

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Escadas de Spin Integráveis*

Arlei Prestes Tonel

Tese realizada sob orientação da Dra. Angela Foerster e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Porto Alegre

Abril - 2003

* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

À minha família

Agradecimentos

★ À orientadora Angela Foerster, pela dedicação demonstrada e pelo estímulo constante oferecido e, acima de tudo, pela amizade durante este período.

★ Aos colaboradores: Jon Links, André L. Malvezzi, Xi-Wen Guan e Sílvio R. Dahmen que tiveram uma contribuição muito importante neste trabalho.

★ Aos meus pais: Seu Vitélio e Dona Palmira e irmãos: Elda, Nelson, Rosália, Roberto, Gilberto, Gilmar, Sirlei e Elizandro, pelo estímulo permanente.

★ Ao pessoal da sala M208, André, Alisson, Alan, Daniela, Evy, Guilherme, Henrique, Sandro, Márcia, Marcelo e Rodrigo pela convivência harmoniosa e agradável neste quatro anos.

★ Aos professores e funcionários do IF, que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

★ Aos colegas e companheiros Evy Salcedo e Henrique Marks pela assistência prestada na solução de problemas computacionais.

Muito Obrigado

Resumo

Neste trabalho definimos três modelos de escadas de spin integráveis novos que correspondem a variações de um modelo de escada de spin baseado na simetria $SU(4)$. Os modelos são exatamente solúveis através do método do ansatz de Bethe e as equações do ansatz de Bethe, os autovalores de energia e o gap de spin são derivados e propriedades físicas interessantes são discutidas.

Inicialmente apresentamos um modelo de escada de spin integrável que possui um parâmetro livre além do acoplamento ao longo dos degraus. Determinamos a dependência do parâmetro anisotrópico na transição de fase entre uma região com gap e outra sem gap. Nós também mostramos que o modelo é um caso especial de uma Hamiltoniana mais geral que possui três parâmetros livres. A susceptibilidade magnética em função da temperatura é obtida numericamente e sua dependência no parâmetro anisotrópico é determinada explicitamente. Uma comparação entre o gap de spin obtido através da curva de susceptibilidade magnética e aquele obtido das equações do ansatz de Bethe é feita e uma boa concordância encontrada. A conexão com alguns compostos é apresentada e mostramos que os nossos resultados ajustam bem a curva da susceptibilidade magnética dos compostos $KCuCl_3$, $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ e $(C_5H_{12}N)_2CuBr_4$.

A seguir nós propomos dois tipos diferentes de modelos integráveis com impurezas. Mostramos em ambos os casos que uma transição de fase entre uma região com gap e outra sem gap ocorre para um valor crítico do acoplamento ao longo dos degraus. Além disso, a dependência das impurezas na transição de fase é determinada explicitamente. Em um dos modelos o gap diminui com o aumento da intensidade da impureza Λ . E, fixando a intensidade de impureza Λ , é observada uma redução do gap com o aumento da concentração de impurezas. Este resultado está qualitativamente de acordo com resultados experimentais.

Abstract

In this work we introduce three new integrable spin ladder systems which are variations of the spin ladder model based on the $SU(4)$ symmetry. The models are exactly solvable by the Bethe ansatz method and the Bethe ansatz equations, the energy eigenvalues and the spin gap are obtained and interesting physical properties are discussed.

First we present an integrable anisotropic spin ladder model which possesses a free parameter besides the rung coupling. We determine the dependence of the anisotropy parameter on the phase transition between gapped and gapless spin excitations and present the phase diagram. We also show that the model is a special case of a more general Hamiltonian with three free parameters. The magnetic susceptibility as a function of the temperature is obtained numerically and its dependence on the anisotropy parameter is determined explicitly. A comparison between the spin gap obtained from the susceptibility curve and the one obtained from the Bethe Ansatz Equations is made and a good agreement found. A connection with some strong coupling compounds is presented and we show that our results fit the magnetic susceptibility of the $KCuCl_3$, $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ and $(C_5H_{12}N)_2CuBr_4$ compounds remarkably well.

Next two different types of integrable impurity spin ladder system are proposed. We show for both models that a phase transition between gapped and gapless spin excitations occurs at a critical value of the rung coupling. In addition, the dependence of the impurities on this phase transition is determined explicitly. In one of the models the spin gap decreases by increasing the impurity strength Λ . Moreover for a fixed Λ , a reduction of the spin gap by increasing the impurity concentration is also observed, in qualitative agreement with experimental results.

Índice

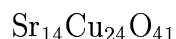
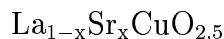
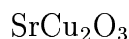
1. Introdução	1
2. Revisão sobre Escadas de Spin	9
2.1 Definição	10
2.2 Escada de Heisenberg com duas pernas	11
2.3 Susceptibilidade Magnética	14
2.4 Escada de Heisenberg com um número maior de pernas	18
2.5 Dopagem em Escadas de Spin	20
3. Modelo de Escada de Spin Anisotrópico	24
3.1 Introdução	25
3.2 Hamiltoniana	26
3.3 Solução exata	27
3.4 Gap de spin e diagrama de fase	28
3.5 Integrabilidade	31
3.6 Modelo multiparamétrico	35
3.7 Propriedades Termodinâmicas	37
3.8 Comparação com dados experimentais	41
3.8.1 KCuCl_3	43
3.8.2 $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$	44
3.8.3 $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$	44
4. Modelos Integráveis de Escadas de Spin com Impurezas	47
4.1 Introdução	48
4.2 Modelo de escada de spin com impurezas do tipo I	49
4.3 Modelo de escada de spin com impurezas do tipo II	55
5. Conclusões	61
5.1 Considerações finais	62

5.2	Perspectivas para o futuro	63
5.3	Trabalhos publicados/submetidos durante o período da tese	63
A.	Cálculo do gap para o modelo de escada de Heisenberg	65
B.	Método algébrico do ansatz de Bethe para o modelo multiparamétrico	70
B.1	Método algébrico do ansatz de Bethe	71
B.1.1	Primeiro nível	71
B.1.2	Segundo nível	73
B.1.3	Terceiro nível	75
B.2	Equações do ansatz de Bethe	77
B.3	Autovalores de energia	78
C.	Comparação entre a diagonalização exata e a solução das EAB para dois degraus	81
C.1	Diagonalização exata	81
C.2	Soluções das EAB	85
C.3	Comparação	85
D.	Transformação de similaridade	87
E.	Derivação da Hamiltoniana com impurezas no espaço dual	89
F.	Método Algébrico do Ansatz de Bethe para o modelo com impurezas	96
	Referências	108

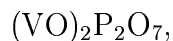
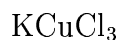
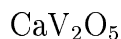
Capítulo 1

Introdução

Recentemente, o estudo de escadas de spin quânticas tem despertado grande interesse, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental, devido a sua possível conexão com a supercondutividade a altas temperaturas. De fato, diversos compostos com a estrutura de uma escada, como por exemplo alguns cupratos



e alguns compostos orgânicos



entre muitos outros (ver, por exemplo [1, 2, 3, 4, 5]) existem ou podem ser sintetizados em laboratórios [1]. Para ilustrar, apresentamos abaixo uma representação esquemática de dois compostos com a estrutura de escadas de duas e três pernas. Uma família destes compostos foi sintetizada por Hiroi, Azuma, Takano e Bando [3]. Na Fig.1.1 estão representados os planos de óxido de cobre para os dois primeiros elementos desta família: o primeiro representa o composto de duas pernas SrCu_2O_3 e o segundo representa o composto de três pernas $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$. Utilizando técnicas de espectroscopia os autores mostraram que nas escadas as ligações de 180° ($\text{Cu} - \text{O} - \text{Cu}$) fornecem um acoplamento forte entre os íons de cobre, enquanto que entre as escadas a ligação de 90° entre os íons de cobre é bem mais fraca, podendo a princípio ser desprezada [6].

Um fato surpreendente a respeito de todos os materiais do tipo escada é que eles apresentam um gap de spin no espectro das excitações elementares para compostos com um número par de pernas. Isto pode ser verificado experimentalmente utilizando diferentes técnicas, como por exemplo medidas de susceptibilidade magnética [2], de ressonância magnética nuclear [7] e espalhamento inelástico de nêutrons [8]. Para exemplificar, mostramos a seguir duas curvas típicas de susceptibilidade magnética versus temperatura obtidas para os compostos da Fig.1.1 [2]. Nas Fig.1.2 e 1.3, os círculos abertos (curva superior) correspondem aos resultados experimentais preliminares medidos com o equipamento SQUID (Superconducting Quantum Interference Device), enquanto os círculos fechados (curva inferior) representam

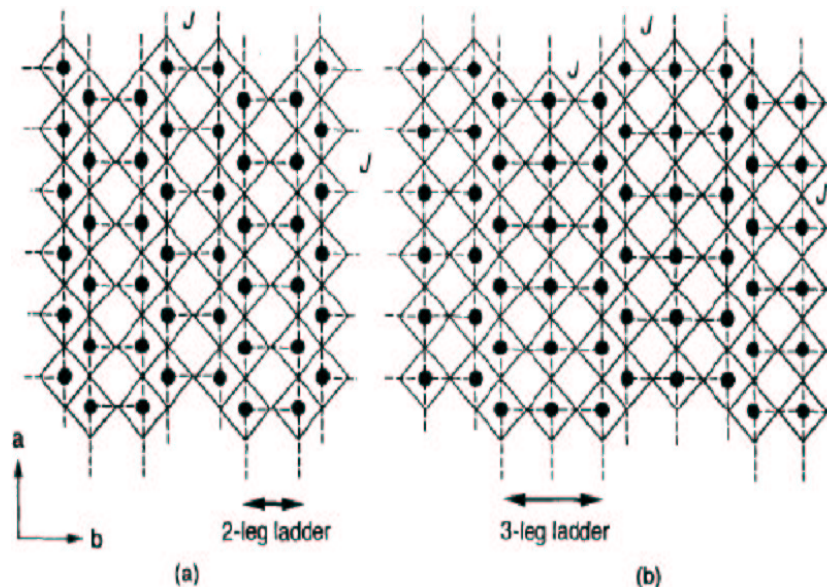


Fig. 1.1: representação esquemática dos planos de cobre e oxigênio para: a) o composto com duas pernas SrCu_2O_3 . b) o composto com três pernas $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$. Os círculos em negrito representam os íons de cobre, e os íons de oxigênio estão localizados nos vértices dos quadrados. Figura extraída do artigo de Azuma e outros [2].

estes dados após serem subtraídas impurezas do experimento e é, de fato, a curva utilizada pelos autores para o ajuste teórico [2]. Note que no primeiro (segundo) composto, a curva da susceptibilidade magnética apresenta um decaimento exponencial para zero (linear para uma constante) para baixas temperaturas, refletindo a presença (ausência) de um gap de spin. Curvas similares também foram obtidas para todos os outros compostos que apresentam esta estrutura de escadas. Presentemente é um fato bem estabelecido que escadas de spin com um número par de pernas apresentam um gap de spin enquanto aquelas com um número ímpar de pernas não apresentam. A única controvérsia que ainda persiste entre os diferentes grupos de pesquisa reside no tamanho exato do gap.

Sob dopagem, alguns destes materiais exibem propriedades supercondutoras verificadas, por exemplo, em curvas de resistividade [9]. Para ilustrar, mostramos abaixo na Fig. 1.4 o gráfico da resistividade elétrica versus temperatura para o composto $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$, que apresenta a estrutura de uma escada com duas pernas. Sob condições especiais de dopagem e pressão, pode-se verificar que a resistividade cai abruptamente a zero numa determinada temperatura crítica, indicativo de supercondutividade [10].

Do ponto de vista teórico, a existência do gap de spin também foi prevista para escadas com um número par de pernas, em completo acordo com os experimentos. Além disto, a

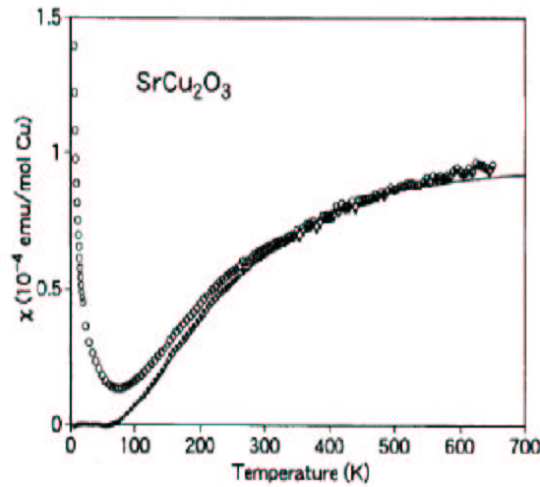


Fig. 1.2: susceptibilidade magnética χ versus temperatura T para o composto de duas pernas $SrCu_2O_3$. O decaimento exponencial de χ para baixas temperaturas indica a existência de um gap de spin, estimado em $0.5J_r$ [2].

teoria prevê também que sob dopagem, pode ocorrer um pareamento de lacunas (formação de “pares”), entre outros indicativos de supercondutividade.

Inicialmente, a maior parte, senão todas as previsões teóricas foram baseadas no modelo de escadas do tipo Heisenberg unidimensional (“modelo padrão das escadas de spin quânticas”), que consiste essencialmente em duas redes de Heisenberg colocadas juntas de forma a compor uma escada com uma interação do tipo Heisenberg entre elas, isto é

$$H = \frac{J_l}{4} \sum_{i=1}^L \{ \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} + \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_{i+1} \} + \frac{J_r}{4} \sum_{i=1}^L \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\tau}_i,$$

que pode ser representada diagramaticamente. Na Fig. 1.5 tem-se uma escada com duas pernas e “ L ” degraus. As matrizes $\vec{\sigma}$ e $\vec{\tau}$ correspondem as matrizes de Pauli usuais associadas a perna superior e inferior, respectivamente, enquanto J_l e J_r denotam o acoplamento ao longo das pernas e dos degraus, respectivamente. Para este modelo, apenas cálculos numéricos e perturbativos são possíveis. Por exemplo, quando $J_r > J_l$ (este é conhecido como o “limite de acoplamento forte”), teoria de perturbação pode ser aplicada. Finalmente, apesar do modelo em questão ser muito simples, não existe nenhum resultado analítico exato em geral. Assim, a fim de se ganhar experiência na área, diversos modelos de escadas generalizadas foram introduzidos, como por exemplo em [11, 12, 13].

