}(k_{q},k_{r},k_{s}) = (\epsilon_{3}-\gamma)e^{i(-k_{q}+(1-s)k_{s})} + \Gamma_{01}^{10}e^{i(-2k_{q}+(1-s)k_{s})} + \Gamma_{20}^{02}e^{i(-k_{q}+k_{r}+(2-s)k_{s})}.$$

Tal como no caso n = 2, aqui, em três partículas, teremos a amplitude $|\Psi_{3,P}\rangle$ proporcional ao traço do produto das matrizes $A_{k_1}A_{k_2}A_{k_3}$, e a equação de Bethe fixa os parâmetros k's. Aqui, também teremos uma peculiaridade com relação à integrabilidade [AL04] do Hamiltoniano. Isto só irá ocorrer (integrabilidade), para valores bem restritos da constante de acoplamento Γ_{mo}^{kl} , como veremos a seguir.

O caso n = 4 nos dará um novo conjunto de expressões. Quando analisarmos quatro partículas na situação de colisão, a amplitude

$$f(x_1, x_2, x_3, x_4) = Tr\{E^{x_1 - 1}AE^{x_2 - x_1 - 1} \dots AE^{L - x_4}\Omega_P\}$$
(5.2.43)

terá que ser analisada na seguinte condição $\mathsf{f}(\mathsf{x},\mathsf{x},\mathsf{x}+2\mathsf{s}-1,\mathsf{x}+2\mathsf{s}-1).$ Assim:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{4}f(x, x, x + 2s - 1, x + 2s - 1) &= -\Gamma_{02}^{20}f(x - 1, x - 1, x + 2s - 1, x + 2s - 1) \\ -\Gamma_{20}^{02}f(x, x, x + 2s, x + 2s) - \Gamma_{02}^{11}f(x - 1, x + s - 1, x + 2s - 1, x + 2s - 1) \\ -\Gamma_{20}^{11}f(x, x, x + 2s - 1, x + 3s - 1) \\ + \underbrace{(3\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{20}^{20} - \Gamma_{02}^{02} - \Gamma_{22}^{22})}_{\lambda}f(x, x, x + 2s - 1, x + 2s - 1) \quad (5.2.44) \end{aligned}$$

e desta forma, sabemos que:

$$\begin{aligned} \epsilon_4 - \lambda &= -\Gamma_{01}^{10} (e^{-ik_1} + e^{-ik_2} + e^{-ik_3} + e^{-ik_4}) \\ &- \Gamma_{10}^{01} (e^{ik_1} + e^{ik_2} + e^{ik_3} + e^{ik_4}) \\ &- (\Gamma_{20}^{20} + \Gamma_{02}^{02} - \Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{22}^{22}), \end{aligned}$$
(5.2.45)

tal que

$$\sum_{q,r,s,t} D_4(k_q, k_r, k_s, k_t) B_{k_q} B_{k_r} B_{k_s} B_{k_t} + \Gamma_{20}^{11} e^{i(-k_q - sk_r + k_t)} B_{k_q} B_{k_r} A_{k_s} A_{k_t} + \Gamma_{02}^{11} e^{i(-2k_q - k_r + (1 - s)k_t)} A_{k_q} A_{k_r} B_{k_s} B_{k_t} = 0, \qquad (5.2.46)$$

onde

$$D_{4}(k_{q}, k_{r}, k_{s}, k_{t}) = (\epsilon_{4} - \lambda)e^{-i(k_{q} + sk_{r} - (1 - s)k_{t})} + \Gamma_{02}^{20}e^{i(2k_{q} + (1 - s)k_{r} - (1 - s)k_{t})} + \Gamma_{20}^{02}e^{iP}e^{-i(2k_{q} + (1 + s)k_{r} - (1 - s)k_{t})}.$$

O caso geral surge para valores maiores que quatro. Desta maneira, generalizando toda a discussão dos casos anteriores, teremos que todo o conjunto de matrizes $\{A_k^{(s)}\} \in \{B_k^{(s)}\}$ obedeça as relações algébricas a seguir

$$\sum_{\mathbf{p}^{(2)}} N(\mathbf{k}_{p_1}, \mathbf{k}_{p_2}) A_{\mathbf{k}_{p_1}} A_{\mathbf{k}_{p_2}} = \sum_{\mathbf{p}^{(2)}} C_1(\mathbf{k}_{p_1}, \mathbf{k}_{p_2}) B_{\mathbf{k}_{p_1}} B_{\mathbf{k}_{p_2}}$$
(5.2.47)

$$\sum_{p^{(2)}} C_0(k_{p_1}, k_{p_1}) B_{k_{p_1}} B_{k_{p_1}} = \sum_{p^{(2)}} C_2(k_{p_1}, k_{p_2}) e^{ik_{p_1}} A_{k_{p_1}} A_{k_{p_2}}, \quad (5.2.48)$$

$$\sum_{\mathbf{p}^{(3)}} D_1(\mathbf{k}_{\mathbf{p}_1}, \mathbf{k}_{\mathbf{p}_2}, \mathbf{k}_{\mathbf{p}_3}) B_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_1}} B_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_2}} A_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_3}} + \Gamma_{21}^{12} e^{i(-\mathbf{k}_{\mathbf{p}_2} + (1-s)\mathbf{k}_{\mathbf{p}_3})} A_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_1}} B_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_2}} B_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_3}} + \Gamma_{02}^{11} e^{i(2\mathbf{k}_{\mathbf{p}_2} - \mathbf{k}_{\mathbf{p}_3})} A_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_1}} A_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_2}} A_{\mathbf{k}_{\mathbf{p}_3}} = 0, \qquad (5.2.49)$$

$$\sum_{\mathbf{p}^{(3)}} D_2(\mathbf{k}_{p_1}, \mathbf{k}_{p_2}, \mathbf{k}_{p_3}) A_{\mathbf{k}_{p_1}} B_{\mathbf{k}_{p_2}} B_{\mathbf{k}_{p_3}} + \Gamma_{12}^{21} e^{\mathbf{i}(-\mathbf{k}_{p_2} - s\mathbf{k}_{p_3})} B_{\mathbf{k}_{p_1}} B_{\mathbf{k}_{p_2}} A_{\mathbf{k}_{p_3}} + \Gamma_{20}^{11} e^{\mathbf{i}(-\mathbf{k}_{p_2} + \mathbf{k}_{p_3})} A_{\mathbf{k}_{p_1}} A_{\mathbf{k}_{p_2}} A_{\mathbf{k}_{p_3}} = 0, \qquad (5.2.50)$$

$$\sum_{p^{(4)}} D_4(k_{p_1}, k_{p_2}, k_{p_3}, k_{p_4}) B_{k_{p_1}} B_{k_{p_2}} B_{k_{p_3}} B_{k_{p_4}} + \Gamma_{20}^{11} e^{i(-k_{p_2} - sk_{p_3} + k_{p_4})} B_{k_q} B_{k_r} A_{k_s} A_{k_t} + \Gamma_{02}^{11} e^{i(-2k_{p_2} - k_{p_3} + (1-s)k_{p_4})} A_{k_{p_1}} A_{k_{p_2}} B_{k_{p_3}} B_{k_{p_4}} = 0.$$
(5.2.51)

de modo que tenhamos uma soma sobre todas as permutações p^m (m = 2, 3, 4) do conjunto $\{p_1, p_2, \ldots, p_m\}$. Para o modelo ser integrável, precisamos que as relações (5.2.49), (5.2.50) e (5.2.51) sejam satisfeitas para qualquer valor dos parâmetros espectrais. Isto impõe restrições para os valores dos acoplamentos Γ_{mo}^{kl} . Essa condição, aliada a associatividade da álgebra definida pelas matrizes $A_{k_j}E$, garante que o problema de colisão de N corpos se reduz à colisão de

dois corpos, o que torna o modelo integrável.