Uma outra possibilidade que surgiu recentemente foi a de investigar modelos de escada exatamente solúveis. Tradicionalmente, apesar do método algébrico do ansatz de Bethe

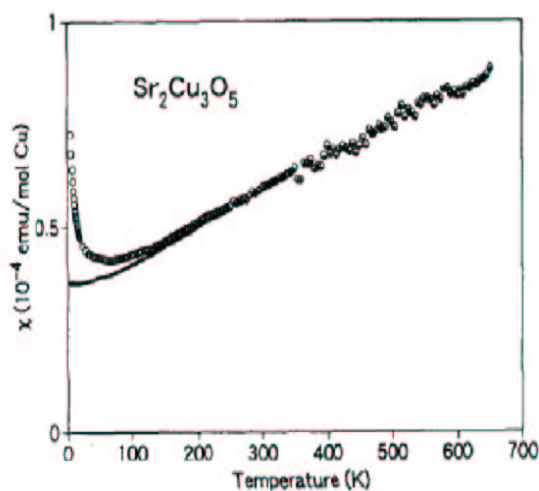


Fig. 1.3: susceptibilidade magnética χ versus temperatura T para o composto de três pernas $Sr_2Cu_3O_5$. O comportamento linear de χ para baixas temperaturas indica a ausência de um gap de spin e também de um estado fundamental não-magnético [2].

¹ poder ser aplicado apenas para o estudo de sistemas unidimensionais, nos últimos anos tornou-se aparente que existem várias possibilidades de generalizar estes métodos para estudar modelos de escadas de spin de uma forma não perturbativa. Originalmente isto foi feito em [14, 15] utilizando a estrutura de co-álgebra de uma álgebra de Hopf. Essencialmente, um mapeamento da co-álgebra permite que um modelo unidimensional seja mapeado em cópias múltiplas através de homomorfismo da álgebra. Assim sendo, as propriedades algébricas são preservadas e, conseqüentemente a integrabilidade do modelo é mantida, permitindo uma análise destes modelos através de métodos conhecidos. Subseqüentemente, um ponto de vista alternativo foi adotado, onde a extensão do sistema unidimensional para o de escadas é acomodado através de uma extensão da simetria do sistema. Este método foi empregado por Wang, que introduziu um modelo de escadas de spin baseado na álgebra $SU(4)$, obtido através da generalização da simetria $SU(2)$ de uma rede de Heisenberg unidimensional [16]. Outros modelos de escadas de spin integráveis também foram analisados neste contexto [13, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23].

¹ ver as referências: SKLYANIN, E.K. Quantum Inverse Scattering Method, in selected topics in Quantum Groups and Integrable Systems, Nankai Lectures on Math. Phys., Ed. M.L.Ge (World Scientific, Singapore, 1991) p.63.

KOREPIN, V., BOGOLIUBOV, N. M., IZERGIN, A.G. Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions (Cambridge University Press, 1993).

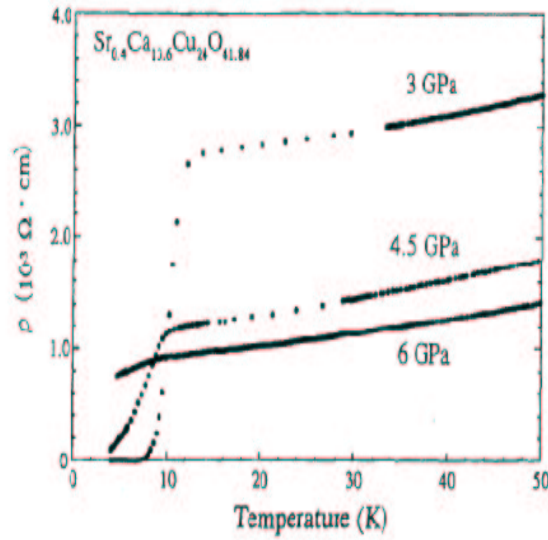


Fig. 1.4: resistividade ρ versus temperatura T para o composto de duas pernas $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ com dopagem $x = 13.6$ e sob diferentes pressões: 3, 4.5 e 6 GPa [10].

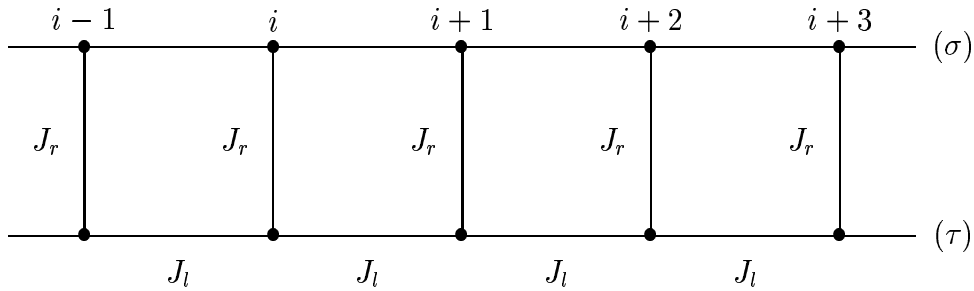


Fig. 1.5: Representação esquemática de uma escada de spin com duas pernas. Os acoplamentos ao longo dos degraus J_r e das pernas J_l são apresentados.

Em todos os casos citados acima, nenhum dos modelos apresenta parâmetros livres, devido as condições estritas impostas pela integrabilidade. Entretanto, é de se esperar que a introdução de parâmetros livres torne o diagrama de fase dos modelos mais rico, bem como facilite o ajuste de curvas experimentais.

Um dos objetivos desta tese é o de preencher esta lacuna e definir um novo modelo

de escada de spin anisotrópico integrável (com um parâmetro livre). Pode-se considerar a situação aqui, a nível de escadas, análoga a generalização em uma dimensão da rede de Heisenberg XXX para sua versão anisotrópica XXZ . Vamos mostrar que este modelo é exatamente solúvel pelo método algébrico do ansatz de Bethe e que ele exibe uma transição de fase entre uma fase com gap e outra sem gap, que depende da anisotropia. Outra quantidade que também depende da anisotropia é a susceptibilidade magnética, cuja curva obtida em função da temperatura ajusta muito bem dados experimentais dos seguintes compostos do tipo escada $KCuCl_3$, $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ e $(C_5H_{12}N)_2CuBr_4$. Pelo nosso conhecimento este é o primeiro exemplo em que um modelo de escada integrável é utilizado para ajustar curvas experimentais.

Um outro aspecto importante a ser considerado é o de incorporar impurezas em escadas de spin. O efeito de impurezas nas cadeias de spin e nos sistemas de elétrons fortemente correlacionados é bem conhecido, particularmente nos casos de baixa dimensionalidade. Do ponto de vista teórico o estudo de impurezas em sistemas integráveis é de grande importância, já que nestes sistemas é possível incorporar impurezas sem destruir a integrabilidade. Em princípio, isto pode ser feito através de dois métodos: no primeiro, as impurezas são introduzidas através de uma mudança da representação da estrutura da álgebra de Yang-Baxter para alguns sítios da rede, isto é, nestes sítios é feita uma substituição da representação fundamental (aquela dada pela matriz R original) para uma outra representação. Este método já foi aplicado em diversos modelos unidimensionais, como o modelo de Heisenberg e o $t - J$ [24, 25, 26, 27, 31]. No segundo método as impurezas são introduzidas através da colocação de inomogeneidades na matriz de transferência do sistema. Este procedimento já foi utilizado em vários sistemas unidimensionais, como discutido nas referências [28, 29, 30]. Entretanto, um estudo similar para as escadas de spin ainda é inexistente. Para suprir esta falta adaptaremos estes dois métodos conhecidos em uma dimensão para incorporar impurezas nas escadas de spin. Um dos objetivos é investigar o efeito das impurezas nas escadas de spin integráveis. Em particular, construiremos dois modelos integráveis de escadas de spin com impurezas baseados na álgebra $SU(4)$. Vamos investigar o efeito das impurezas no diagrama de fase e no gap dos sistemas. Em particular, em um dos casos vamos mostrar que ocorre uma diminuição do gap com o aumento da concentração de impurezas, em acordo qualitativo com os experimentos.

A tese está organizada da seguinte forma: No capítulo 2, faremos uma revisão das escadas de spin em geral, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. No capítulo 3 vamos definir um modelo de escada de spin $1/2$ integrável anisotrópico que possui um parâmetro livre além dos acoplamentos ao longo das pernas e dos degraus. Uma análise do efeito deste parâmetro no gap, no diagrama de fases e nas propriedades termodinâmicas do modelo será

apresentada. Mostraremos que é possível fazer a conexão com resultados experimentais via curvas de susceptibilidade magnética para alguns compostos. Finalmente, mostraremos que o nosso modelo pode ser obtido a partir de um modelo mais geral que possui três parâmetros livres além dos acoplamentos ao longo das pernas e dos degraus (modelo construído a partir das álgebras de Hopf multiparamétricas de Reshetikin [32]). No capítulo 4 iremos definir dois modelos de escadas de spin integráveis com impurezas. Em particular, vamos estudar qual a influência das impurezas sobre o gap, e ainda derivar e analisar os correspondentes diagramas de fases. Os resultados obtidos nos capítulos 3 e 4 são originais e constituem a principal contribuição do autor para a área de Sistemas Integráveis. O capítulo 5 é reservado para as conclusões e as perspectivas futuras.

Capítulo 2

Revisão sobre Escadas de Spin

2.1 Definição

Uma escada de spin pode ser formada através do acoplamento de um número finito de redes unidimensionais. Estes sistemas são ditos sistemas quase-bidimensionais, já que por construção o número de degraus é muito maior que o número de pernas. Neste sentido, existem dois tipos diferentes de acoplamentos: um ao longo das pernas, e outro ao longo dos degraus. Para ilustrar, abaixo é apresentada uma representação diagramática de uma escada de spin com três pernas;

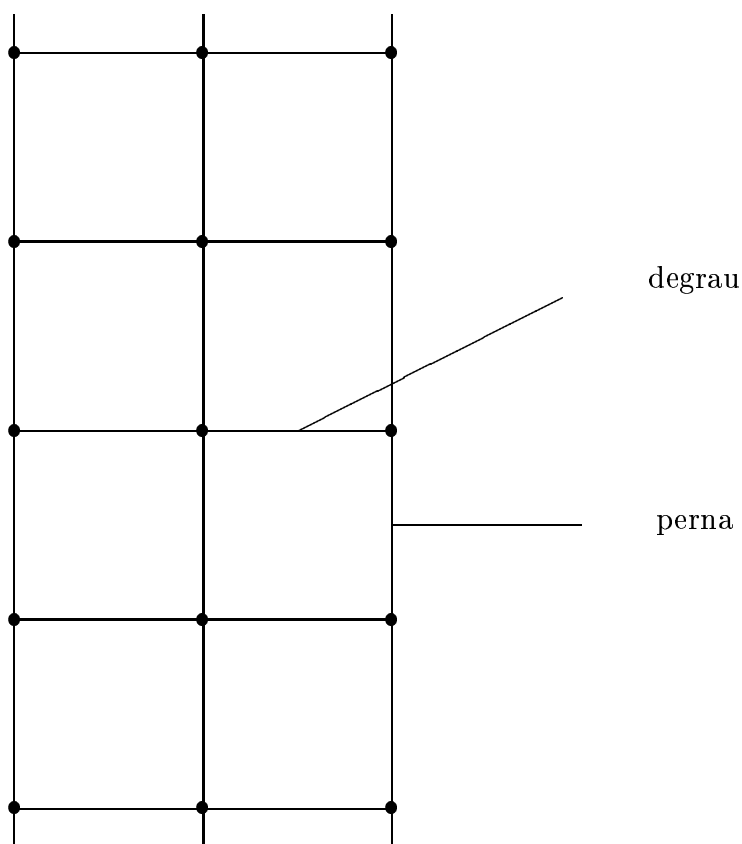


Fig. 2.1: Representação diagramática de uma escada de spin com três pernas e cinco degraus.

Estes sistemas, que interpolam entre uma e duas dimensões, apresentam propriedades físicas muito interessantes (ver nas próximas seções), além de serem bem mais fáceis de se manipular do que os modelos bidimensionais.

A denominação “escada de spin” teve origem no caso particular de um sistema com duas pernas, cuja estrutura geométrica assemelha-se a uma escada comum. Posteriormente, esta designação foi adotada também para o caso mais geral de escadas com um número maior de pernas.

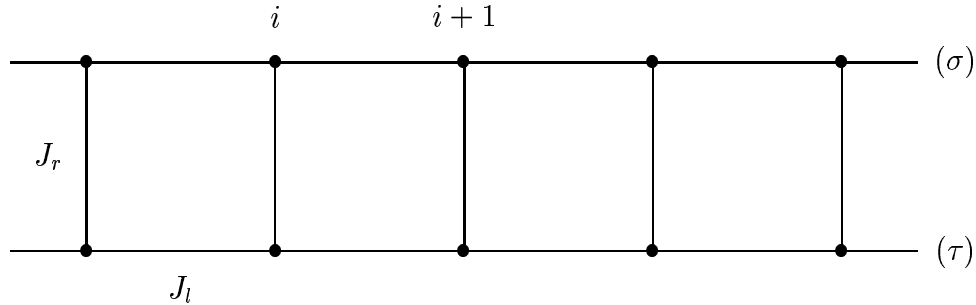


Fig. 2.2: representação diagramática para uma escada de Heisenberg com duas pernas.

Vamos iniciar revisando o caso mais simples, que é o modelo de escada de Heisenberg de spin 1/2 com duas pernas, também conhecido como modelo padrão de escadas.

2.2 Escada de Heisenberg com duas pernas

Este modelo de escadas é o mais simples, pois nele somente aparecem interações do tipo de Heisenberg entre as pernas e entre os degraus. E além disso as interações são apenas entre os vizinhos mais próximos. Este modelo é descrito pela seguinte Hamiltoniana

$$H = \frac{J_l}{4} \sum_{i=1}^L \{ \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} + \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_{i+1} \} + \frac{J_r}{4} \sum_{i=1}^L \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\tau}_i \quad (2.1)$$

onde $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ e $\vec{\tau}_i = (\tau_i^x, \tau_i^y, \tau_i^z)$ são as matrizes de Pauli usuais

$$\sigma^x = \tau^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \tau^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad e \quad \sigma^z = \tau^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

atuando no sítio “ i ” da perna superior e inferior, respectivamente. Os parâmetros J_r e J_l denotam o acoplamento nos degraus e nas pernas, respectivamente. O comprimento da escada é L e condições de contorno periódicas ($L + 1 = 1$) serão impostas. Na Fig. 2.2 apresentamos uma representação diagramática para esta escada

Apesar de simples, a Hamiltoniana descrita acima não é integrável, ou seja, não podemos obter sua solução exatamente. Entretanto é possível estudá-la em alguns limites, onde diversas propriedades físicas podem ser obtidas.

No limite $J_r = 0$ a escada de spin se desacopla em duas redes de Heisenberg unidimensionais independentes. E, neste caso, é um fato bem estabelecido que a rede de Heisenberg

unidimensional de spin 1/2 não apresenta um gap de spin no limite termodinâmico.

Um outro limite de interesse, conhecido como acoplamento forte, é quando os degressos da rede interagem muito fracamente uns com os outros isto é, $J_r \gg J_l$. Neste caso surge um parâmetro muito pequeno ($J_l/J_r \ll 1$) que permite que possamos aplicar teoria de perturbações no problema. No **Apêndice A** revisamos alguns cálculos de teoria de perturbações do tipo Rayleigh-Schrödinger para a escada de Heisenberg realizados por Troyer, Tsunetsugu e Würtz [33]. Mostramos, em linhas gerais, que o gap obtido em primeira ordem de perturbação é

$$\Delta = E_1^{(1)} - E_0^{(1)} \sim J_r - J_l + \mathcal{O}\left(\frac{J_l^2}{J_r}\right). \quad (2.3)$$

Note que o gap tem um tamanho consideravelmente grande, já que $J_r \gg J_l$ no limite de acoplamento forte. Acima, $E_1^{(1)}$ é a energia em primeira ordem do primeiro estado excitado que tem spin total igual a 1 ($S = 1$) e $E_0^{(1)}$ é a energia do estado fundamental que tem spin total igual a zero ($S = 0$). O gap é uma quantidade de energia necessária e suficiente para destruir um singleto (inverter um spin para cima) do estado fundamental e transformá-lo em uma excitação de spin 1.

O cálculo do gap em ordens superiores, usando teoria de perturbações, foi feito por Cabra, Honecker e Pujol [34] e tem como resultado

$$\Delta = J_r - J_l + \frac{J_l^2}{2J_r} + \frac{J_l^3}{4J_r^2} - \frac{J_l^4}{8J_r^3} + \mathcal{O}\left(\frac{J_l^5}{J_r^4}\right).$$

Até o momento, discutimos apenas o limite em que a escada se desacopla em duas redes unidimensionais e o limite de forte acoplamento. Entretanto, para analisar outras regiões em geral é necessário utilizar métodos numéricos precisos. Basicamente, quatro métodos diferentes são freqüentemente utilizados para isto. Dois deles, o Método de Monte Carlo Quântico (MMCQ) e o Método da Matriz de Transferência Quântico (MMTQ), trabalham com temperaturas finitas. Os outros dois, Método da Diagonalização Exata (MDE) e o Método da Matriz Densidade do Grupo de Renormalização (MMDGR), trabalham com temperatura zero.

Os MMCQ e MMTQ [35, 36, 37, 38] são ambos baseados na decomposição de Trotter-Suzuki da função de partição [39]. Aqui um sistema quântico com dimensão (d) é mapeado num sistema clássico com $(d + 1)$ dimensões. Para sistemas quase bidimensionais, como as escadas de spin, a função de partição pode ser obtida pelo MMTQ [35, 36, 37, 38]. Este método é muito poderoso, já que ele permite calcular como as quantidades termodinâmicas dependem da temperatura, bem como os comprimentos de correlação para sistemas infinitos. Este método pode também ser combinado com o MDE (normalmente Método de Lanczos)

[40, 41] para calcular mais precisamente os autovalores extremos e autovetores. Isto permite calcular todas as quantidades termodinâmicas com maior grau de precisão.

No MMCQ [37] a função de partição é calculada por amostragem estatística do correspondente sistema clássico. Este método pode ser usado em qualquer dimensão, para sistemas com mais de 100 sítios, e temperaturas mais baixas se comparado com MMTQ. Entretanto, os resultados aqui não são tão precisos quanto no MMTQ, devido a erros estatísticos de amostragem.

O MDE (Método de Lanczos)¹ é o método que tem a maior precisão à temperatura zero. Ele pode ser usado para obter o estado fundamental e as primeiras excitações elementares para sistemas pequenos (em torno de 10^8 estados) com alta precisão. O MDE pode também ser usado para calcular propriedades termodinâmicas à temperatura finita. Este cálculo, porém, exige que se conheça boa parte, ou às vezes todo o espectro de energia do sistema. Em contrapartida, o MMTQ necessita somente alguns autovalores extremos da matriz de transferência.

O MMDGR é outro método usado a temperatura zero. Ele pode ser usado para calcular o estado fundamental e os primeiros estados excitados para sistemas grandes (em torno de 100 sítios). Este método funciona excepcionalmente bem para sistemas unidimensionais, mas ele pode ser adaptado para sistemas com maiores dimensões, onde é mais difícil de se obterem resultados precisos.

Utilizando estes métodos é possível determinar o gap para qualquer escolha dos acoplamentos J_l e J_r . Para ilustrar, vamos apresentar na Fig.2.3 os resultados obtidos por Barnes, Dagotto, Riera e Swanson [42] utilizando o MMCQ. A Fig.2.3 mostra que não existe gap quando $J_r = 0$, isto é, no limite em que a escada se desacopla em duas redes unidimensionais. A medida que a interação entre as pernas é ligada ($J_r > 0$) surge um gap. Este resultado é conhecido como conjectura de Barnes [31]. Na região onde $J_l = J_r$ o gap calculado é de aproximadamente $0.5J_r$. Utilizando o MMDGR, White e Noack [43] estimaram um gap de $0.5037J_r$, muito próximo do resultado obtido por Barnes e outros [31].

A presença de um gap nas escadas de spin indica que estas estruturas são fortes candidatas a explicar a supercondutividade, uma vez que a existência do gap é condição necessária (mas não suficiente) para que a supercondutividade a altas temperaturas ocorra sob dopagem.

¹ CULLUN, J. K.; WILLOUGHBY, M. H. Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalues computations. Boston, Birkhäuser-Verlag, 1985.

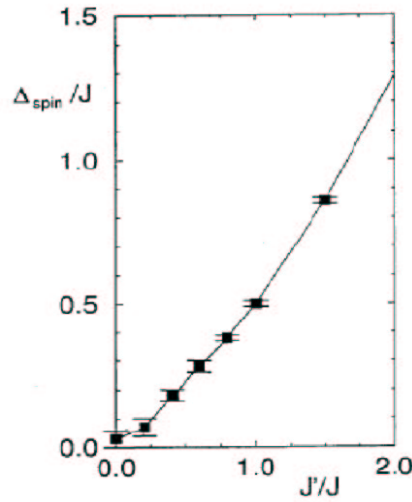


Fig. 2.3: Δ/J_l versus J_r/J_l . Gráfico extraído do artigo de Barnes e outros [42]. Cálculo numérico usando MMCQ para uma rede com 2×32 sítios.

2.3 Susceptibilidade Magnética

A susceptibilidade magnética nos mostra como um composto magnético responde à ação de um campo magnético externo. Esta resposta ao campo externo pode ser medida em laboratório usando um equipamento chamado SQUID (Superconducting Quantum Interference Device) [9, 44].

Neste contexto, cálculos teóricos têm como objetivo encontrar o comportamento para a susceptibilidade magnética que possa ser comparado com os resultados experimentais. O objetivo desta seção é mostrar que utilizando o modelo de escada de spin de Heisenberg, obtém-se as seguintes expressões para a susceptibilidade magnética:

- baixas temperatura ($T \ll \Delta$): Lei de Troyer

$$\chi \propto \frac{e^{-\Delta/T}}{\sqrt{T}} \quad (2.4)$$

- altas temperaturas ($T \gg \Delta$): Lei de Curie

$$\chi \propto \frac{1}{T}. \quad (2.5)$$

Estes resultados foram obtidos por Troyer, Tsunetsugu e Würtz em [33], e no que segue iremos reproduzir os cálculos apresentados neste artigo.

A escada de spin de Heisenberg, na presença de um campo magnético externo (h) na direção z , é dada pela Hamiltoniana

$$H = \frac{J_l}{4} \sum_{i=1}^L \{\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} + \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_{i+1}\} + \frac{J_r}{4} \sum_{i=1}^L \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\tau}_i - \frac{h}{2} \sum_{i=1}^L \{\sigma_i^z + \tau_i^z\} \quad (2.6)$$

Vamos começar estudando esta Hamiltoniana no limite de acoplamento forte extremo ($J_l = 0$), quando não existem interações entre os degraus. Neste caso, os degraus são independentes e podem ser vistos como sendo redes de Heisenberg unidimensionais com 2 sítios, cuja Hamiltoniana local é dada por

$$H_i = \frac{J_r}{4} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\tau}_i - \frac{h}{2} \{\sigma_i^z + \tau_i^z\} \quad (2.7)$$

onde i representa um dos degraus da escada. A solução para esta Hamiltoniana local é:

energias	autovetores	
$-\frac{3}{4}J_r$	$ \Psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$	
$\frac{1}{4}J_r - h$	$ \Psi_1\rangle = \uparrow\uparrow\rangle$	(2.8)
$\frac{1}{4}J_r$	$ \Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$	
$\frac{1}{4}J_r + h$	$ \Psi_3\rangle = \downarrow\downarrow\rangle$	

Na ausência de campo externo o vetor $|\Psi_0\rangle$ corresponde ao singleto e os outros três ao tripleto. A presença do campo magnético externo faz com que a energia degenerada do tripleto seja quebrada (sofre efeito Zeeman). Como estamos interessados em determinar uma propriedade termodinâmica do sistema precisamos inicialmente calcular a função de partição local Z_i , que é definida como

$$Z_i = \sum_{conf} e^{-\beta E_i} \quad (2.9)$$

onde E_i são toda as configurações de energia sobre um dos degraus e $\beta = 1/T$, onde T é a temperatura do sistema. Substituindo essas energias (2.8) em (2.9) e fazendo algumas manipulações encontramos

$$Z_i = e^{\frac{3\beta J_r}{4}} + e^{\frac{-\beta J_r}{4} + \beta h} + e^{\frac{-\beta J_r}{4}} + e^{\frac{-\beta J_r}{4} - \beta h}$$

que se reduz a

$$\bar{Z}_i = Z_i e^{-\frac{3}{4}\beta J_r} = 1 + (1 + 2 \cosh(\beta h)) e^{-\beta h} \quad (2.10)$$

onde Δ é o gap, que aqui é proporcional a diferença de energia entre o tripleto e o singleto. Como os degraus da escada são independentes, a função de partição total é dada por

$$Z_T = \prod_{i=1}^L \bar{Z}_i \quad (2.11)$$

ou seja

$$Z_T = \{1 + (1 + 2\cosh(\beta h))e^{-\beta\Delta}\}^L. \quad (2.12)$$

Note que toda a contribuição de energia aparece na função exponencial acima. Para determinar a susceptibilidade magnética precisamos antes da magnetização, que para a escada é definida como

$$M = \frac{1}{L} \left\langle \sum_{i=1}^L (\sigma_i^z + \tau_i^z) \right\rangle \quad (2.13)$$

onde

$$\langle \sigma_i^z \rangle = \frac{\sum_{conf.} \sigma_i^z e^{-\beta E_i}}{\sum_{conf.} e^{-\beta E_i}}$$

e

$$\left\langle \sum_{i=1}^L (\sigma_i^z + \tau_i^z) \right\rangle = 2L \langle \sigma_i^z \rangle.$$

A susceptibilidade magnética a campo zero é definida como

$$\chi = \frac{\partial}{\partial h} M|_0 = \frac{1}{2L\beta} \frac{\partial^2}{\partial h^2} \ln(Z_T)|_0. \quad (2.14)$$

Calculando a derivada acima encontramos

$$\chi = \frac{\beta e^{-\beta\Delta}}{1 + 3e^{-\beta\Delta}}, \quad (2.15)$$

que nos limites de baixa e alta temperatura originam a Lei de Troyer (2.4) e a Lei de Curie (2.5), respectivamente.

Para determinar como a susceptibilidade magnética se comporta quando os degraus começam a interagir, generaliza-se a função de partição total (2.12) agora para [33]

$$Z_T = \{1 + (1 + 2\cosh(\beta h))f(\beta)\}^L \quad (2.16)$$

onde

$$f(\beta) = \frac{1}{L} \sum_k e^{-\beta E_k} \quad (2.17)$$

é uma função de partição quase local, que já leva em conta as interações ao longo dos degraus e das pernas [33].

Assim a susceptibilidade magnética passa a ser escrita

$$\chi = \beta \frac{f(\beta)}{1 + 3f(\beta)}. \quad (2.18)$$

O somatório pode ser substituído por

$$\sum_k \rightarrow \frac{L}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk$$

e então temos

$$f(\beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta E_k} dk. \quad (2.19)$$

Para efetuar a integração acima necessitamos saber qual é a forma aproximada da energia E_k . Levando-se em conta que uma banda de mágnons tem uma relação de dispersão quadrática, a energia pode ser escrita, aproximadamente como [33]

$$E_k = \Delta(J_r, J_l) + a||k| - \pi|^2.$$

Δ é o gap que depende dos acoplamentos J_l e J_r , a é uma constante e k é o vetor de onda. Com isso podemos fazer a integração em (2.19), obtendo como resultado

$$f(\beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \sqrt{T} e^{-\frac{\Delta}{T}} \quad (2.20)$$

que pode ser substituído em (2.18) fornecendo a expressão final para a susceptibilidade. Assim para baixas temperaturas ($T \ll \Delta$), a susceptibilidade magnética tende a zero de acordo com a Lei de Troyer (2.4)

$$\chi = C \frac{e^{-\frac{\Delta}{T}}}{\sqrt{T}}, \quad (2.21)$$

onde C é uma constante. Manipulando a equação acima, temos

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(\chi) = \Delta - \frac{1}{2}T.$$

O significado desta equação pode ser melhor compreendido pelo seguinte gráfico extraído do artigo de Troyer, Tsunetsugu e Würtz [33]. O gráfico (2.4) compara o comportamento totalmente distinto entre redes unidimensionais de spin 1/2 (redes XY e Heisenberg) e uma escada de Heisenberg com diferentes acoplamentos. Quando $T \rightarrow 0$ o gap para as redes unidimensionais desaparece, enquanto que para a escada de spin o gap permanece finito, variando com os acoplamentos.

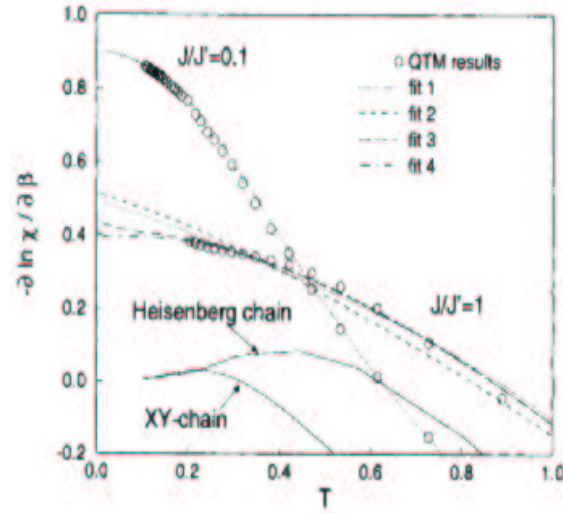


Fig. 2.4: O gráfico mostra a variação logarítmica da susceptibilidade em função da temperatura para as redes unidimensionais XY e de Heisenberg e para a escada de spin de Heisenberg. Para a escada de spin, o método usado para obter a curva foi o MMTQ com 2×12 sítios [33].

Para altas temperatura ($T \gg \Delta$), a susceptibilidade magnética vai a zero de acordo com a Lei de Curie

$$\chi = \frac{C_1}{T} \quad (2.22)$$

onde C_1 é uma constante de proporcionalidade.