Comparando o modelo [AL04] com o que há de conhecido na literatura envolvendo modelos de spin-1 conhecidos, tais como [BV80] [GE81] [CZ01], verifica-se as relações para os seguintes valores das constantes de acoplamento, sendo x um parâmetro livre:

$$\begin{split} \Gamma_{00}^{00} &= \Gamma_{22}^{22} = 0, \qquad \Gamma_{01}^{01} = \Gamma_{21}^{21} = \Gamma_{02}^{20} = \Gamma_{20}^{02} = -1 \\ \Gamma_{01}^{10} &= \Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{12}^{21} = \Gamma_{21}^{12} = 1, \qquad \Gamma_{02}^{11} = \Gamma_{11}^{20} = \Gamma_{20}^{11} = \Gamma_{20}^{11} = 2\cos(x) \\ \Gamma_{02}^{02} &= \Gamma_{20}^{20} = -3 + 4\sin^{2}(x), \qquad \Gamma_{10}^{10} = \Gamma_{12}^{12} = -1 + 4\sin^{2}(x) \\ \Gamma_{11}^{11} &= -2 + 4\sin^{2}(x). \end{split}$$
(5.2.52)

assemelha-se ao que é conhecido pelo modelo de Fateev-Zamalodichikov [BV80]. Os resultados

$$\begin{split} \Gamma_{01}^{10} &= \Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{21}^{12} = \Gamma_{12}^{21} = 1, \qquad \Gamma_{00}^{00} = \Gamma_{01}^{01} = \Gamma_{10}^{10} = 0 \\ \Gamma_{02}^{20} &= \Gamma_{20}^{02} = \frac{\cosh(x)}{\cosh(3x)}, \qquad \Gamma_{11}^{20} = \Gamma_{20}^{11} = \frac{\cosh(2x)}{\cosh(3x)} e^{2x} \\ \Gamma_{02}^{11} &= \Gamma_{11}^{02} = \frac{\cosh(2x)}{\cosh(3x)} e^{-2x}, \qquad \Gamma_{11}^{11} = 2\frac{\cosh(x)\cosh(2x)}{\cosh(3x)} \\ \Gamma_{02}^{02} &= \Gamma_{20}^{20} = \Gamma_{02}^{20} + 2\Gamma_{11}^{11}\sinh^{2}(x), \qquad \Gamma_{12}^{12} = \Gamma_{02}^{02} + \Gamma_{02}^{20}e^{-4x} \\ \Gamma_{21}^{21} &= \Gamma_{02}^{02} + \Gamma_{02}^{20}e^{4x}, \qquad \Gamma_{22}^{22} = 2\Gamma_{02}^{02} + 2\Gamma_{02}^{20}\cosh(4x) \end{split}$$
(5.2.53)

ao modelo de Izergin-Korepin [GE81]. Já os valores das constantes de acoplamento

$$\begin{split} \Gamma_{00}^{00} &= \Gamma_{01}^{01} = \Gamma_{10}^{10} = 0 \qquad \Gamma_{01}^{10} = \Gamma_{10}^{01} = -1 \\ \Gamma_{02}^{20} &= \Gamma_{20}^{02} = -t \qquad \Gamma_{12}^{21} = \Gamma_{21}^{12} = -b \\ \Gamma_{11}^{11} &= bt \qquad \Gamma_{22}^{22} = -(2-b)t^{-1} \\ \Gamma_{11}^{20} &= \Gamma_{20}^{11} = -e^{i\frac{\pi}{3}}\sqrt{t^2 - 1} \qquad \Gamma_{02}^{11} = \Gamma_{11}^{02} = be^{i\frac{\pi}{3}}\sqrt{t^2 - 1} \\ \Gamma_{12}^{12} &= -\frac{1}{2}((2-b)t^{-1} - ib\sqrt{3t}) \qquad \Gamma_{21}^{21} = -\frac{1}{2}((2-b)t^{-1} + ib\sqrt{3t}) \\ \Gamma_{02}^{02} &= \Gamma_{20}^{20} = -\frac{1}{2}((2-b)t^{-1} + bt) \qquad (5.2.54) \end{split}$$

ao modelo de spin-1 [CZ01], sendo t
 um parâmetro livre e b
 podendo assumir os valores +1
e-1.

Então, a escolha da forma para o conjunto de matrizes $A_{\mathbf{k}_j}$ e $B_{\mathbf{k}_j}$ dada por

$$A^{(s)} = \sum_{j=1}^{n} A_{k_j} E^{2-s}, \quad B^{(s)} = \sum_{j=1}^{n} B_{k_j} E^{2-s}, \quad (5.2.55)$$

junto aos elementos $S(k_j, k_l)$, em conjunto com a Equação de Bethe

$$e^{ik_{j}L} = \prod_{l=1, l \neq j}^{n} S(k_{j}, k_{l}) \left(\frac{e^{ik_{j}}}{e^{ik_{l}}}\right)^{s-1},$$
(5.2.56)

obtida a partir da amplitude $Tr\{A_{k_1}A_{k_2}...A_{k_n}E^L\Omega_P\}$, fixará os parâmetros necessários para que tenhamos o MPA de forma completa, envolvendo o modelo com uma lei de conservação dado nesta seção.

5.3 Modelos de Spin 1 e duas leis de conservação

Nesta seção estudaremos um modelos de spin 1 com duas leis de conservação [AL04]. Este modelo descreve a difusão de dois tipos de partículas em uma rede. Existem diversos modelos de spin-1 deste tipo na literatura. Por exemplo, o modelo t-J[P87], os modelos de Sutherland[B75] e Perk-Schultz[HL81], e diversos problemas estocásticos de difusão de partículas[CZ00a].

Neste caso, teremos dois tipos de partículas (tipo 1 e tipo 2), de modo que o número total de partículas de cada tipo se conserve. Denominamos o tamanho de cada uma delas como s_1 e s_2 . Dada uma rede de dimensão L, composta por j-ésimos sítios tal que, ao introduzirmos uma variável Q_j a mesma possa representar um sítio vazio (Q = 0), a partícula do tipo 1 (Q = 1) e a partícula do tipo 2 (Q = 2).

O Hamiltoniano que descreve a dinâmica de todas as configurações possíveis é dado por

$$H = -P_{s} \sum_{i=1}^{L} \left[\sum_{\alpha=1}^{2} \left(\Gamma_{\alpha 0}^{0\alpha} E_{i}^{\alpha,0} E_{i+1}^{0,\alpha} + \Gamma_{\alpha 0}^{0\alpha} E_{i}^{\alpha,0} E_{i+1}^{0,\alpha} \right) + \sum_{\alpha=1}^{2} \sum_{\beta=1}^{2} \Gamma_{\beta \alpha}^{\alpha\beta} E_{i}^{\beta,\alpha} E_{i+s_{\beta}}^{\alpha,0} E_{i+s_{\alpha}}^{0,\beta} + \sum_{\alpha=0}^{2} \sum_{\beta=0}^{2} \Gamma_{\alpha \beta}^{\alpha\beta} E_{i}^{\alpha,\alpha} E_{i+s_{\alpha}}^{\beta,\beta} \right] P_{s} + L\Gamma_{00}^{00}$$
(5.3.1)

de modo que tenhamos a mesma representação das matrizes de Weyl mostradas na seção anterior. O projetor P_s exclui a possibilidade de considerar nas somas do Hamiltoniano alguma configuração que não obedeça a proibição envolvendo a dimensão das partículas de cada tipo. Na prática isto nos diz que não haverá uma partícula nos vizinhos próximos $s_1 - 1$ e $s_2 - 1$, $s_1, s_2 = 1, 2, \ldots$ As constantes de acoplamento Γ_{mo}^{kl} descrevem a dinâmica das partículas (Veja o Apêndice).

Dada uma equação de auto-valor do tipo

$$\mathbf{H}_{\mathbf{s}_{1},\mathbf{s}_{2}} \left| \Psi_{\mathbf{n}_{1},\mathbf{n}_{2},\mathbf{P}} \right\rangle = \epsilon_{\mathbf{n}_{1},\mathbf{n}_{2}} \left| \Psi_{\mathbf{n}_{1},\mathbf{n}_{2},\mathbf{P}} \right\rangle \tag{5.3.2}$$

escreve-se o auto-estado como sendo função das coordenadas $(x_1, Q_1; \ldots; x_n, Q_n)$ de modo que represente a posição de cada partícula e seu respectivo tipo. O número total de partículas do

sistema é uma quantidade que se conserva. Teremos que respeitar as seguintes condições:

$$\mathbf{x}_{n+1} \ge \mathbf{x}_n + \mathbf{s}_{\mathbf{Q}_n} \quad \mathbf{s}_{\mathbf{Q}_i} \le \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_1 \le \mathbf{L} - \mathbf{s}_{\mathbf{Q}_n} \tag{5.3.3}$$

e sendo assim, teremos que

$$|\Psi_{n_1,n_2,P}\rangle = \sum_{Q} \sum_{x_1,\dots,x_n} f(x_1, Q_1; \dots; x_n, Q_n) | x_1, Q_1; \dots; x_n, Q_n \rangle.$$
(5.3.4)