2.4 Escada de Heisenberg com um número maior de pernas

Pode-se formar também escadas de Heisenberg com mais de duas pernas. Neste caso, do ponto de vista teórico, a verificação do gap e o comportamento da susceptibilidade magnética em geral são possíveis somente através de cálculos numéricos. É um fato bem estabelecido que escadas de Heisenberg com um número par de pernas apresentam um gap de energia, enquanto que as com um número ímpar de pernas não exibem um gap [11].

Esta constatação interessante foi feita por Rice, Gopalan e Sigrist [6] juntamente com Reigrotzki, Tsunetsugu e Rice[45]. Basicamente estes autores mostraram que todas as escadas com número ímpar de pernas podem ser mapeadas numa rede unidimensional com

uma constante de acoplamento efetiva que tem como característica a não existência de um gap. Do mesmo modo, as escadas com número par de pernas podem ser mapeadas numa escada de duas pernas, exibindo desta forma um gap.

Apresentamos a seguir alguns gráficos que ilustram claramente a diferença drástica entre escadas com um número par e ímpar de pernas. O gráfico 2.5 representa o gap (Δ) contra o

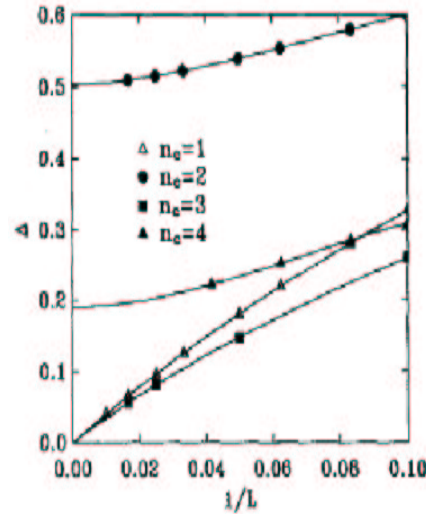


Fig. 2.5: O gráfico mostra o comportamento do gap Δ , no limite termodinâmico, para escadas de spin com diferentes números de pernas ($n_0 = 1, 2, 3, 4$) usando o MMDGR para redes com até $L = 100$ sítios. Gráfico extraído do artigo de Write e Noack [43]. De cima para baixo $L = 2, 4, 3, 1$.

inverso do comprimento da escada ($1/L$) para escadas com uma, duas, três e quatro pernas. Pode-se verificar facilmente que para as escadas com um número par de pernas (ímpar) o gap permanece finito (se anula) no limite termodinâmico $1/L \rightarrow 0$. Além disso, à medida que o número de pernas aumenta, no caso par, o gap diminui: por exemplo para duas pernas tem-se $\Delta \sim 0,5$ e para quatro pernas $\Delta \sim 0,19$. Esta redução do gap é esperada, pois à medida que o número de pernas da escada de spin aumenta, o modelo aproxima-se cada vez mais de uma rede quadrada bidimensional, onde é bem conhecido que não existe gap [1, 11].

O cálculo da susceptibilidade magnética para escadas de spin com um número maior de pernas só é possível através de métodos numéricos. Em particular, usando MMCQ, Frischmuth, Ammon e Troyer[46], calcularam a curva da susceptibilidade magnética em função da temperatura para uma escada de spin de Heisenberg com até seis pernas e 100 graus. Este resultado está mostrado na Fig.2.6. Podemos ver que para baixas temperaturas existe uma

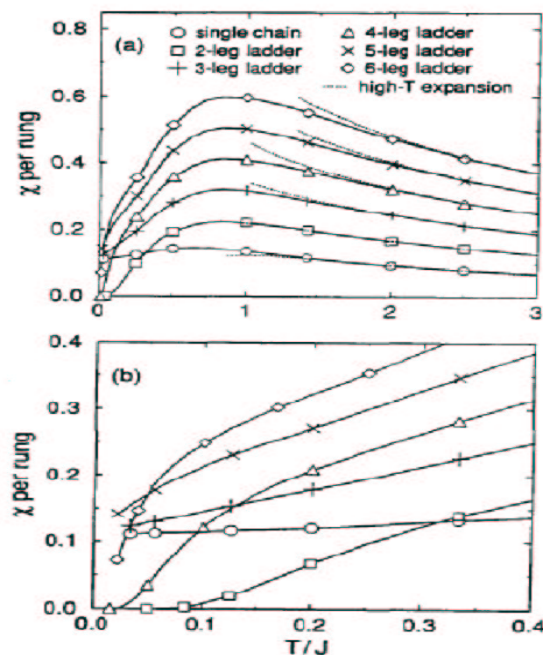


Fig. 2.6: O gráfico mostra o comportamento da susceptibilidade magnética versus a temperatura para escadas de spin com até seis pernas para: a) altas temperaturas, b) baixas temperaturas.

diferença drástica entre escadas com um número par e ímpar de pernas: para os números pares de pernas, a susceptibilidade magnética cai exponencialmente para zero, enquanto que para números ímpares, a susceptibilidade magnética vai para uma constante.

2.5 Dopagem em Escadas de Spin

Uma das propriedades mais interessante de alguns compostos com estrutura de escada é sua tendência para a supercondutividade a altas temperaturas críticas sob dopagem.

Do ponto de vista experimental, um dos primeiros compostos estudados neste contexto foi $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{2.5}$, que tem a estrutura de uma escada com duas pernas. A curva da susceptibilidade magnética medida em laboratório por Hiroi e outros [47] aponta a existência de um gap de spin. Entretanto um estudo sistemático do composto para diferentes dopagens mostrou que este não apresenta propriedades supercondutoras, como podemos verificar através do gráfico da resistividade elétrica apresentado na Fig.2.7. Note que o composto, apesar de não exibir propriedades supercondutoras, exibe uma transição de fase metal-isolante a partir de uma dopagem de aproximadamente $x \sim 0.20$.

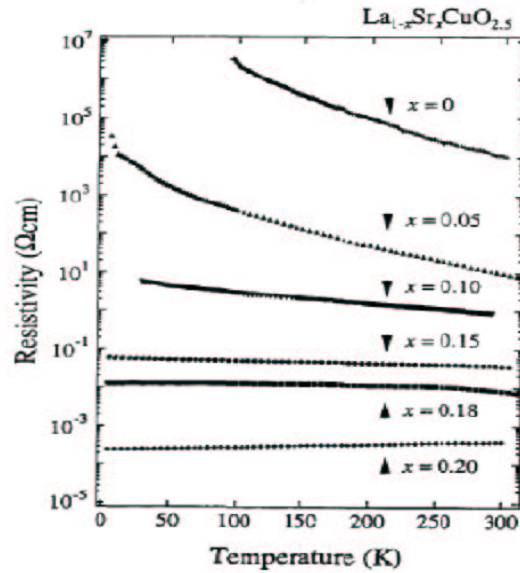


Fig. 2.7: resistividade versus temperatura para o composto $La_{1-x}Sr_xCuO_{2.5}$ a diferentes dopagens [47].

Posteriormente, um outro composto importante que também apresenta a estrutura de uma escada com duas pernas e que admite dopagem é o $Sr_{14-x}Ca_xCu_{24}O_{41}$. Resultados experimentais utilizando técnicas de ressonância magnética nuclear e técnicas de espalhamento inelástico de nêutrons, indicam a presença de um gap. Além disso, um estudo sistemático da resistividade elétrica sob condições especiais de dopagem e pressão mostra que ocorre uma queda abrupta da resistividade para uma certa temperatura crítica, indicativo de supercondutividade. Estes resultados podem ser vistos na Fig. 2.8 extraída do artigo de Uehara e outros [10]. Este resultado é extremamente importante, pois pela primeira vez um composto com estrutura de uma escada de spin exibe propriedades supercondutoras.

Do ponto de vista teórico, uma análise da dopagem em escadas de spin pode ser feita através da introdução de lacunas (remoção de spins ou destruição de um singlete). Para ilustrar, vamos reproduzir os argumentos de Dagotto [1, 3] e considerar o limite de forte acoplamento ($J_r \gg J_l$) para uma escada do tipo Heisenberg com duas pernas. Inicialmente vamos supor que o sistema encontra-se no estado fundamental, como é mostrado na Fig.2.9a.

Para introduzir uma lacuna ou remover um spin, precisamos destruir um singlete. Para isto, é necessário adicionar uma certa quantidade de energia. Quando esta operação é realizada, o outro spin pertencente ao singlete torna-se livre e então aparecem perturbações que se propagam ao longo da escada. Para adicionar uma segunda lacuna, num degrau diferente, será necessário adicionar uma quantidade maior de energia para destruir um segundo

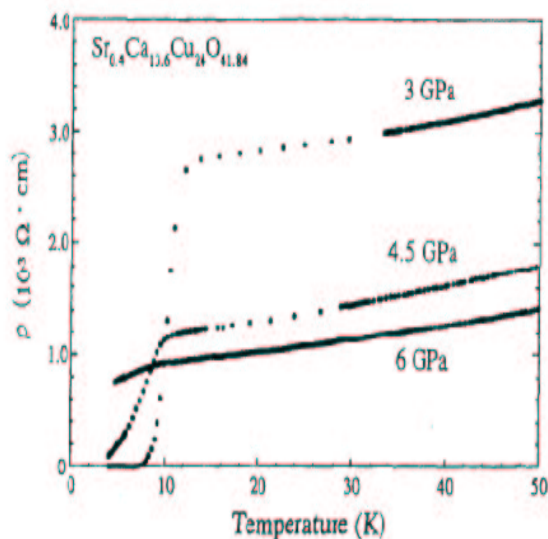


Fig. 2.8: resistividade versus temperatura para o composto $Sr_{14-x}Ca_xCu_{24}O_{41}$ com dopagem $x = 13.6$ e sob pressão de 3, 4.5 e 6 GPa, mostrando propriedades supercondutoras [10].

singleto. Veja que no limite de forte acoplamento, os degraus da rede são considerados como independentes. Uma representação esquemática pode ser vista na Fig. 2.9b. Entretanto, se as duas lacunas são adjacentes (pertencem ao mesmo degrau), o número de singletos destruídos é reduzido de dois para um e portanto, menos energia é necessária para que isto ocorra.

Cálculos numéricos mostram que, em geral, o estado em que duas lacunas compartilham o mesmo degrau possuem, de fato a menor energia do sistema. Esta idéia leva naturalmente ao conceito de pares de lacunas na escada de spin como está mostrado na Fig. 2.9c. Um dos modelos teóricos que prevê a existência de lacunas movendo-se ao longo da escada corresponde ao modelo de escada do tipo $t - J$, proposto por Dagotto, Riera e Scalapino [49].

É importante observar que os resultados teóricos a respeito de dopagem em escadas de spin são ainda muito preliminares. Questões importantes como “Como saber se um composto com duas pernas irá ou não apresentar propriedades supercondutoras?” ainda não foram esclarecidas. Mas sem dúvida, os modelos de escadas de spin são excelentes candidatos para explicar as propriedades supercondutoras e muito trabalho nesta área precisa ainda ser feito.

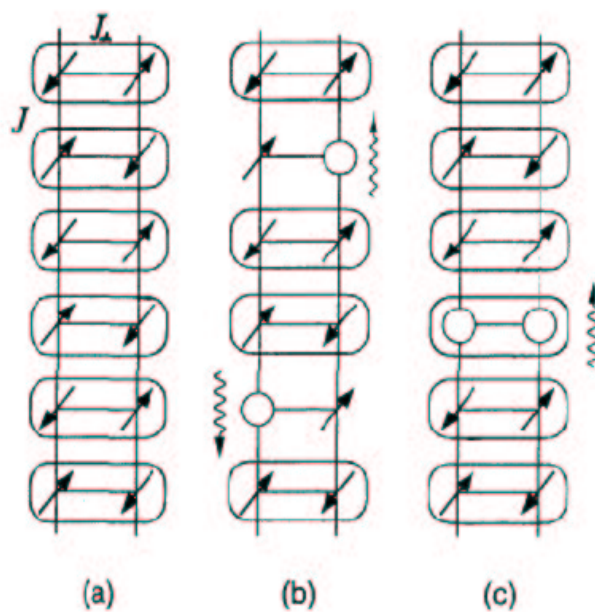


Fig. 2.9: a) estado fundamental para um modelo de spins: composto por singletos ao longo dos degraus. b) modelo sob dopagem com duas lacunas. c) estado fundamental para um modelo sob dopagem: duas lacunas compartilhando o mesmo degrau [1, 3].

Capítulo 3

Modelo de Escada de Spin Anisotrópico

3.1 Introdução

No capítulo anterior foi feita uma revisão sobre as escadas de spin em geral e vimos que os principais resultados teóricos somente podem ser obtidos usando-se cálculos numéricos ou então, em limites especiais, teoria de perturbações. O objetivo deste capítulo é definir e investigar uma escada de spin anisotrópica que possa ser resolvida exatamente.

Historicamente, um dos primeiros modelos exatamente solúveis de muitos corpos foi a rede unidimensional de spin $1/2$ conhecida como modelo de Heisenberg isotrópico. Este modelo tem uma grande importância dentro do magnetismo, pois pela primeira vez tentou-se modelar as interações magnéticas que surgem nos sólidos. A técnica utilizada para diagonalizar o sistema, baseada na equação de Schrödinger, foi o método do ansatz de Bethe coordenado formulado por Hans Bethe em 1931 [50]. Posteriormente, este modelo foi formulado e resolvido através de uma técnica mais matemática, o ansatz de Bethe algébrico, que permite também fazer um estudo sistemático das propriedades algébricas do modelo, bem como de calcular as funções de correlação em alguns casos [51]. Para este modelo, sabe-se que as excitações elementares não possuem um gap de spin.

Com a descoberta da supercondutividade a altas temperaturas críticas nos óxidos de cobre (os cupratos) [52], um esforço muito grande tem sido feito para entender a física que está por trás deste fenômeno. Na ausência de dopagem estes compostos são razoavelmente bem aproximados pelo modelo de Heisenberg [11, 53], ou então por alguma generalização que descreve uma interação do tipo troca de spin. Entretanto, é um fato bem estabelecido que o modelo de Heisenberg não apresenta gap no espectro das excitações elementares, tanto em uma como em duas dimensões. Por outro lado, nestas estruturas, a existência de um gap de spin é essencial para que a supercondutividade ocorra sob dopagem. Assim, com a introdução de modelos de escadas de spin esta aparente contradição é resolvida, já que as escadas de spin permitem a formação de estados singletos ao longo dos degraus e que são responsáveis pela formação do gap de spin. Porém, como mostramos no capítulo anterior, o modelo de escadas de Heisenberg não pode ser resolvido exatamente.

No intuito de obter novos resultados teóricos para sistemas de escadas de spin muitos autores estão considerando modelos de escadas de spin generalizados, que incorporam termos de interação adicionais que garantam a integrabilidade. Assim vários modelos de escadas de spin integráveis que exibem propriedades físicas de interesse têm sido formulados [5, 17, 18, 19, 20, 21, 23, 54, 55, 56, 57, 58]. Em todos os casos citados, nenhum modelo apresenta parâmetros livres e isto se deve a estrita condição da integrabilidade. Também em nenhum destes casos foram feitas comparações diretas com curvas experimentais.

A proposta deste capítulo é apresentar um modelo de escada de spin anisotrópico in-

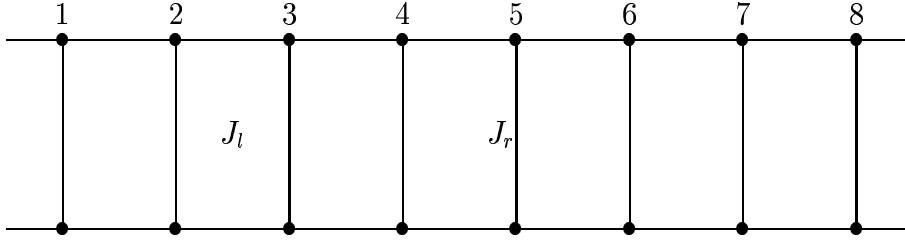


Fig. 3.1: A figura representa uma escada de spin com 8 degraus, onde as constantes de acoplamento são mostradas: J_r ao longo dos degraus e J_l ao longo das pernas.

tegrável (com um parâmetro livre). Vamos mostrar que este modelo é exatamente solúvel pelo método do ansatz de Bethe e que uma escolha apropriada do parâmetro anisotrópico reproduz o modelo de escada baseado na simetria $SU(4)$ [16]. O gap e o diagrama de fase do modelo serão determinados. Além disso, a curva da susceptibilidade magnética versus a temperatura para o modelo será obtida, permitindo uma determinação alternativa para o gap. Também vamos mostrar que o nosso modelo ajusta bem as curvas de susceptibilidade experimentais de alguns compostos do tipo escada como $KCuCl_3$, $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ e $(C_5H_{12}N)_2CuBr_4$. Finalmente, vamos mostrar que este modelo anisotrópico é um caso particular de um modelo mais geral que apresenta três parâmetros livres, além dos acoplamentos ao longo dos degraus e das pernas.

3.2 Hamiltoniana

Começaremos introduzindo uma escada de spin anisotrópica, cuja Hamiltoniana é dada por

$$H = \sum_{j=1}^L \left[J_l h_{j,j+1} + \frac{1}{2} J_r (\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\tau}_j - 1) \right] \quad (3.1)$$

onde

$$\begin{aligned} h_{j,j+1} &= \frac{1}{4} (1 + \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z) (1 + \tau_j^z \tau_{j+1}^z) + (\sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+) (\tau_j^+ \tau_{j+1}^- + \tau_j^- \tau_{j+1}^+) \\ &+ \frac{1}{2} (1 + \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z) (t^{-1} \tau_j^+ \tau_{j+1}^- + t \tau_j^- \tau_{j+1}^+) + \frac{1}{2} (t^{-1} \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + t \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+) (1 + \tau_j^z \tau_{j+1}^z) \end{aligned}$$

e, esquematicamente pode ser representada pela Fig.3.1. Acima $\vec{\sigma}_j$ e $\vec{\tau}_j$ são as matrizes de Pauli atuando sobre o sítio j da perna superior e inferior, respectivamente, J_l e J_r denotam o acoplamento nas pernas (e também nas plaquetas) e nos degraus, respectivamente e t é um parâmetro livre que representa uma anisotropia nas interações. O número de degraus

ou equivalentemente, o comprimento da escada é L e condições de contorno periódicas ($L + 1 = 1$) serão impostas. Sem perda de generalidade vamos considerar $J_l = 1$ e $J_r > 0$.

Tomando o limite $t \rightarrow 1$ a eq. (3.1) acima reduz-se a

$$H^{Wang} = \frac{J_l}{4} \sum_{j=1}^L (1 + \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1}) (1 + \vec{\tau}_j \cdot \vec{\tau}_{j+1}) + \frac{J_r}{2} \sum_{j=1}^L (\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\tau}_{j+1} - 1). \quad (3.2)$$

Esta Hamiltoniana foi introduzida por Wang [16] (ver também [59]) e corresponde ao modelo de escadas de spin mais simples na literatura que pode ser resolvido exatamente. O modelo introduzido (3.1) pode ser considerado como uma versão anisotrópica do modelo (3.2). A situação aqui, a nível de escadas, é muito similar a generalização da rede quântica de Heisenberg XXX para sua versão anisotrópica XXZ no caso unidimensional.

Este modelo é baseado na simetria $SU(4)$ e pode ser resolvido por técnicas de Bethe ansatz. Note que a Hamiltoniana (3.1) é invariante frente a troca $\vec{\sigma}_j \leftrightarrow \vec{\tau}_j$. Entretanto, sob reflexão de spin ($\sigma^\pm \leftrightarrow \sigma^\mp$), a Hamiltoniana é invariante frente a troca $t \leftrightarrow t^{-1}$.

3.3 Solução exata

Os autovalores de energia da Hamiltoniana anisotrópica (3.1) são dados por (detalhes deste cálculo podem ser encontrados no **Apêndice B**)

$$E = - \sum_{j=1}^{M_1} \left(\frac{1}{\lambda_j^2 + 1/4} - 2J_r \right) + (1 - 2J_r) L, \quad (3.3)$$

onde λ_j são soluções das equações do ansatz de Bethe (EAB) (3.4) apresentadas abaixo. As EAB surgem da solução exata do modelo através do método algébrico do ansatz de Bethe com três níveis, e são dadas por

$$\begin{aligned} t^{(L-2M_3)} \left(\frac{\lambda_j - i/2}{\lambda_j + i/2} \right)^L &= \prod_{l \neq j}^{M_1} \frac{\lambda_j - \lambda_l - i}{\lambda_j - \lambda_l + i} \prod_{\alpha=1}^{M_2} \frac{\lambda_j - \mu_\alpha + i/2}{\lambda_j - \mu_\alpha - i/2} \\ t^{(L-2M_3)} \prod_{\beta \neq \alpha}^{M_2} \frac{\mu_\alpha - \mu_\beta - i}{\mu_\alpha - \mu_\beta + i} &= \prod_{j=1}^{M_1} \frac{\mu_\alpha - \lambda_j - i/2}{\mu_\alpha - \lambda_j + i/2} \prod_{\delta=1}^{M_3} \frac{\mu_\alpha - \nu_\delta - i/2}{\mu_\alpha - \nu_\delta + i/2} \\ t^{(L+2M_2-2M_1)} \prod_{\gamma \neq \delta}^{M_3} \frac{\nu_\delta - \nu_\gamma - i}{\nu_\delta - \nu_\gamma + i} &= \prod_{\alpha=1}^{M_2} \frac{\nu_\delta - \mu_\alpha - i/2}{\nu_\delta - \mu_\alpha + i/2}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Acima tem-se um conjunto de três equações acopladas, sendo que cada possível solução $\{\lambda_j, j = 1 \dots M_1; \mu_\alpha, \alpha = 1 \dots M_2; \nu_\delta, \delta = 1 \dots M_3\}$ parametriza um autovetor do modelo. M_1, M_2 e M_3 serão definidos na **seção 3.6**. Os cálculos em detalhes da obtenção destas equações podem ser encontrados no **Apêndice B**.

É importante observar que apesar do parâmetro anisotrópico t não aparecer explicitamente na expressão da energia (3.3), as soluções $\{\lambda_j\}$ das equações do ansatz de Bethe podem depender deste parâmetro, como vamos ilustrar mais adiante.

3.4 Gap de spin e diagrama de fase

Com a finalidade de entender um pouco mais o modelo proposto, vamos iniciar considerando o caso de dois degraus ($L = 2$). Posteriormente analisaremos o caso mais geral. A diagonalização exata para a Hamiltoniana (3.1) de dois degraus fornece os seguintes autovalores de energia

$$\begin{aligned}
 E_0 &= 2 - 4J_r & (1*) \\
 E_1 &= -2J_r - (t + 1/t) & (2*) \\
 E_2 &= -2J_r + (t + 1/t) & (2*) \\
 E_3 &= (t + 1/t) & (2*) \\
 E_4 &= -(t + 1/t) & (2*) \\
 E_5 &= -2J_r + 2 & (1*) \\
 E_6 &= -2J_r - 2 & (1*) \\
 E_7 &= 2 & (4*) \\
 E_8 &= -2 & (1*)
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

Acima, o número entre parênteses denota a multiplicidade do autovalor de energia. Para ilustrar vamos plotar estas energias em função de J_r para diferentes valores de t como mostrado na Fig.3.2. Nós podemos verificar nestes gráficos que existe essencialmente uma competição entre E_0 e E_1 para se tornar o estado fundamental do sistema. Além disso, existe sempre uma região onde a energia E_0 , cujo autovetor corresponde ao produto tensorial de singletos nos degraus da escada (ver **Apêndice C**), é o estado fundamental do sistema.

De fato, uma análise direta das energias acima indica que para $J_r > 1 + (t + 1/t)/2$, com t real e positivo, E_0 é o estado fundamental do sistema e E_1 a energia do primeiro estado excitado. Tendo estas energias, nós podemos facilmente encontrar o gap de spin do modelo, dado por

$$\Delta \equiv E_1 - E_0 = 2 \left(J_r - 1 - \frac{1}{2} \left(t + \frac{1}{t} \right) \right). \tag{3.7}$$

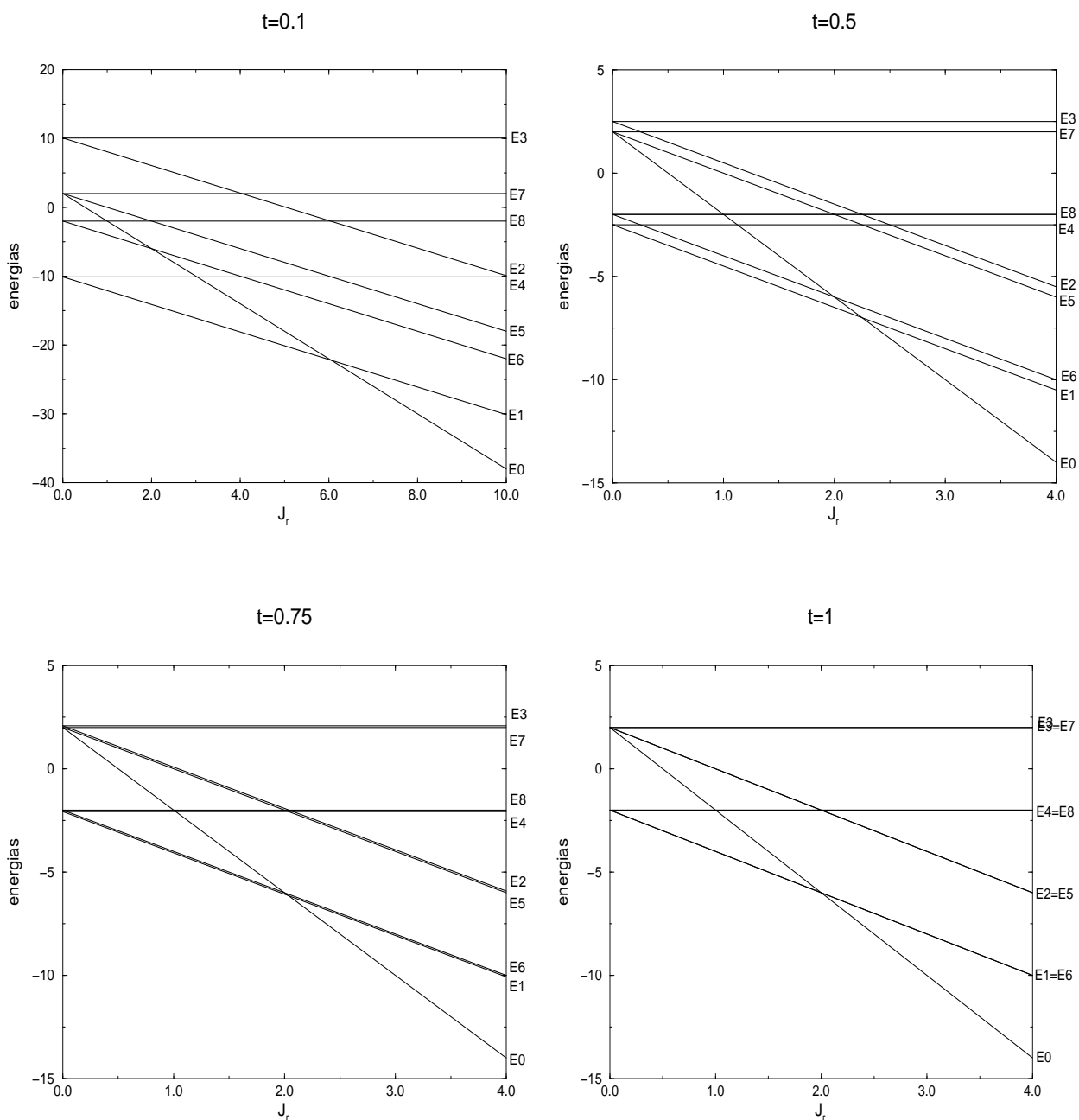


Fig. 3.2: Autovalores de energia versus o acoplamento ao longo do degrau J_r para diferentes valores do parâmetro anisotrópico t .

A seguir efetuamos a diagonalização exata da Hamiltoniana (3.1) para um número maior de degraus $L = 4, 6, 8$, e encontramos, em todos os casos, que o estado fundamental continua sendo dado pelo produto de singletos nos degraus e que o gap continua sendo dado pela expressão acima (3.7).

Para L degraus em geral, temos que resolver as EAB. Encontramos que o estado fundamental continua sendo o produto de singletos para $J_r > 1 + \frac{1}{2}(t + \frac{1}{t})$ e a energia correspondente é $E_0 = (1 - 2J_r)L$. Este é, de fato o estado de referência usado no cálculo do ansatz de Bethe e corresponde ao caso $\{M_1 = M_2 = M_3 = 0\}$ na equação do ansatz de Bethe (3.4) e na expressão para energia (3.3). Para descrever uma excitação elementar de spin 1, nós tomamos $\{M_1 = 1$ e $M_2 = M_3 = 0\}$ na equação (3.4), o que nos leva a uma solução imaginária para a variável λ (supondo L par)

$$\lambda = \frac{it - 1}{2t + 1}, \quad (3.8)$$

resultando na seguinte energia para o primeiro estado excitado $E_1 = -2 - (t + 1/t) + 2J_r + (1 - 2J_r)L$. Desta forma, o gap de spin pode ser facilmente calculado, e obtemos

$$\Delta \equiv E_1 - E_0 = 2\left(J_r - 1 - \frac{1}{2}\left(t + \frac{1}{t}\right)\right). \quad (3.9)$$

Note que o gap independe do número de degraus L , permanecendo o mesmo no limite termodinâmico. Outra propriedade importante é que o gap depende explicitamente da anisotropia t . No limite $t \rightarrow 1$ recuperamos o gap $\Delta = 2(J_r - 2)$ do modelo isotrópico [16]. O gap de spin Δ , que pode ser determinado através da solução das EAB (3.9) do nosso modelo, também é uma quantidade que pode ser extraída a partir de dados experimentais, como por exemplo da curva de susceptibilidade magnética de cada composto.