O Ansatz proposto por [AL04] da amplitude da função de onda será

$$f(x_1, Q_1; \dots; x_n, Q_n) = Tr\{E^{x_1 - 1}Y^{Q_1}E^{x_2 - x_1 - 1}Y^{Q_2} \dots E^{x_n - x_{n-1} - 1}Y^{Q_n}E^{L - x_n}\Omega_P\}$$
(5.3.5)

tal que as matrizes Υ^Q faça a distinção do tipo de partícula na interação. Estas matrizes possuem um carácter semelhante às matrizes $A^{(s)}$ na seção anterior. Os sítios vazios são representados pelo conjunto de matrizes E, e Ω_P fixará o momento. Faremos uso das seguintes relações de comutação

$$Y^{Q}\Omega_{P} = e^{-iP}\Omega_{P}Y^{Q}, \quad E\Omega_{P} = e^{-iP}\Omega_{P}E$$
(5.3.6)

Para uma pequena amostra de partículas, por exemplo, se n = 1 teremos o mesmo resultado para energia e momento tal como no caso anterior, com uma lei de conservação. Agora, considerando n = 2, a Hamiltoniana juntos as equações de auto-valor, nos dará dois conjuntos de expressões.

Se Q_1 e Q_2 estão em posições tal que $x_2 > x_1 + s_{Q_1}$, ou seja, não há colisão, só haverá a interação de partículas de cada tipo com os sítios vizinhos, logo

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(Q_{1},Q_{2})} \mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x-1}\mathrm{Y}^{Q_{1}}\mathrm{E}^{x_{2}-x_{1}-1}\mathrm{Y}^{Q_{2}}\mathrm{E}^{L-x_{2}}\Omega_{P}\} \\ &= -\Gamma_{0Q_{1}}^{Q_{1}0}\mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x_{1}-2}\mathrm{Y}^{Q_{1}}\mathrm{E}^{x_{2}-x_{1}}\mathrm{Y}^{Q_{2}}\mathrm{E}^{L-x_{2}}\Omega_{P}\} \\ &- \Gamma_{Q_{1}0}^{Q_{0}}\mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x_{1}}\mathrm{Y}^{Q_{1}}\mathrm{E}^{x_{2}-x_{1}-2}\mathrm{Y}^{Q_{2}}\mathrm{E}^{L-x_{2}}\Omega_{P}\} \\ &- \Gamma_{0Q_{2}}^{Q_{2}0}\mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x_{1}-1}\mathrm{Y}^{Q_{1}}\mathrm{E}^{x_{2}-x_{1}-2}\mathrm{Y}^{Q_{2}}\mathrm{E}^{L-x_{2}+1}\Omega_{P}\} \\ &- \Gamma_{Q_{2}0}^{Q_{2}0}\mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x_{1}-1}\mathrm{Y}^{Q_{1}}\mathrm{E}^{x_{2}-x_{1}}\mathrm{Y}^{Q_{2}}\mathrm{E}^{L-x_{2}-1}\Omega_{P}\} \\ &+ (4\Gamma_{00}^{00}-\Gamma_{Q_{1}0}^{Q_{1}0}-\Gamma_{0Q_{1}}^{0Q_{1}}-\Gamma_{Q_{2}0}^{Q_{2}0}-\Gamma_{0Q_{2}}^{0Q_{2}})\mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x-1}\mathrm{Y}^{Q_{1}}\mathrm{E}^{x_{2}-x_{1}-1}\mathrm{Y}^{Q_{2}}\mathrm{E}^{L-x_{2}}\Omega_{P}\}. \end{aligned} \tag{5.3.7}$$

Agora, quando houver colisão $x_1 = x e x_2 = x_1 + s_{Q_1}$:

$$\begin{aligned} \varepsilon^{(Q_{1},Q_{2})} \mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x-1} \mathrm{Y}^{Q_{1}} \mathrm{E}^{s_{Q_{1}}-1} \mathrm{Y}^{Q_{2}} \mathrm{E}^{L-x-s_{Q_{1}}} \Omega_{\mathrm{P}}\} = \\ & -\Gamma_{0Q_{1}}^{Q_{1}0} \mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x_{1}-2} \mathrm{Y}^{Q_{1}} \mathrm{E}^{x_{2}-x_{1}} \mathrm{Y}^{Q_{2}} \mathrm{E}^{L-x-s_{Q_{1}}} \Omega_{\mathrm{P}}\} \\ & -\Gamma_{Q_{2}0}^{0Q_{2}} \mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x_{1}} \mathrm{Y}^{Q_{1}} \mathrm{E}^{s_{Q_{2}}} \mathrm{Y}^{Q_{2}} \mathrm{E}^{L-x-s_{Q_{1}}-1} \Omega_{\mathrm{P}}\} \\ & -\Gamma_{Q_{1}Q_{2}}^{Q_{2}Q_{1}} \mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x_{1}-1} \mathrm{Y}^{Q_{2}} \mathrm{E}^{s_{Q_{2}}-1} \mathrm{Y}^{Q_{1}} \mathrm{E}^{L-x-s_{Q_{2}}} \Omega_{\mathrm{P}}\} \\ & + (3\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{Q_{2}0}^{Q_{2}0} - \Gamma_{0Q_{1}}^{0Q_{1}} - \Gamma_{Q_{1}Q_{2}}^{Q_{1}}) \mathrm{Tr}\{\mathrm{E}^{x-1} \mathrm{Y}^{Q_{1}} \mathrm{E}^{s_{Q_{1}}-1} \mathrm{Y}^{Q_{2}} \mathrm{E}^{L-x-s_{Q_{1}}} \Omega_{\mathrm{P}}\}, \end{aligned}$$
(5.3.8)

ou cada uma interage com um sítio vazio, ou elas trocam de posição na rede.

Sendo as partículas do mesmo tipo, as soluções serão as mesmas do modelos XXZ de Heisenberg ao identificar-mos $\Upsilon^{(Q)}$ como sendo

$$Y^{Q} = \sum_{j=1}^{n} Y^{Q}_{k_{j}} E^{2-s_{Q}}, \quad (Y^{Q}_{k_{j}})^{2} = 0,$$
(5.3.9)

e assim, com n = 2, tem-se que:

$$\epsilon^{(Q,Q)} = \sum_{j=1}^{n} \epsilon^{(Q)}(k_j), \quad \mathbf{P} = \sum_{j=1}^{n} k_j$$
 (5.3.10)

Da condição de colisão, juntos as expressões acima, obteremos como se dá a relação de comutação entre as matrizes $\Upsilon^{(Q)}$

$$Y_{k_{m}}^{Q}Y_{k_{n}}^{Q} = S_{QQ}^{QQ}(k_{m}, k_{n})Y_{k_{n}}^{Q}Y_{k_{m}}^{Q}, \quad (m \neq n), \quad (Y_{k_{m}}^{Q})^{2} = 0,$$
(5.3.11)

tal que,

$$S_{QQ}^{QQ}(k_{m},k_{n}) = -\frac{\Gamma_{0Q}^{Q0} + \Gamma_{Q0}^{0Q}e^{i(k_{m}+k_{n})} - (\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{QQ}^{QQ} - \Gamma_{0Q}^{0Q}\Gamma_{Q0}^{00})e^{ik_{m}}}{\Gamma_{0Q}^{Q0} + \Gamma_{Q0}^{0Q}e^{i(k_{m}+k_{n})} - (\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{QQ}^{QQ} - \Gamma_{0Q}^{0Q}\Gamma_{Q0}^{00})e^{ik_{n}}}.$$
(5.3.12)

Se as partículas forem de diferentes espécies, teremos que fazer duas considerações. (i) A primeira consiste no caso em que as matrizes dependem de parâmetros espectrais independentes. Neste caso temos:

$$\mathbf{Y}^{1} = \mathbf{Y}_{k_{1}}^{1} \mathbf{E}^{2-s_{1}}, \quad \mathbf{Y}^{2} = \mathbf{Y}_{k_{2}}^{2} \mathbf{E}^{2-s_{2}}$$
(5.3.13)

de forma que (5.3.7) nos dá o valor do momento e da energia, mas de (5.3.8) teremos duas

equações independentes

$$\begin{bmatrix} (\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{Q_{10}}^{Q_{10}} - \Gamma_{0Q_{2}}^{0Q_{2}} - \Gamma_{Q_{1}Q_{2}}^{Q_{1}Q_{2}})e^{ik_{Q_{2}}} - (\Gamma_{0Q_{2}}^{Q_{20}} + \Gamma_{Q_{10}}^{0Q_{1}})e^{i(k_{1}+k_{2})} \end{bmatrix} Y_{k_{Q_{2}}}^{Q_{2}} Y_{k_{Q_{1}}}^{Q_{1}} + \Gamma_{Q_{1}Q_{2}}^{Q_{2}}e^{ik_{Q_{2}}}Y_{k_{Q_{2}}}^{Q_{2}}Y_{k_{Q_{1}}}^{Q_{1}} = 0$$
(5.3.14)