No gráfico 3.3 mostramos a dependência do gap de spin em função do acoplamento no degrau J_r para diferentes valores do parâmetro t . Como podemos observar no gráfico 3.3, o mesmo valor do gap de spin pode ser obtido através de diferentes escolhas de J_r e t . Note que apesar de diferentes escolhas de (J_r, t) levarem ao mesmo valor para o gap, isto não significa que estas escolhas tenham as mesmas propriedades físicas. Para ilustrar, vamos mostrar que mantendo o valor do gap fixo e variando-se os valores de J_r e t , obtemos diferentes resultados para a curva de susceptibilidade magnética. Estes resultados aparecem plotados na Fig.3.4. Note no gráfico que para baixas temperaturas os resultados são praticamente os mesmos (o gap é o mesmo). Entretanto, para outras temperaturas as curvas não coincidem mais. Maiores detalhes sobre este tópico serão discutidos na seção 3.7 que irá tratar das propriedades termodinâmicas do nosso modelo.

Fazendo-se $\Delta = 0$ na eq.(3.9) para J_r nós encontramos o valor crítico $J_r^c = 1 + \frac{1}{2}(t + \frac{1}{t})$,

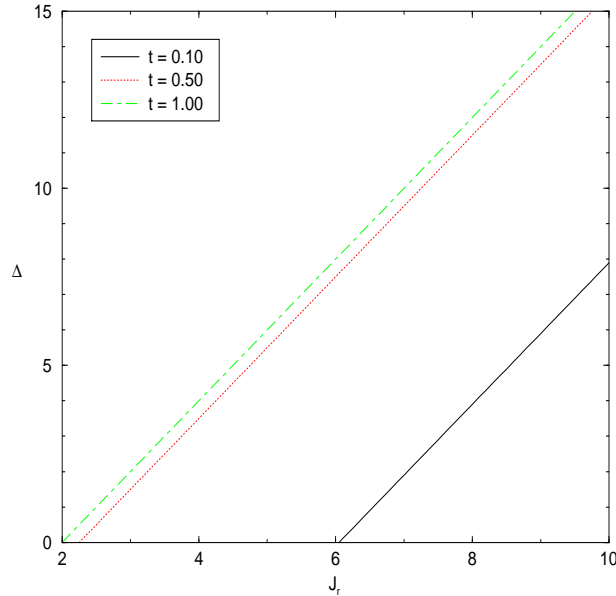


Fig. 3.3: *Gap de spin Δ versus o acoplamento J_r para diferentes valores do parâmetro anisotrópico t .*

indicando uma linha crítica que separa uma região com gap de outra sem gap, como está mostrado na Fig. 3.5 .

Este diagrama de fase na Fig. 3.5 passa a ter uma forma bem mais simples após uma reparametrização conveniente. Introduzindo um novo parâmetro K , dado por $K = (t + 1/t)/2 \geq 1$, teremos o diagrama de fase representado agora em termos de K e J_r como mostrado na Fig.3.6. A linha de transição de fase é agora uma linha reta dada por $J_r = 1 + K$. Como mencionamos anteriormente na região $J_r > 1 + K$ o espectro de energia tem um gap e o estado fundamental é o produto de singletos (um em cada degrau).

3.5 Integrabilidade

A integrabilidade deste modelo pode ser mostrada usando o fato que a Hamiltoniana (3.1) pode ser mapeada para a Hamiltoniana abaixo (3.10), que se origina a partir de uma matriz R que obedece a álgebra de Yang-Baxter para $J_r = 0$, enquanto que para $J_r \neq 0$ o termo do degrau tem a forma de um potencial químico.

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^L \left[\hat{h}_{j,j+1} - 2J_r X_j^{00} \right] \quad (3.10)$$

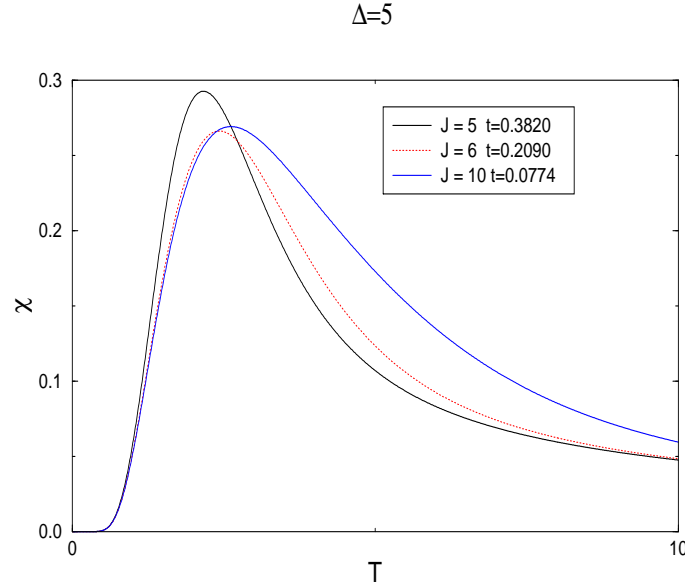


Fig. 3.4: *Susceptibilidade magnética versus temperatura para diferentes valores do acoplamento J_r e do parâmetro anisotrópico t . Apesar do gap de spin ser o mesmo nos três casos, as curvas da susceptibilidade no limite termodinâmico são diferentes.*

onde

$$\begin{aligned} \hat{h}_{j,j+1} &= \sum_{\alpha=0}^3 X_j^{\alpha\alpha} X_{j+1}^{\alpha\alpha} + X_j^{20} X_{j+1}^{02} + X_j^{02} X_{j+1}^{20} + X_j^{13} X_{j+1}^{31} + X_j^{31} X_{j+1}^{13} \\ &+ t \left(X_j^{10} X_{j+1}^{01} + X_j^{12} X_{j+1}^{21} + X_j^{03} X_{j+1}^{30} + X_j^{23} X_{j+1}^{32} \right) \\ &+ t^{-1} \left(X_j^{01} X_{j+1}^{10} + X_j^{21} X_{j+1}^{12} + X_j^{30} X_{j+1}^{03} + X_j^{32} X_{j+1}^{23} \right). \end{aligned}$$

Acima $X_j^{\alpha\beta} \equiv |\alpha_j \rangle \langle \beta_j|$ são os operadores de Hubbard usuais que obedecem a condição de ortogonalidade $\langle \alpha_i | \beta_j \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}$.

As Hamiltonianas locais (3.1) e (3.10) estão relacionadas através da transformação de similaridade discutida no **Apêndice D**. Note que, em termos destes novos operadores, torna-se evidente que o termo de degrau tem a forma diagonal e comuta com o restante da Hamiltoniana $\hat{h}_{j,j+1}$. Portanto, este termo não contribui para as equações do ansatz de Bethe e sua contribuição para a energia é muito simples (ver **Apêndice B**).

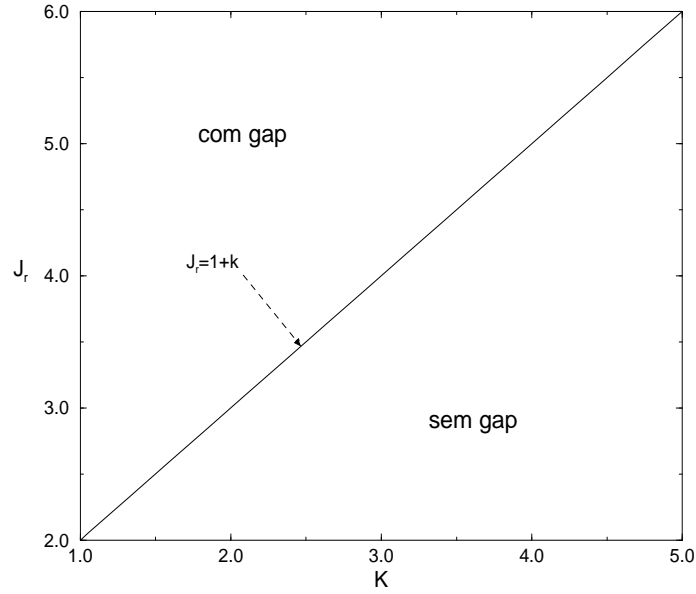


Fig. 3.6: Acoplamento J_r versus o novo parâmetro de reparametrização K . Este gráfico mostra a reparametrização da curva $J_r = 1 + (t + 1/t)/2$ em termos $K = (t + 1/t)/2$. Nesta parametrização a linha de transição de fase é uma reta.

cujos elementos, em termos do parâmetro espectral x , são dados por

$$a = x + 1, \quad b = x, \quad c = 1,$$

e obedece a álgebra de Yang-Baxter

$$R_{12}(x - y)R_{13}(x)R_{23}(y) = R_{23}(y)R_{13}(x)R_{12}(x - y), \quad (3.12)$$

origina a Hamiltoniana (3.10) para $J_r = 0$ através do procedimento padrão do ansatz de Bethe (ver as referências : SKLYANIN, E.K. Quantum Inverse Scattering Method, in selected topics in Quantum Groups and Integrable Systems, Nankai Lectures on Math. Phys., Ed. M.L.Ge (World Scientific, Singapore, 1991) p.63.; KOREPIN, V., BOGOLIUBOV, N. M., IZERGIN, A.G. Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions (Cambridge University Press, 1993))

$$\hat{h}_{j,j+1} = P_{j,j+1} \cdot \frac{d}{dx} R_{j,j+1}(x)|_{x=0}.$$

Acima $P_{j,j+1}$ é o operador permutador.

3.6 Modelo multiparamétrico

Este modelo que acabamos de estudar acima é um caso particular de um modelo mais geral que apresenta três parâmetros livres (t_1, t_2, t_3) ¹ cuja Hamiltoniana é dada por

$$H^g = \sum_{j=1}^L \left[h_{j,j+1}^g + \frac{1}{2} J_r (\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\tau}_j - 1) \right] \quad (3.13)$$

onde

$$\begin{aligned} h_{j,j+1}^g &= \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- \left[\frac{t_1^{-1}}{4} (1 + \tau_j^z)(1 + \tau_{j+1}^z) + \frac{t_2}{4} (1 - \tau_j^z)(1 - \tau_{j+1}^z) + t_3 \tau_j^+ \tau_{j+1}^- + \tau_j^- \tau_{j+1}^+ \right] \\ &+ \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ \left[\frac{t_1}{4} (1 + \tau_j^z)(1 + \tau_{j+1}^z) + \frac{t_2^{-1}}{4} (1 - \tau_j^z)(1 - \tau_{j+1}^z) + \tau_j^+ \tau_{j+1}^- + t_3^{-1} \tau_j^- \tau_{j+1}^+ \right] \\ &+ \frac{1}{4} (1 + \sigma_j^z)(1 + \sigma_{j+1}^z) \left[\frac{1}{2} (1 + \tau_j^z \tau_{j+1}^z) + t_1^{-1} \tau_j^+ \tau_{j+1}^- + t_1 \tau_j^- \tau_{j+1}^+ \right] \\ &+ \frac{1}{4} (1 - \sigma_j^z)(1 - \sigma_{j+1}^z) \left[\frac{1}{2} (1 + \tau_j^z \tau_{j+1}^z) + t_2 \tau_j^+ \tau_{j+1}^- + t_2^{-1} \tau_j^- \tau_{j+1}^+ \right]. \end{aligned}$$

A Hamiltoniana acima (3.13) reduz-se ao modelo anisotrópico (3.1) para a escolha: $t_1 = 1/t_2 \equiv t, t_3 = 1$. Assim como no caso anterior esta Hamiltoniana (3.13) pode ser mapeada para (ver **Apêndice D** eq.(D.1))

$$\hat{H}^g = \sum_{j=1}^L \left[\hat{h}_{j,j+1}^g - 2J_r X_j^{00} \right] \quad (3.14)$$

onde

$$\begin{aligned} \hat{h}_{j,j+1}^g &= \sum_{\alpha=0}^3 X_j^{\alpha\alpha} X_{j+1}^{\alpha\alpha} + X_j^{20} X_{j+1}^{02} + X_j^{02} X_{j+1}^{20} \\ &+ t_1 \left(X_j^{10} X_{j+1}^{01} + X_j^{12} X_{j+1}^{21} \right) + t_2 \left(X_j^{30} X_{j+1}^{03} + X_j^{32} X_{j+1}^{23} \right) + t_3 X_j^{31} X_{j+1}^{13} \\ &+ t_1^{-1} \left(X_j^{01} X_{j+1}^{10} + X_j^{21} X_{j+1}^{12} \right) + t_2^{-1} \left(X_j^{03} X_{j+1}^{30} + X_j^{23} X_{j+1}^{32} \right) + t_3^{-1} X_j^{13} X_{j+1}^{31}. \end{aligned}$$

Também aqui o termo do degrau comuta com o restante da Hamiltoniana, que pode ser derivado a partir de uma matriz R com três parâmetros livres, t_1, t_2, t_3 , que satisfaz a álgebra de Yang-Baxter. A forma explicita desta matriz é

¹ Na verdade, existe um modelo ainda mais geral que possui seis parâmetros livres, discutido em FOERSTER, A.; TONEL, A.P. Integrable spin ladder systems. *J. High Energy Phys.* aceito para publicação em (2003).

$$R_{j,j+1} = \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc}
 a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & t_1^{-1}b & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & t_2^{-1}b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 \\
 - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\
 0 & c & 0 & 0 & t_1b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_1b & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_3^{-1}b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 \\
 - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\
 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & t_1^{-1}b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_2^{-1}b & 0 & 0 & c & 0 \\
 - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\
 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_2b & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_3b & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & t_2b & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a
 \end{array} \right), \quad (3.15)$$

onde $a = x + 1$, $b = x$ e $c = 1$.