Para que em (5.3.14) tenhamos os parâmetros k's livres, é necessário fazer algumas considerações a respeito dos valores das constantes de acoplamento. Por exemplo, ao escolhermos

$$\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{12}^{12} - \Gamma_{10}^{10} - \Gamma_{02}^{02} = 0$$

e também

$$\Gamma_{02}^{20} = \Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{12}^{21} = 0$$

teremos como resultado

$$Y_{k_1}^1 Y_{k_2}^2 = S_{12}^{12}(k_1, k_2) Y_{k_2}^2 Y_{k_1}^1$$

$$Y_{k_2}^2 Y_{k_1}^1 = S_{21}^{21}(k_2, k_1) Y_{k_1}^1 Y_{k_2}^2$$
(5.3.15)

ou seja

$$S_{12}^{12} = \frac{\Gamma_{01}^{10} + \Gamma_{10}^{01} e^{i(k_1 + k_2)} - (\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{21}^{21} - \Gamma_{20}^{20} - \Gamma_{01}^{01}) e^{ik_1}}{\Gamma_{21}^{12} e^{ik_1}}.$$
(5.3.16)

O segundo caso (ii) consiste em obter as soluções de (5.3.7) e (5.3.8) com ambas as matrizes dependendo de um mesmo conjunto de dois parâmetros espectrais, tal como (5.3.9), mas isto só será possível se

$$Y_{k_j}^{(Q_1)}Y_{k_j}^{(Q_2)} = 0, \quad j = 1,2 \quad (Q_1, Q_2 = 1,2),$$
 (5.3.17)

assim as constantes de acoplamento estarão restritas a condição $\Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{20}^{02}$ e $\Gamma_{01}^{10} = \Gamma_{02}^{20}$, e desta forma, a energia e o momento será

$$\epsilon(Q_1, Q_2) = \epsilon^{(Q_1)}(k_1) + \epsilon^{(Q_2)}(k_2), \quad \mathbf{P} = k_1 + k_2.$$
 (5.3.18)

Junto as equações (5.3.7), (5.3.9) e (5.3.18) é possivel obter as seguintes relações algébricas:

$$\sum \left(\mathsf{D}_{\mathbf{l},\mathbf{m}} + \nu(\mathbf{Q}_{1},\mathbf{Q}_{2})\boldsymbol{e}^{\mathbf{i}\mathbf{k}_{\mathbf{m}}} \right) \mathsf{Y}_{\mathbf{k}_{1}}^{\mathbf{Q}_{1}} \mathsf{Y}_{\mathbf{k}_{\mathbf{m}}}^{\mathbf{Q}_{2}} + \mathsf{\Gamma}_{\mathbf{Q}_{1}\mathbf{Q}_{2}}^{\mathbf{Q}_{2}\mathbf{Q}_{1}} \boldsymbol{e}^{\mathbf{i}\mathbf{k}_{\mathbf{m}}} \mathsf{Y}_{\mathbf{k}_{1}}^{\mathbf{Q}_{2}} \mathsf{Y}_{\mathbf{k}_{\mathbf{m}}}^{\mathbf{Q}_{1}} = 0$$
(5.3.19)

e também

$$\sum \Gamma_{Q_1Q_2}^{Q_2Q_1} e^{ik_m} Y_{k_l}^{Q_1} Y_{k_m}^{Q_2} + (D_{l,m} + \nu(Q_1, Q_2) e^{ik_m}) Y_{k_l}^{Q_2} Y_{k_m}^{Q_1} = 0,$$
(5.3.20)

sendo que

$$D_{1,m} = -(\Gamma_{0Q_1}^{Q_10} + \Gamma_{Q_10}^{0Q_1} e^{i(k_1 + k_1)})$$

$$\nu(Q_1, Q_2) = \Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{Q_1Q_2}^{Q_1Q_2} - \Gamma_{Q_10}^{Q_10} - \Gamma_{Q_20}^{Q_20}.$$
(5.3.21)

Assim, a comutação do conjunto de matrizes $\{Y_k^{(Q)}\}$ será

$$Y_{k_{1}}^{Q_{1}}Y_{k_{m}}^{Q_{2}} = S_{Q_{2}Q_{1}}^{Q_{1}}Y_{k_{m}}^{Q_{1}}Y_{k_{1}}^{Q_{2}} + S_{Q_{1}Q_{2}}^{Q_{1}}Y_{k_{1}}^{Q_{2}}Y_{k_{1}}^{Q_{2}}Y_{k_{m}}^{Q_{1}},$$
(5.3.22)

de forma que a primeira será

$$S_{Q_{2}Q_{1}}^{Q_{1}Q_{2}} = -\left\{1 - \frac{e^{ik_{1}} - e^{ik_{m}}}{\Delta} [(D_{1,m} + \nu(Q_{1}, Q_{2})e^{ik_{m}})\nu(Q_{2}, Q_{1}) - \Gamma_{Q_{1}Q_{2}}^{Q_{2}Q_{1}}\Gamma_{Q_{2}Q_{1}}^{Q_{1}Q_{2}}e^{ik_{m}}]\right\} (5.3.23)$$

já a segunda

$$S_{Q_1Q_2}^{Q_1Q_2} = -\left\{1 - \frac{e^{ik_1} - e^{ik_m}}{\Delta} [(D_{1,m} + \nu(Q_1, Q_2)e^{ik_m})\Gamma_{Q_1Q_2}^{Q_2Q_1} - \Gamma_{Q_1Q_2}^{Q_2Q_1}\nu(Q_1, Q_2)e^{ik_m}]\right\} (5.3.24)$$

de modo que

$$\Delta = (\mathsf{D}_{l,\mathfrak{m}} + \nu(Q_1, Q_2)e^{ik_\mathfrak{m}})(\mathsf{D}_{l,\mathfrak{m}} + \nu(Q_2, Q_1)e^{ik_\mathfrak{m}}) - \Gamma_{Q_1Q_2}^{Q_2Q_1}\Gamma_{Q_2Q_1}^{Q_1Q_2}e^{2ik_\mathfrak{m}}.$$
 (5.3.25)

Em todos os casos, tendo partículas equivalentes ou não, as propriedades cíclicas no traço farão com que seja possível resolver todo o conjunto de parâmetros espectrais para que o MPA tenha solução. Para o modelo ser integrável, a álgebra precisa ser associativa para que o problema de N corpos se reduza ao problema da colisão de dois corpos. Neste caso, para a álgebra ser associativa, precisamos satisfazer a relação de Yang-Baxter[Bax07], como veremos adiante.

5.4 O caso mais geral

Podemos pensar em um número qualquer de moléculas do tipo 1 e 2 se difundindo devido a ação do Hamiltoniano (5.3.1). Para isso podemos generalizar o que foi mostrado nos casos anteriores e obter a expressão geral para o sistema envolvendo n partículas. Sendo $n = n_1 + n_2$ o número total de partículas dos dois tipos, quantidade esta que se conserva (número total de moléculas na rede), ao considerarmos:

$$Y^{(1)} = \sum_{j=1}^{n_1} Y^{(1)}_{k_j} E^{2-s_1}$$
$$Y^{(2)} = \sum_{j=1}^{n_2} Y^{(2)}_{k_j} E^{2-s_2},$$
(5.4.1)

a equação de auto-valor junto ao auto-vetor mais geral possível $|\Psi_{n_1,n_2,P}\rangle$ onde não houver colisão das partículas teremos uma generalização trivial do problema de dois corpos (caso n = 2).

O outro caso, como vimos anteriormente, se escolhermos $\Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{20}^{02}$ e $\Gamma_{01}^{10} = \Gamma_{02}^{20}$, as matrizes Y^Q serão escritas como sendo

$$\mathbf{Y}^{(Q)} = \sum_{j=1}^{n=n_1+n_2} \mathbf{Y}_{k_j}^{(Q)} \mathbf{E}^{2-s_Q}$$
(5.4.2)

sendo (Q = 1, 2) a variável que denomina o tipo de cada partícula. Em todo o caso, a energia e momento do sistema serão

$$\epsilon(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = \sum_{j=1}^{n_1} \epsilon^{(1)}(\mathbf{k}_j) + \sum_{j=n_1+1}^{n_2} \epsilon^{(2)}(\mathbf{k}_j)$$
(5.4.3)

$$P = \sum_{j=1}^{n} k_j, \qquad (5.4.4)$$

ou seja, a energia pode ser escrita como sendo a soma da energia total das partículas de cada tipo.

O conjunto de amplitudes tal que as partículas do tipo 1 (Q_1) e do tipo 2 (Q_2) estão localizadas nas posições x_j e x_{j+1} tal que $x_{j+1} = x_j + s_{Q_1}$ nos dará a seguinte generalização para a comutação das matrizes Y^Q :

$$Y_{k_{j}}^{(Q_{1})}Y_{k_{l}}^{(Q_{2})} = S_{Q_{1}Q_{2}}^{Q_{1}Q_{2}}(k_{j},k_{l})Y_{k_{l}}^{(Q_{2})}Y_{k_{j}}^{(Q_{1})} \quad (Q_{1},Q_{2}=1,2) \quad k_{j} \neq k_{l},$$
(5.4.5)

sendo que

$$\begin{split} & \mathfrak{n}_{Q_{1}-1} < \mathfrak{j} \leqslant \mathfrak{n}_{\mathfrak{q}_{1}} + (Q_{1}-1)\mathfrak{n}_{Q_{1}-1} \\ & \mathfrak{n}_{Q_{2}-1} < \mathfrak{l} \leqslant \mathfrak{n}_{\mathfrak{q}_{2}} + (Q_{2}-1)\mathfrak{n}_{Q_{2}-1}, \end{split} \tag{5.4.6}$$

ou seja, a estrutura algébrica da matriz de espalhamento $S(k_i, k_l)$ é dada, no caso geral, por:

$$S_{QQ}^{QQ}(k_{m},k_{n}) = -\frac{\Gamma_{0Q}^{Q0} + \Gamma_{Q0}^{0Q}e^{i(k_{m}+k_{n})} - (\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{QQ}^{QQ} - \Gamma_{0Q}^{0Q}\Gamma_{Q0}^{00})e^{ik_{m}}}{\Gamma_{0Q}^{Q0} + \Gamma_{Q0}^{0Q}e^{i(k_{m}+k_{n})} - (\Gamma_{00}^{00} - \Gamma_{QQ}^{QQ} - \Gamma_{0Q}^{0Q}\Gamma_{Q0}^{00})e^{ik_{n}}},$$
(5.4.7)

sendo

$$S_{12}^{12} = \frac{\Gamma_{01}^{10} + \Gamma_{10}^{01} e^{i(k_1 + k_2)} - (\Gamma_{00}^{00} + \Gamma_{21}^{21} - \Gamma_{20}^{20} - \Gamma_{01}^{01}) e^{ik_1}}{\Gamma_{21}^{12} e^{ik_1}}.$$
(5.4.8)

Se quisermos a matriz contrária, basta inverter S_{12}^{12} . Considerando $\Gamma_{10}^{01} = \Gamma_{20}^{02}$ e $\Gamma_{01}^{10} = \Gamma_{02}^{20}$ mostra-se

$$Y_{k_{l}}^{Q_{1}}Y_{k_{m}}^{Q_{2}} = \sum_{Q'} S_{Q'_{2}Q'_{1}}^{Q_{1}Q_{2}}(k_{l},k_{m})Y_{k_{m}}^{Q'_{1}}Y_{k_{l}}^{Q'_{2}}, \quad k_{l} \neq k_{m}.$$
(5.4.9)

O MPA para as amplitudes (5.2.7) e (5.2.8), só é valido se as relações de comutação para o conjunto de matrizes Y^Q apresentados aqui, em ambos os casos mostrados (i) e (ii), nos de um conjunto n de expressões que possam ser escritas envolvendo produtos da seguinte forma $Y^{\alpha}Y^{\beta}Y^{\gamma}$. Portanto, a álgebra entre as matrizes $Y^{(Q)}$ deve ser comutativa para as amplitudes da função de onda serem bem definidas.

Sendo assim ao comutarmos

$$\begin{split} \mathbf{Y}^{\alpha}\mathbf{Y}^{\beta}\mathbf{Y}^{\gamma} &\to \mathbf{Y}^{\beta}\mathbf{Y}^{\alpha}\mathbf{Y}^{\gamma} \to \mathbf{Y}^{\beta}\mathbf{Y}^{\gamma}\mathbf{Y}^{\alpha} \to \mathbf{Y}^{\gamma}\mathbf{Y}^{\beta}\mathbf{Y}^{\alpha}, \\ \mathbf{Y}^{\alpha}\mathbf{Y}^{\beta}\mathbf{Y}^{\gamma} \to \mathbf{Y}^{\alpha}\mathbf{Y}^{\gamma}\mathbf{Y}^{\beta} \to \mathbf{Y}^{\gamma}\mathbf{Y}^{\alpha}\mathbf{Y}^{\beta} \to \mathbf{Y}^{\gamma}\mathbf{Y}^{\beta}\mathbf{Y}^{\alpha}, \end{split}$$
(5.4.10)

a estrutura da amplitude de espalhamento deverá satisfazer

$$\sum_{\gamma,\gamma',\gamma''}^{2} S_{\gamma\gamma'}^{\alpha\alpha'}(k_{1},k_{2}) S_{\beta\gamma''}^{\gamma\alpha''}(k_{1},k_{3}) S_{\beta'\beta''}^{\gamma'\gamma''}(k_{2},k_{3}) = \sum_{\gamma,\gamma',\gamma''}^{2} S_{\gamma'\gamma''}^{\alpha'\alpha''}(k_{2},k_{3}) S_{\gamma\beta''}^{\alpha\gamma''}(k_{1},k_{3}) S_{\beta\beta'}^{\gamma\gamma'}(k_{1},k_{2}), \qquad (5.4.11)$$

sendo todos os α , α'' , β , β' e β'' assumindo os valores um ou dois no somatório.

Este vínculo para as amplitudes de espalhamento é a conhecida relação de Yang-Baxter[Bax07], e esta condição é suficiente para a implicação da associatividade da álgebra definida pelas matrizes Y^Q . No caso (ii), onde impomos uma restrição para as constantes de acoplamento, a matriz de espalhamento **S** é não diagonal e a relação de Yang-Baxter carrega vínculos que tornam o problema não trivial. O outro caso é mais simples, pois a matriz de espalhamento é diagonal e a relação de Yang-Baxter satisfaz-se naturalmente. Não faremos neste trabalho a busca por todos os possíveis valores para as constantes de acoplamento envolvendo o Hamiltoniano, nem encontraremos as soluções da equação de Yang-Baxter, devido sua alta complexidade. Focamos aqui em obter as relações de comutação de todas as matrizes construídas no MPA. Este, que é independente do tamanho das partículas (moléculas) e seus respectivos tipos. Algumas das soluções da equação de Yang-Baxter presentes na literatura especializada são:

$$\Gamma^{\alpha\beta}_{\beta\alpha} = 1, \quad \Gamma^{\alpha\alpha}_{\alpha\alpha} = \mathfrak{a}_{\alpha} \cosh(\mathbf{x})$$

$$\Gamma^{\alpha\beta}_{\alpha\beta} = \operatorname{sgn}(\alpha - \beta) \sinh(\mathbf{x}) \quad (\alpha \neq \beta)$$
(5.4.12)

sendo estas as soluções do modelo anisotrópico de Perk-Schutz[HL81], onde x é um parâmetro livre e $a_{\alpha} = \pm 1$.

O modelo isotrópico surge quando o parâmetro livre \mathbf{x} é nulo, tal como pode ser visto no modelo de Sutherland [B75]. Estas soluções para a equação de Yang-Baxter, quando $\mathbf{a}_1 =$ $-\mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_3 = 1$ correspondem ao modelo anisotrópico t-J. Outra solução conhecida na literatura é [CZ00a]

$$\Gamma^{\alpha\beta}_{\beta\alpha} = \Gamma^{\alpha\beta}_{\alpha\beta} = q^{sng(\alpha-\beta)}$$

$$\Gamma^{\alpha\alpha}_{\alpha\alpha} = 0 \quad (\alpha, \beta = 1, 2)$$
(5.4.13)

sendo $\mathbf{q} \ge 1$ um número real, o que nada mais é que um parâmetro assimétrico que descreve as flutuações temporais em uma difusão assimétrica de partículas ordenadas hierarquicamente. Uma generalização deste resultado pode ser vista em [CJ03].