Usando o método algébrico do ansatz de Bethe com três níveis, este modelo pode ser resolvido exatamente. Os autovalores de energia da Hamiltoniana (3.13) são dados pela eq.(3.3), enquanto as equações do ansatz de Bethe são dadas por (ver **Apêndice B** para detalhes)

$$\begin{aligned}
 t_1^{(L-M_3)} t_2^{M_3} t_3^{-M_3} \left(\frac{\lambda_j - i/2}{\lambda_j + i/2} \right)^L &= \prod_{l \neq j}^{M_1} \frac{\lambda_j - \lambda_l - i}{\lambda_j - \lambda_l + i} \prod_{\alpha=1}^{M_2} \frac{\lambda_j - \mu_\alpha + i/2}{\lambda_j - \mu_\alpha - i/2} \\
 t_1^{(L-M_3)} t_2^{M_3} t_3^{-M_3} \prod_{\beta \neq \alpha}^{M_2} \frac{\mu_\alpha - \mu_\beta - i}{\mu_\alpha - \mu_\beta + i} &= \prod_{j=1}^{M_1} \frac{\mu_\alpha - \lambda_j - i/2}{\mu_\alpha - \lambda_j + i/2} \prod_{\delta=1}^{M_3} \frac{\mu_\alpha - \nu_\delta - i/2}{\mu_\alpha - \nu_\delta + i/2} \\
 t_1^{(M_2-M_1)} t_2^{-(L-M_1+M_2)} t_3^{-(M_1-M_2)} \prod_{\gamma \neq \delta}^{M_3} \frac{\nu_\delta - \nu_\gamma - i}{\nu_\delta - \nu_\gamma + i} &= \prod_{\alpha=1}^{M_2} \frac{\nu_\delta - \mu_\alpha - i/2}{\nu_\delta - \mu_\alpha + i/2}
 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Acima M_1 , M_2 e M_3 são números quânticos definidos por

$$M_1 = N_1 + N_2 + N_3$$

$$M_2 = N_2 + N_3$$

$$M_3 = N_3$$

onde os $N_{\alpha's}$ são dados por

$$N_{\alpha} = \sum_{i=1}^L X_i^{\alpha\alpha}, \quad \alpha = 0, 1, 2, 3,$$

e contam o número total de singletos (N_0) e tripletos (M_1) que existem numa escada de spin com duas pernas. É importante salientarmos que a quantidade

$$L = N_0 + N_1 + N_2 + N_3,$$

deve ser conservada. Em outras palavras, isto significa dizer que obrigatoriamente teremos sobre um degrau (para uma escada com duas pernas) um singlete ou então um dos tripletos. A soma destes singletos e tripletos é exatamente igual ao comprimento da escala (L).

Em princípio, espera-se que a física deste modelo seja muito mais rica pela presença destes parâmetros livres, que pode influenciar o diagrama de fase do modelo. Entretanto, uma análise preliminar do modelo (diagonalização exata até 6 degraus) mostra que a presença destes parâmetros extras, além de não influenciar no gap do modelo complica bastante os cálculos envolvidos. Por isto, no que segue optamos por nos concentrar no modelo anisotrópico com um parâmetro apenas.

Na próxima seção iremos estudar as propriedades termodinâmica do modelo anisotrópico. Também mostraremos como o parâmetro livre t afeta a termodinâmica.

3.7 Propriedades Termodinâmicas

Começaremos esta seção, reescrevendo a Hamiltoniana (3.1) na presença de um campo magnético externo h

$$H = \sum_{j=1}^L \left[J_l h_{j,j+1} + \frac{J_r}{2} (\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\tau}_j - 1) - \frac{h}{2} (\sigma_j^z + \tau_j^z) \right] \quad (3.17)$$

onde $h_{j,j+1}$ é dado pela eq.(3.1), J_r e J_l são os acoplamentos ao longo dos degraus e das pernas, respectivamente.

Os autovalores de energia da Hamiltoniana (3.17) são

$$\frac{E}{J_l} = - \sum_{j=1}^{M_1} \left(\frac{1}{\lambda_j^2 + 1/4} - 2 \frac{J_r}{J_l} + \frac{h}{J_l} \right) + \left(1 - 2 \frac{J_r}{J_l} \right) L + \frac{h}{J_l} (M_2 + M_3) \quad (3.18)$$

onde λ_j são as soluções das EAB (3.4) e M_1, M_2 e M_3 estão definidos na seção anterior. Da análise destas soluções, segue que para $J_r/J_l > 1 + (t + 1/t)/2 - h/2J_l$ o estado de referência torna-se o estado fundamental e as excitações passam a apresentar um gap de

spin. Salientamos aqui que o estado fundamental tem magnetização nula e é composto pelo produto tensorial dos singletos (um para cada degrau). Note que o cálculo aqui é o mesmo que foi feito na seção 3.4, com a única diferença que tem-se agora o campo externo h na expressão da energia. Usando as soluções das EAB (3.4) e a expressão da energia (3.18), podemos encontrar um expressão para o gap de spin ²

$$\frac{\Delta}{J_l} = 2 \left(\frac{J_r}{J_l} - 1 - \frac{1}{2} \left(t + \frac{1}{t} \right) - \frac{h}{2J_l} \right). \quad (3.19)$$

Fazendo-se $\Delta = 0$, nós encontramos um valor crítico para J_r que é $J_r^c = 1 + (t + 1/t)/2 - h/2$, onde ocorre a transição de fase entre uma região com gap de spin e outra sem gap de spin. Este resultado está plotado na Fig.3.7, para diferentes valores do campo h .

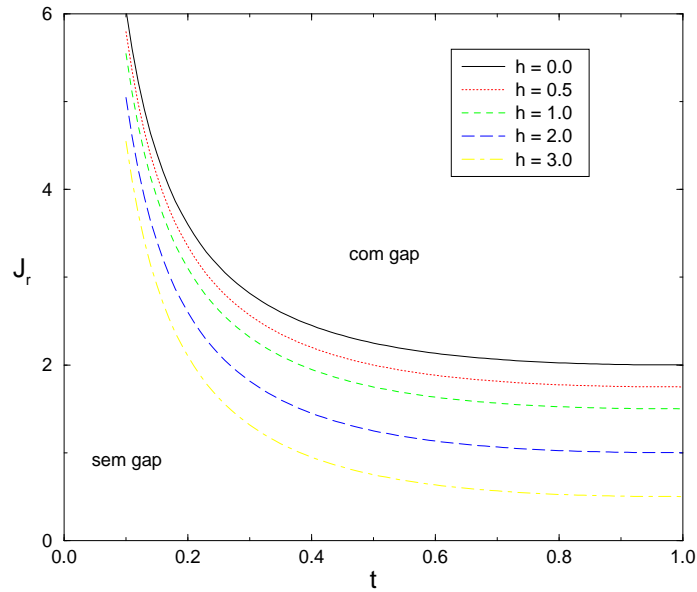


Fig. 3.7: O acoplamento J_r versus o parâmetro anisotrópico t para diferentes valores do campo externo h .

Na ausência de campo ($h = 0$) e escolhendo t real, tem-se que $J_r^c \geq 2$, que corresponde ao limite de acoplamento forte. Portanto, é razoável de se esperar que o nosso modelo anisotrópico seja um bom candidato para descrever alguns compostos orgânicos com a estrutura de uma escada, como por exemplo: KCuCl_3 [5, 53], $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ [4, 58], $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$, entre outros [60].

Ao ligarmos o campo no nosso sistema ($h \neq 0$), J_r^c começa a diminuir e como consequência o gap de spin diminui também, indo para zero quando $h = 2 + (t + 1/t)$.

² a partir de agora, por simplicidade, usaremos $J_l = 1$. Isto é possível já que Δ, J_r, t podem ser escritos em unidades de J_l .

Após esta discussão inicial, vamos passar para o cálculo da função de partição, que é o ingrediente principal para estudarmos as propriedades termodinâmicas do sistema. A função de partição é dada por

$$Z = \sum_{conf} e^{-\beta E} \quad (3.20)$$

onde $\beta = 1/T$ com T a temperatura do sistema e E são as energias de cada uma das possíveis configurações do sistema, dadas pela eq. (3.18).

Nosso objetivo principal é calcular numericamente a susceptibilidade magnética em função da temperatura para a Hamiltoniana (3.17) para depois compará-la com os dados experimentais de diversos compostos orgânicos do tipo escadas, mencionados anteriormente. Basicamente, a susceptibilidade magnética χ é definida como a derivada da magnetização em relação ao campo externo h

$$\chi = \frac{\partial}{\partial h} M|_{h=0}, \quad (3.21)$$

onde M é a magnetização

$$M = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L \langle \sigma_i^z + \tau_i^z \rangle = \frac{1}{2L\beta} \frac{\partial}{\partial h} \ln(Z). \quad (3.22)$$

Para calcular a susceptibilidade numericamente nós iremos diagonalizar a Hamiltoniana (3.17) exatamente, para uma seqüência finita de escadas de spin (até 6 degraus ou 12 sítios) para diferentes valores do acoplamento J_r e do parâmetro anisotrópico t . Com todos estes espectros nós vamos gerar uma seqüência de ordem finita da susceptibilidade em função da temperatura e então aplicar a técnica de aceleração padrão de Bulirsch-Stoer ³ para esta seqüência para determinar a susceptibilidade no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$. Um exemplo deste procedimento para $J_r=7$ e $t = 1$ é mostrado na Fig.3.8.

A fim de facilitar a comparação de nossos resultados com os dados experimentais dos diversos compostos do tipo escada, é importante investigar primeiro como a susceptibilidade varia com os parâmetros J_r e t . Para esta discussão apresentamos nas figuras 3.9a as curvas da susceptibilidade magnética em função da temperatura para diferentes valores de J_r e do parâmetro anisotrópico t . Algumas características interessantes podem ser observadas destas curvas: (i) para um valor fixo de t , ocorre um achatamento da curva da susceptibilidade com o aumento de J_r ; (ii) para J_r fixo, a susceptibilidade aumenta com a diminuição do parâmetro anisotrópico t .

³ maiores detalhes podem ser encontrado na referência: BULIRSCH, R., STOER, J. *Num. Math.*, v.6, p.413, (1994)

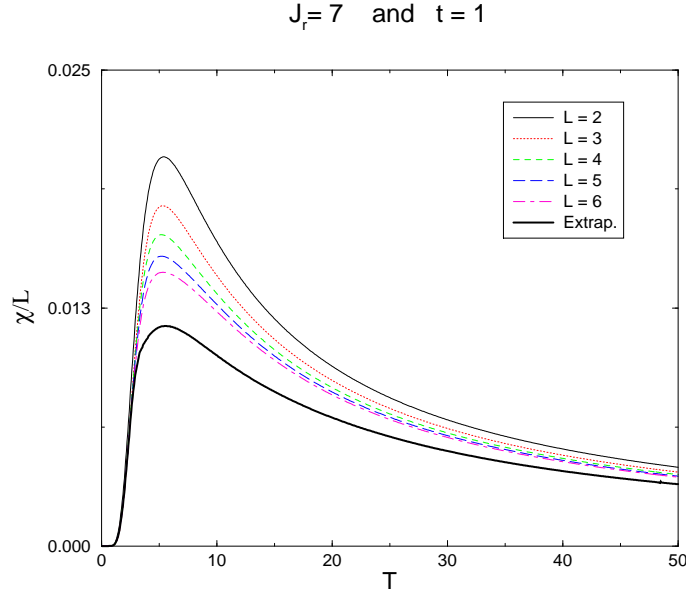


Fig. 3.8: *Susceptibilidade magnética versus temperatura para diferentes comprimentos finitos da rede. O limite termodinâmico, que também é apresentado, é obtido através de uma aceleração numérica como explicado no texto.*

Outra propriedade importante, presente em todos os casos, é que a susceptibilidade exibe um decaimento exponencial para baixas temperaturas ($T \ll \Delta^*$, onde Δ^* é o gap de spin do sistema

$$\chi \propto \frac{e^{-\frac{\Delta^*}{T}}}{\sqrt{T}}. \quad (3.23)$$

Este resultado coincide com aquele encontrado por Troyer e outros [33] para a escada de Heisenberg. Neste contexto, linearizando a eq. (3.23) nós podemos obter numericamente o gap de spin (Δ^*). Este resultado pode ser comparado com a expressão exata do gap de spin (Δ) obtida a partir das EAB (3.9) para $T = 0$ e encontramos uma concordância excelente, como pode ser visto na Tab. 3.1. As curvas linearizadas são apresentadas na Fig. 3.9b. Finalmente, observamos que o comportamento da susceptibilidade magnética para o valor crítico do acoplamento (J_r^c) tem a forma

$$\chi \sim \frac{1}{\sqrt{T}}, \quad (3.24)$$

que indica tipicamente um comportamento crítico. Este comportamento já havia sido previsto para o caso isotrópico [58, 61], e é ilustrado para diferentes valores para o parâmetro anisotrópico (t) na Fig. 3.10 .

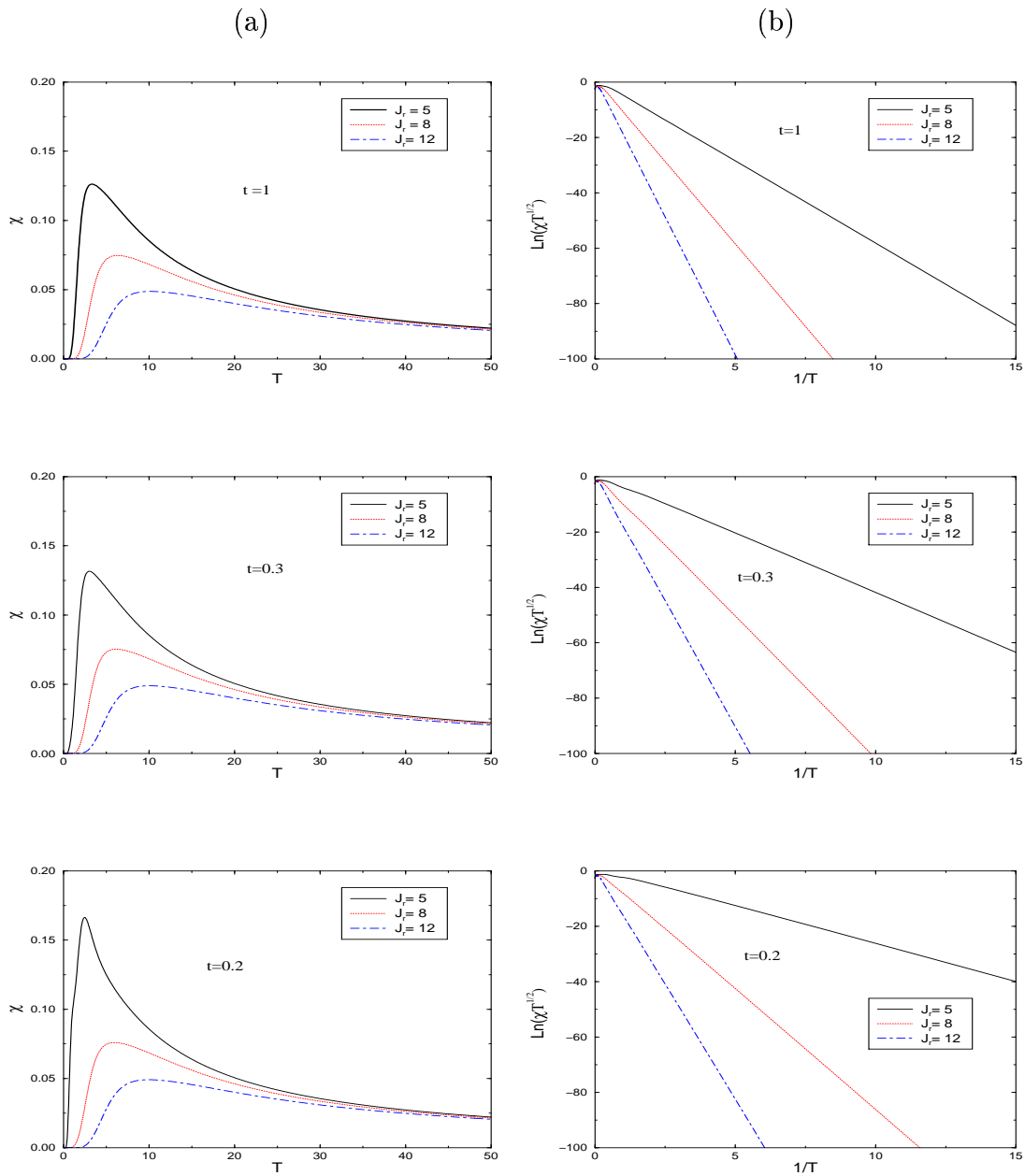


Fig. 3.9: *a)* Susceptibilidade magnética (χ) em função da temperatura (T) para diferentes valores de (J_r) e do parâmetro anisotrópico (t). *(b)* Logarítmo da susceptibilidade (χ) em função do inverso da temperatura ($1/T$), da qual o gap de spin (Δ^*) pode ser obtido.