Para o caso de duas leis de conservação e difusão de partículas, as amplitudes do modelo são proporcionais ao traço

$$\mathsf{Tr}\{\mathsf{Y}_{k_{1}}^{1}\ldots\mathsf{Y}_{k_{n_{1}}}^{1}\mathsf{Y}_{k_{n_{1}+1}}^{2}\ldots\mathsf{Y}_{k_{n}}^{2}\mathsf{E}^{\mathsf{L}-\mathfrak{n}_{1}(s_{1}-1)-\mathfrak{n}_{2}(s_{2}-1)}\Omega_{\mathsf{P}}\},\tag{5.4.14}$$

e as propriedades cíclicas do traço fixarão os parâmetros espectrais k's. Dada as comutações de todas as matrizes conhecidas no MPA, para o caso (i) obtemos

$$\begin{split} e^{ik_{j}L} &= \left[\prod_{l=1}^{n_{1}} S_{11}^{11}(k_{j},k_{l}) \left(\frac{e^{ik_{j}}}{e^{ik_{l}}}\right)^{s_{1}-1}\right] \prod_{l=n_{1}+1}^{n} S_{12}^{12}(k_{j},k_{l}) \left(\frac{e^{ik_{j}}}{e^{ik_{l}}}\right)^{s_{2}-1}, \quad (1 \leqslant j \leqslant n_{1}) \\ e^{ik_{j}L} &= \left[\prod_{l=n_{1}+1}^{n_{1}} S_{22}^{22}(k_{j},k_{l}) \left(\frac{e^{ik_{j}}}{e^{ik_{l}}}\right)^{s_{2}-1}\right] \prod_{l=1}^{n_{1}} S_{21}^{21}(k_{j},k_{l}) \left(\frac{e^{ik_{j}}}{e^{ik_{l}}}\right)^{s_{1}-1}, \quad (n_{1} < j \leqslant n) (5.4.15) \end{split}$$

onde S é a matriz dada por (5.4.7). A Hamiltoniana (5.3.1) é exatamente solúvel para a escolha

das constantes de acoplamento no caso (ii), e pode ser escrita como:

$$\begin{split} \mathsf{H}^{(\mathfrak{i}\mathfrak{i})} &= -\mathsf{P}\sum_{j=1}^{\mathsf{L}} \left[\mathsf{\Gamma}^{10}_{01}\mathsf{E}^{0,1}_{j}\mathsf{E}^{1,0}_{j+1} + \mathsf{\Gamma}^{02}_{20}\mathsf{E}^{2,0}_{j}\mathsf{E}^{0,2}_{j+1} + \mathsf{\Gamma}^{12}_{21}\mathsf{E}^{2,1}_{j}\mathsf{E}^{1,0}_{j+s_2}\mathsf{E}^{0,2}_{j+s_1} + \mathsf{\Gamma}^{11}_{11}\mathsf{E}^{1,1}_{j}\mathsf{E}^{1,1}_{j+s_1} \right. \\ \left. \mathsf{\Gamma}^{22}_{22}\mathsf{E}^{2,2}_{j}\mathsf{E}^{2,2}_{j+s_2} + \mathsf{\Gamma}^{01}_{01}\mathsf{E}^{0,0}_{j}\mathsf{E}^{1,1}_{j+1} + \mathsf{\Gamma}^{10}_{10}\mathsf{E}^{1,1}_{j}\mathsf{E}^{0,0}_{j+s_1} + \mathsf{\Gamma}^{02}_{02}\mathsf{E}^{0,0}_{j}\mathsf{E}^{2,2}_{j+s_2} \right. \\ \left. \mathsf{\Gamma}^{20}_{20}\mathsf{E}^{2,2}_{j}\mathsf{E}^{0,0}_{j+s_2} + \mathsf{\Gamma}^{21}_{21}\mathsf{E}^{2,2}_{j}\mathsf{E}^{1,1}_{j+s_2} + (\mathsf{\Gamma}^{01}_{10} + \mathsf{\Gamma}^{02}_{20})\mathsf{E}^{1,1}_{j}\mathsf{E}^{2,2}_{j+s_1} \right] \mathsf{P}, \quad (5.4.16) \end{split}$$

e mesmo com tais escolhas, considerando $\Gamma_{00}^{00} = 0$, restam muitos parâmetros livres. Considerando o tamanho de ambos os tipos de partículas como sendo uma unidade da grade, junto as seguintes escolhas:

$$\Gamma_{21}^{12} = -\Gamma_{12}^{12} = \Gamma_{01}^{10} + \Gamma_{20}^{02}$$

$$\Gamma_{01}^{10} = \Gamma_{10}^{10} \quad \Gamma_{20}^{02} = \Gamma_{02}^{02}$$

$$\Gamma_{11}^{11} = \Gamma_{22}^{22} = \Gamma_{01}^{01} = \Gamma_{20}^{20} = 0,$$
(5.4.17)

nos dará a Hamiltoniana de [CJ04a] da difusão de dois tipos de partículas em um modelo estocástico exatamente solúvel.

Voltando ao caso geral, reescrevemos o traço

$$Tr\{Y_{k_{1}}^{Q_{1}} \dots Y_{k_{n}}^{Q_{n}} E^{L-n_{1}(s_{1}-1)-n_{2}(s_{2}-1)}\Omega_{P}\} = e^{-ik_{j}(L-n_{1}(s_{1}-1)-n_{2}(s_{2}-1))} \sum_{Q'=1}^{2} \langle Q_{1}, \dots, Q_{n} | \tau | Q'_{1}, \dots, Q'_{n} \rangle \times Tr\{Y_{k_{1}}^{Q'_{1}} \dots Y_{k_{n}}^{Q'_{n}} E^{L-n_{1}(s_{1}-1)-n_{2}(s_{2}-1)}\Omega_{P}\},$$
(5.4.18)

onde usamos

$$\sum_{Q''} S_{Q'_{j}Q''_{j}}^{Q_{j+1}'}(k_{j},k_{j}) = -1, \qquad (5.4.19)$$

sendo que

$$\langle Q_1, \dots, Q_n | \tau | Q'_1, \dots, Q'_n \rangle = \sum_{Q''} \left\{ S_{Q'_1 Q''_1}^{Q_1 Q''_2}(k_1, k_j) \dots S_{Q'_j Q''_j}^{Q_j Q''_{j+1}}(k_j, k_j) \dots S_{Q'_1 Q''_n}^{Q_n Q''_n}(k_n, k_j) e^{i \mathsf{P}(s''_1 - 1)} \right\},$$
(5.4.20)

é a matriz de transferência de um modelo de seis vértices, onde os fatores de Boltzmann são dados pelas matrizes S em (5.3.12), (5.3.23) e (5.3.24). O modelo de seis vértices possui a

seguinte condição de contorno

$$S_{Q'_{n}Q''_{n}}^{Q_{n}Q''_{n+1}}(k_{n},k) = S_{Q'_{n}Q''_{n}}^{Q_{n}Q''_{n}}(k_{n},k)\phi_{s_{Q''_{1}}},$$
(5.4.21)

 sendo

$$\phi(s) = e^{iP(s-1)}, \tag{5.4.22}$$

onde P é o momento do auto-estado $|\Psi_{\mathfrak{n}_1,\mathfrak{n}_2,P}\rangle.$ Do traço podemos identificar que

$$\lambda(k_{j}, \{k_{l}\}) = e^{-ik_{j}(L+n-n_{1}s_{1}-n_{2}s_{2})}, \qquad (5.4.23)$$

de modo que λ seja os auto-valores do modelo de seis vértices. A condição (5.4.23), faz com que tenhamos que calcular os auto-valores da matriz de transferência não homogênea (5.4.20). Olhando para [CZ00b], [CZ00a] e [PY81] (caso (ii)), podemos obter

$$\lambda(k_{j},\{k_{l}\}) = \phi(s_{2}) \prod_{l=1}^{n} S_{22}^{22}(k_{l},k_{j}) \prod_{l=1}^{n} \frac{S_{22}^{22}(k_{j},k_{l}^{(1)})}{S_{21}^{21}(k_{j},k_{l}^{(1)})},$$
(5.4.24)

de forma que todos os parâmetros não conhecidos são fixados pelo conjunto \mathfrak{m} de equações

$$\frac{\phi(s_1)}{\phi(s_2)} \prod_{l=1}^n \frac{S_{21}^{21}(k_l, k_j^{(1)})}{S_{22}^{22}(k_l, k_j^{(1)})} = \prod_{l=1}^m \frac{S_{22}^{22}(k_j^{(1)}, k_l^{(1)})}{S_{11}^{11}(k_l^{(1)}, k_j^{(1)})} \frac{S_{21}^{21}(k_l^{(1)}, k_j^{(1)})}{S_{21}^{21}(k_j^{(1)}, k_l^{(1)})},$$
(5.4.25)

fixando os parâmetros espectrais das matrizes $Y^Q_{k_j}$

Capítulo 6

Conclusões

6.1 Considerações Finais e Perspectivas Futuras

Neste trabalho formulamos dois modelos integráveis de spin-1 de partículas com tamanho, tal como mostrado nos capítulos anteriores. Diferente do Ansatz de Bethe, que baseia-se nas amplitudes das funções de onda como sendo uma combinação não linear de ondas planas, no Ansatz do Produto Matricial, as amplitudes das funções de onda que descrevem o modelo são associadas a um produto de matrizes, cada uma carregando uma informação, como posição dos sítios vazios, os sítios que possuem uma partícula ou os constituídos por uma dupla ocupação. Mostramos como obter toda a álgebra envolvendo estas matrizes, e aplicamos todo este desenvolvimento nos modelos de Spin-1. Introduzimos o tamanho das partículas na álgebra destas matrizes, e logo em seguida comparamos os resultados dos parâmetros obtidos com modelos já conhecidos na literatura. Além disso, fizemos uma revisão dos principais modelos integráveis, do Ansatz de Bethe em sua formulação coordenada, e do Ansatz do Produto Matricial.

Existem diversas possibilidades de continuação do trabalho apresentado nesta dissertação. Um exemplo é a inclusão do tamanho nos modelos de spin $\frac{3}{2}$ [AL04], onde a Hamiltoniana deste modelo descreve a dinâmica dos dois tipos de partículas na rede sendo que o número de partículas de cada tipo se conserva separadamente. Neste modelo, poderá haver dupla ocupação, em um mesmo sítio, por partículas de tipos diferentes. Alguns destes modelos, sem tamanho, são: O modelo anisotrópico de spin $\frac{3}{2}$ de Perk-Schultz [HL81], o modelo de Essler-Korepin-Schoutens [EFHLK92] [EFHLK93], o modelo de Hubbard [HY68], entre outros. Outra possibilidade de continuação é a obtenção da solução da equação de Bethe para cada um dos casos aqui mostrados. É importante ressaltar que, devido sua alta complexidade, é necessário o uso de cálculo numérico. Para alguns casos mais simples, veja [ADK10].

Apêndice A

Figuras da Lei de Tamanho

A.1 Representando as constantes Γ_{mo}^{kl}

Neste apêndice iremos mostrar como se dá a lei de tamanho para os modelos de spin-1 com uma e duas leis de conservação, descritos no capítulo 5 deste trabalho. A Hamiltoniana de cada modelo nos dá o comportamento da dinâmica envolvendo os spins dos constituintes da rede. Portanto, ao aplicarmos a Hamiltoniana, as amplitudes da função de onda que descreve o modelo sofrem uma alteração, mostrada pelas constantes de acoplamento Γ_{mo}^{kl} . As posições $\{k, l\}$ são as configurações iniciais de spin, e as reespectivas posições finais são representadas pelas variáveis $\{m, o\}$.

Vamos ilustrar tais interações aqui de forma geométrica. Primeiramente, envolvendo a primeira parte do capítulo 5, com uma lei de conservação, um sítio poderá estar vazio, ou ocupado por uma partícula de tamanho s. Ou então, contendo uma dupla ocupação. Ou seja, com tamanho 2s - 1. Podemos fazer uso de outra notação (tamanho das partículas) sem problema nenhum, porém, devemos reescrever as equações de auto-valor, incluindo esta nova notação. Vamos representar o estado $|0\rangle$ como sendo um sítio vazio, o estado $|1\rangle$ de uma partícula na posição x (na cor verde) e o estado $|2\rangle$ como uma dupla ocupação (na cor vermelha) numa posição qualquer da grade. O que vale para todas as figuras é que a linha de cima representa a configuração inicial, e a de baixo a configuração final do sistema ao aplicarmos o Hamiltoniano.

O termo Γ_{01}^{10} é o responsável por mover a partícula (verde) para frente na rede.



Figura A.1: A partícula move-se uma casa devido a ação do Hamiltoniano.

Já o termo Γ^{01}_{10} é o responsável por mover a partícula (verde) para trás na rede.



Figura A.2: A partícula move-se uma casa para trás devido a ação do Hamiltoniano.

O mesmo ocorre com o estado em que há dupla ocupação, ou seja, teremos a ação do termo Γ_{02}^{20} , e também o termo Γ_{20}^{02} , ou seja, um move a dupla ocupação (vermelho) para frente, e o



Figura A.3: O estado duplamente ocupado interage com o vácuo, trocando de posição com o mesmo.



Figura A.4: Troca do estado $|2\rangle$ com o vácuo. A dupla ocupação move-se para trás.

outro para trás na rede.

Porém, teremos que levar em consideração a interação entre os estados duplamente ocupados e os ocupados por uma partícula. Os termos responsáveis por realizar esta troca de posição serão os Γ_{21}^{12} e Γ_{12}^{21} , mostrados pelas figuras abaixo.

Acontece que o modelo também descreve a troca de partículas. Poderemos ter uma dupla ocupação interagindo com um sítio vazio, trocando uma partícula, ou seja, desmontando a partícula. Ou então, podemos ter o caso em que duas partículas em sítios vizinhos se unam em um sítio próximo formando a dupla ocupação, montando outra partícula. Representamos isto nas figuras onde teremos as regras de montagem e desmontagem (trocas de posição) dados pelos coeficientes Γ_{11}^{20} , Γ_{11}^{01} , Γ_{11}^{11} e Γ_{01}^{11} .



Figura A.5: Troca de posição das configurações $|2\rangle|1\rangle$ por $|1\rangle|2\rangle$.



Figura A.6: Troca de posição das configurações $|1\rangle|2\rangle$ por $|2\rangle|1\rangle$.



Figura A.7: A dupla ocupação desmonta-se para trás na rede.



Figura A.8: A dupla ocupação desmonta-se para frente na rede.



Figura A.9: Duas partículas em sítios vizinhos formam outra partícula a esquerda da rede.



Figura A.10: Duas partículas em sítios vizinhos formam outra partícula a direita da rede.

Para a segunda parte do capítulo 5, com duas leis de conservação, representaremos as partículas do tipo 1 ou tipo 2 em azul, mudando apenas o seu tamanho. Neste caso é mais simples, não haverá troca de partículas, apenas a troca da posição das mesmas devido a dinâmica imposta pelo Hamiltoniano. Ou seja, elas interagem com os sítios vazios, dadas pelos termos Γ_{01}^{10} , Γ_{02}^{00} , Γ_{20}^{02} , Γ_{20}^{02} , podendo mover-se para frente ou para trás na rede. Mas eventualmente elas podem trocar as posições entre si, devido aos termos $\Gamma_{12}^{21} \in \Gamma_{21}^{12}$. As figuras abaixo exemplificam tais interações.



Figura A.11: A partícula (tipo 1) move-se para frente na grade.



Figura A.12: A partícula (tipo 1) move-se para trás na grade.



Figura A.13: A partícula (tipo 2) move-se para frente na grade.



Figura A.14: A partícula (tipo 2) move-se para trás na grade.



Figura A.15: Troca de posição entre as pariculas na grade.



Figura A.16: Troca de posição entre as pariculas na grade.
Referências Bibliográficas

- [AABZ84] A. M. Polyakov A. A. Belavin and A. B. Zamolodchikov. Nucl. Phys. B241, 333, 1984.
- [AABZ86] A. M. Polyakov A. A. Belavin and A. B. Zamolodchikov. *Conformal Invariance* and Applications to Statistical Mechanics. Singapore: World Scientific, 1986.
 - [AC06] Ferreira A A and Alcaraz F C. Phys. Rev. E. 74 011115, 2006.
- [ADK10] Giovanni F Anastasia D, Stefano E and Nikos K. Introduction to Quantum Integrability. World Scientific, 2010.
- [ADPM98] Auerbach A Arovas D P and Haldane F D M. Phys. Rev. Lett. 60 531, 1998.
- [AFCV98] Dasmahapatra S Alcaraz F C and Rittenberg V. J. Phys. A: Math. Gen. **31** 845, 1998.
 - [AIH88] Lieb E Affleck I, kennedy T and Takashi H. Commun, Math. Phys 115 477, 1988.
 - [AKZ92] A. Schadschneider A. Kluemper and J. Zittarz. Z. Phys. B 87 281; 1993 Europhys. Lett. 24 293., 1992.
 - [AL04] Francisco C Alcaraz and Matheus J Lazo. Exact solutions of exactly integrable quantum chains by a matrix product ansatz. J. Phys. A: Math, 2004.
 - [B75] Sutherland B. Phys. Rev. B **12** 3795, 1975.
 - [B79a] Zamalodchikov A B. Sov. J. Nucl. Phys. 69 165, 1979.
 - [B79b] Zamalodchikov A B. Sov. J. Nucl. Phys. **120** 253, 1979.
 - [B88] Derrida B. Phys. Rep. **301** 65, 1988.
 - [B04] Sutherland B. Beautiful Models 70 Years of Exactly Solved Quantum Many-body Problems. World Scientific, 2004.
 - [Bax07] R. J. Baxter. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. Academic Press, 2007.

- [BDP93] V. Hakim B. Derrida, M. R. Evans and V. Pasquier. J. Phys. A: Math. Gen. 26 1493, 1993.
- [Bet31] H. A. Bethe. Z. Phys. 71, 205, 1931.
- [BM95a] Stinchcombe R B and Schütz G M. Phys. Rev. Lett. 75 140, 1995.
- [BM95b] Stinchcombe R B and Schütz G M. Europhys. Lett. 29 663, 1995.
 - [BV80] Zamalodchikov A B and Fateev V. Sov. J. Nucl. Phys. 32 298, 1980.
 - [CJ03] Alcaraz F C and Lazo M J. Braz. J. Phys. **33** 533, 2003.
- [CJ04a] Alcaraz F C and Lazo M J. J. Phys. A: Math. Gen. 37 L1, 2004.
- [CJ04b] Alcaraz F C and Lazo M J. J. Phys. A: Math. Gen. 37, 4149, 2004.
- [CJ06] Alcaraz F C and Lazo M J. J. Phys. A: Math. Gen. 39 11335, 2006.
- [CZ00a] Alcaraz F C and Bariev R Z. Braz. J. Phys **30** 13, 2000.
- [CZ00b] Alcaraz F C and Bariev R Z. Braz. J. Phys 30 655, 2000.
- [CZ01] Alcaraz F C and Bariev R Z. J. Phys. A: Math. Gen 34 L467, 2001.
- [DBV93] Hakim V Derrida B, Evans M R and Pasquier V. J. Phys. A: Math. Gen. **26** 1493, 1993.
 - [Der] B. Derrida. Physics Reports.
- [DPAH88] A. Auerbach D. P. Arovas and F. D. M. Haldane. Phys. Rev. Lett. 60 531, 1988.
- [EFHLK92] Korepin V E Essler F H L and Schoutens K. Phys. Rev. Lett. 68 2960, 1992.
- [EFHLK93] Korepin V E Essler F H L and Schoutens K. Phys. Rev. Lett. 70 73, 1993.
 - [EK94] F. H. L. Essler and V. E. Korepin. Exactly Solvable Models of Strongly Correlated Electrons. Singapore: World Scientific, 1994.
 - [EKSF80] L. A. Takhtajan E. K. Sklyanin and L. D. Faddeev. Theor. Math. Phys. 40 688, 1980.
 - [FCAR94] M. Henkel F. C. Alcaraz, M. Droz and V. Rittenberg. Ann. Phys. (N.Y.) 230 250, 1994.
 - [FCAR98] S. Dasmahapatra F. C. Alcaraz and V. Rittenberg. J. Phys. A: Math. Gen. 31 845, 1998.

- [FMF92] Nachtergaele B Fannes M and Werner R F. Commun, Math. Phys. 144 433, 1992.
 - [Fra11] Fabio Franchini. Notes on Bethe Ansatz Techniques. Via Bonomea 265, 34136, Trieste, Italy, 2011.
- [Gau83] M. Gaudin. La Fonction d'Onde de Bethe. Paris: Masson, 1983.
- [GE81] Izergin A G and Korepin V E. Commun. Math. Phys. 79 303, 1981.
- [HL81] Perk J H H and Schultz C L. Phys. Rev. Lett. A 84 407, 1981.
- [HY68] Lieb E H and Wu F Y. Phys. Rev. Lett. **20** 1445, 1968.
- [IAT88] E. H. Lieb I. Affleck, T. Kennedy and H. Tasaki. 'Commun. Math. Phys. 115 477, 1988.
 - [J07] Lazo M J. Physica A **374** 655, 2007.
- [Jim90] M. Jimbo. Yang Baxter Equation in Integrable Systems: Advanced Series in Mathematical Physics. Singapore: World Scientific, 1990.
- [KAJ92] Schadschneider A Klumper A and Zittartz J. Z. Phys. B. 87 281, 1992.
- [KM98] Michael Karbach and Gerhard Müller. Introduction to the Bethe Ansatz I. arXiv:cond-mat/9809162, 1998.
- [LDF87] L. A. Takhtajan L. D. Faddeev. Hamiltonian Methods in Soliton Theory. Springer, 1987.
- [Lig99] T. M. Ligget. Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter and Exclusion Process (Springer Verlag), 1999.
- [LM96] E. H. Lieb and D. C. Mattis. Mathematical Physics in One Dimension. New York-London: Academic Press, 1996.
- [Mat94] Daniel C Mattis. The Many-body Problems. World Scientific, 1994.
- [MFW92] B. Nachtergaele M. Fannes and R. F. Werner. *Commun. Math. Phys.* **144** 443, 1992.
 - [N68] Yang C N. Phys. Rev. Lett **19** 1312, 1968.
 - [P87] Schlottmann P. Phys. Rev. B 36 5177, 1987.
 - [PS02] V. Popkov and G. M. Schütz. Mat. Fiz. Anal. Geom. 9 401, 2002.

- [PVM02] Fouladvand M E Popkov V and Schütz G M. J. Phys. A: Math. Gen. 35 7187, 2002.
 - [PY81] Kulish P P and Reshetikhin N Yu. Sov. Phys-JETP 53 108, 1981.
 - [Rot66] L. M. Roth. Phys. Rev. **149** 306, 1966.
 - [Sch77] P. Schlottmann. Int. J. Mod. Physics B 11 355., 1977,.
 - [Sch00] G. M. Schütz. Phase Transitions and Critical Phenomena vol. 19, ed C. Domb and J. Lebowitz (London: Academic), 2000.
 - [SF78] E. K. Sklyanin and L. D. Faddeev. Sov. Phys. Dokl. 23 902, 1978.
 - [Skl82] E. K. Sklyanin. J. Sov. Math. 19 1546, 1982.
 - [SS95a] R. B. Stinchcombe and G. M. Schütz. Phys. Rev. Lett. 75 140, 1995.
 - [SS95b] R. B. Stinchcombe and G. M. Schütz. Europhys. Lett. 29 663, 1995.
 - [SW99] T. Sasamoto and M. Wadati. J. Phys. Soc. Japan 66 2618, 1999.
 - [Tak99] M. Takahashi. Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models. Cambridge University Press, 1999.
- [VEKB92] A. G. Izergin V. E. Korepin and N. M. Bogoliubov. Quantum Inverse Scattering Method, Correlation Functions and Algebraic Bethe Ansatz. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
 - [VPS] M. E. Fouladvand V. Popkov and G. M. Schütz. J. Phys. A: Math. Gen **35** 7187, year = 2002,.
 - [Wu68] Lieb & Wu. Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-band Model in one Dimension. Phys. Rev. Lett. 21, 192, 1968.
 - [Yan83] C. N. Yang. Selected Papers 1945-1980 with Commentary. New York: W. H. Freeman and Co., 1983.
 - [ZZ79] A. B. Zamolodchikov and Al. B. Zamolodchikov. Ann. Phys. NY **120** 253, 1979.