3.8 Comparação com dados experimentais

A principal meta desta seção é calcular numericamente a susceptibilidade magnética no limite termodinâmico para o nosso modelo integrável anisotrópico e comparar com os dados

J_r	t	Δ	Δ^*
5	1.00	6.00	5.98
	0.30	4.37	4.42
	0.20	2.80	2.88
8	1.00	12.00	11.93
	0.30	10.37	10.36
	0.20	8.80	8.81
12	1.00	20.00	19.88
	0.30	18.37	18.32
	0.20	16.80	16.76

Tab. 3.1: A tabela compara o gap obtidos através da linearização da curva da susceptibilidade magnética (Δ^*) e o gap obtido a partir da solução das EAB (Δ) (3.9).

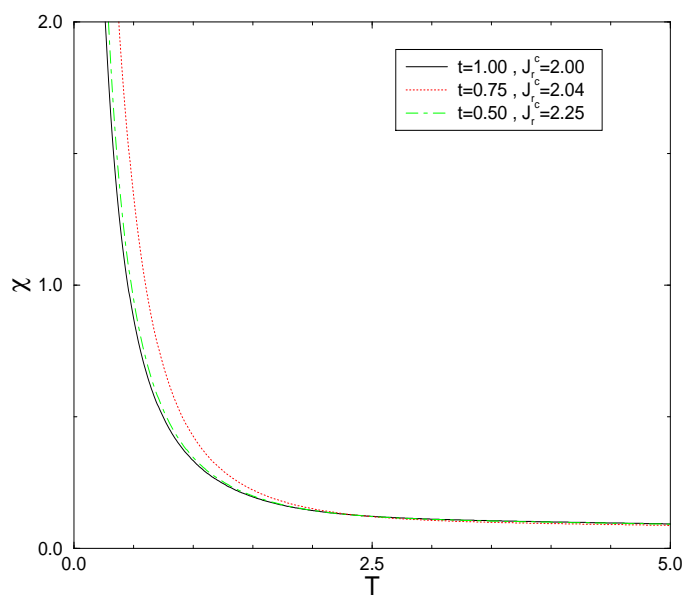


Fig. 3.10: Susceptibilidade magnética (χ) versus a temperatura (T) para diferentes acoplamentos J_r^c , indicando um comportamento crítico.

experimentais de vários compostos. A idéia básica é que através de uma escolha apropriada dos parâmetros J_l , J_r e t conseguiremos gerar uma curva de susceptibilidade magnética versus a temperatura que se ajuste bem a correspondente curva experimental para os seguintes compostos: KCuCl_3 , $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ e $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$.

Abaixo apresentaremos, usando o procedimento acima explicado, o resultado para três

diferentes compostos:

3.8.1 KCuCl_3

As propriedades magnéticas deste composto foram investigadas em [5, 53], onde a presença de um estado fundamental não-magnético e do gap de spin no espectro de excitações foi reportada. Os dados experimentais para a susceptibilidade magnética (círculos) [53] e a curva obtida da diagonalização exata (linha tracejada) são mostrados na Fig. 3.11. O gap de spin

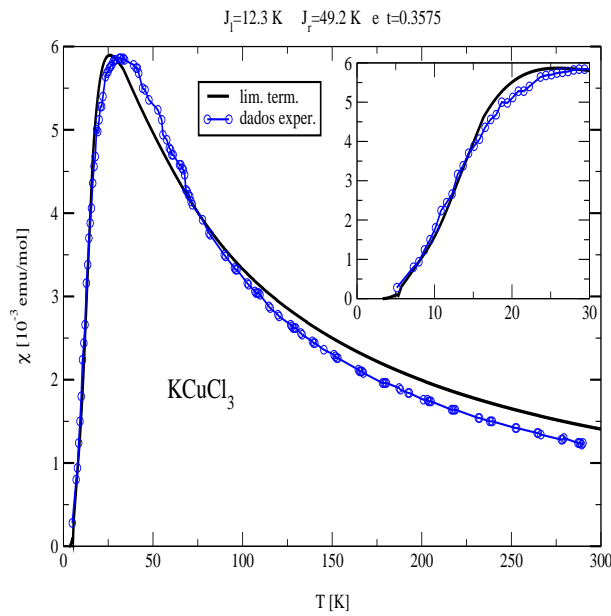


Fig. 3.11: *Susceptibilidade magnética versus temperatura. A linha tracejada é o resultado da extrapolação dos dados de tamanho finito obtidos a partir da diagonalização exata para redes de até 12 sítios. Os círculos são os dados experimentais obtidos por Nakamura e Okamoto [53]. No detalhe apresentamos o regime de baixas temperaturas ampliado.*

estimado experimentalmente pelos autores [5] foi de $\Delta^{exp} \sim 31.10$ K. A linha tracejada foi obtida usando-se os seguintes acoplamentos: $J_l = 12.3$ K, $J_r = 49.2$ K e $t = 0.3575$. Substituindo estes valores na expressão analítica do gap (3.19) obtida a partir das EAB, encontramos $\Delta = 32.00$ K. Já o gap numérico obtido a partir da linearização da curva tracejada é de $\Delta^* = 33.35$ K. Observamos que no regime de baixas temperaturas existe uma concordância excelente entre os resultados experimentais e os teóricos. O desvio para altas

temperaturas surge provavelmente devido a existência de um acoplamento ferromagnético que aparece no composto (ver a referência: KANAMORI, J., *J. Phys. Chem. Solids*, v.10, p.87 (1959), para maiores detalhes), que não está presente no nosso modelo.

3.8.2 $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$

Este composto foi estudado por Chaboussant e outros [4, 62, 64].

Para baixas temperaturas o gap foi determinado via medidas de susceptibilidade magnética e técnicas de NMR como sendo $\Delta^{exp} = 10.8 \pm 0.6\text{K}$ [4].

A linha tracejada foi obtida a partir da diagonalização exata do nosso modelo com a escolha $J_l = 2.4\text{ K}$, $J_r = 13.2\text{ K}$ e $t = 0.2344$, que nos dá um gap teórico de 10.8 K. Observe que para baixas temperaturas os resultados experimentais e os nossos estão em excelente acordo e permanecem bons para as outras temperaturas, como podemos ver na Fig.3.12. O gap obtido da linearização desta curva é $\Delta^* = 13.24\text{ K}$.

3.8.3 $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$

Aqui usando os acoplamentos $J_l = 4.0\text{ K}$, $J_r = 16.0\text{ K}$ e $t = 0.31$, mais uma vez conseguimos obter um excelente resultado para baixas temperaturas (ver Fig. 3.13). O gap teórico que obtemos é de 9.8 K, enquanto que o gap experimental obtido por Watson e outros [60] é de $\Delta^{exp} \sim 9.5\text{ K}$.

Na Tab. 3.2 apresentamos de forma resumida os gaps obtidos para estes três compostos utilizando o nosso modelo anisotrópico (Δ, Δ^*) e o gap experimental (Δ^{exp}) obtido pelos diferentes autores (já citados no texto) utilizando diferentes métodos.

<i>composto</i>	$J_r[\text{K}]$	$J_l[\text{K}]$	t	$\Delta[\text{K}]$	$\Delta^*[\text{K}]$	$\Delta^{exp}[\text{K}]$
KCuCl_3	49.2	12.3	0.3575	32.00	33.35	31.10
$\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$	13.2	2.4	0.2344	10.80	13.24	10.80
$(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$	16	4.0	0.3100	9.85	9.71	9.50

Tab. 3.2: Comparação entre o resultado teórico e experimental para o gap dos três compostos apresentados no texto.

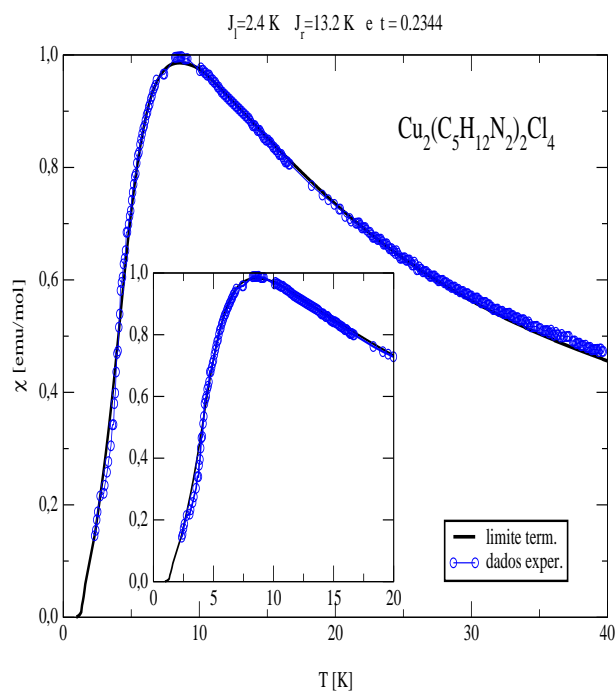


Fig. 3.12: Susceptibilidade magnética normalizada versus temperatura. A linha tracejada é o resultado da extrapolação dos dados de tamanho finito obtidos a partir da diagonalização exata para redes de até 12 sítios. Os círculos são os dados experimentais obtidos por Chaboussant e outros [4]. No detalhe apresentamos o regime de baixas temperaturas ampliado .

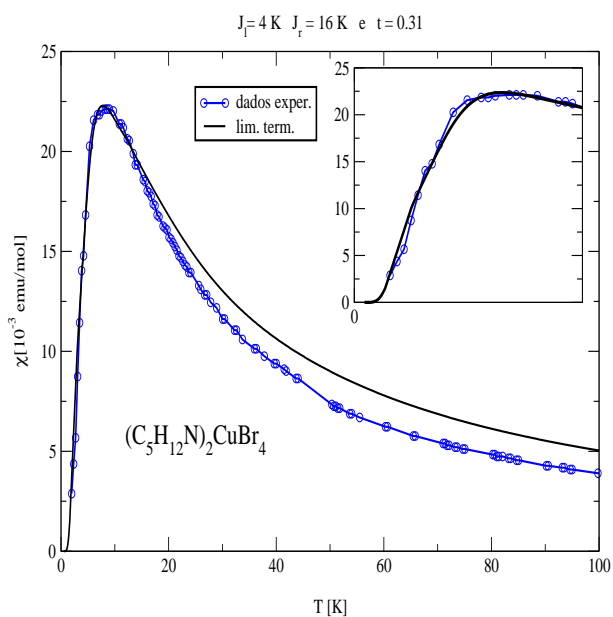


Fig. 3.13: Susceptibilidade magnética versus temperatura. Os círculos representam os dados experimentais obtidos por Watson e outros [60]. A linha tracejada é o resultado obtido via diagonalização exata, como explicado nas figuras anteriores. No detalhe o comportamento para baixas temperaturas.

Capítulo 4

Modelos Integráveis de Escadas de Spin com Impurezas

4.1 Introdução

A existência de um gap de spin é fundamental para que ocorra a supercondutividade sob dopagem, como verificado experimentalmente em alguns compostos, e também como foi predito teoricamente [1]. Neste contexto, o efeito de impurezas em sistemas do tipo escadas de spin tem sido investigado. Experimentos de fotoemissão e de espectroscopia Raman em compostos com a estrutura de escadas, como por exemplo $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$, $SrCu_2O_3$ [1, 65], entre outros, revelam que mesmo para pequenas concentrações de impurezas, o gap de spin é reduzido. Este mesmo comportamento também pode ser mostrado teoricamente através de cálculos numéricos, como por exemplo os métodos de diagonalização exata e Monte Carlo, utilizados na escada de spin de Heisenberg [1, 66, 67].

Inicialmente, a maior parte dos resultados teóricos sobre as escadas de spin foi obtida através de estudos da escada de Heisenberg. Entretanto, ao contrário de sua análoga unidimensional, a escada de Heisenberg não pode ser resolvida exatamente. Posteriormente, a fim de se obter uma melhor compreensão sobre o comportamento destes sistemas, outros modelos de escada com termos de interação generalizados que garantam a condição de integrabilidade foram propostos [13, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 23, 54, 55, 56, 68]. Muitos destes modelos generalizados exibem qualitativamente propriedades físicas realísticas, como por exemplo: a existência de um gap de spin [16] e a previsão da existência de um platô de magnetização para valores fracionários da magnetização total [54]. Entretanto, embora exista uma grande quantidade de trabalhos sobre escadas de spin na literatura, poucos destes tratam da presença e dos efeitos de impurezas.

Por outro lado, o efeito de impurezas nas cadeias de spin e nos sistemas de elétrons fortemente correlacionados é bem conhecido, particularmente nos casos de baixa dimensionalidade. Do ponto de vista teórico o estudo de impurezas em sistemas integráveis é de grande importância, já que nestes sistemas é possível incorporar impurezas sem destruir a integrabilidade. Em princípio, isto pode ser feito através de dois métodos: no primeiro, as impurezas são introduzidas através de uma mudança da representação da estrutura da álgebra de Yang-Baxter para alguns sítios da rede (modelo de escada de spin com impurezas do tipo I), isto é, nestes sítios é feita uma substituição da representação fundamental (aquela dada pela matriz R original) para uma outra representação. Este método já foi aplicado em diversos modelos unidimensionais, como o modelo de Heisenberg e o $t - J$ [24, 25, 26, 27]. No segundo método as impurezas são introduzidas através da colocação de inomogeneidades na matriz de transferência do sistema (modelo de escada de spin com impurezas do tipo II). Este procedimento já foi utilizado em vários sistemas unidimensionais, como aparece nas referências [28, 29, 30].

Neste capítulo nós vamos adaptar estes dois métodos conhecidos em uma dimensão para incorporar impurezas nas escadas de spin. Nosso principal objetivo é investigar o efeito das impurezas nas escadas de spin integráveis. Em particular, construiremos dois modelos integráveis de escadas de spin com impurezas baseados na álgebra $SU(4)$.

Este capítulo está organizado da seguinte forma: na seção 2 construiremos um sistema de escada de spin integrável onde as impurezas são introduzidas via uma representação dual da representação da álgebra $SU(4)$. O modelo é exatamente solúvel e o gap de spin é calculado. Na seção 3 introduziremos um outro modelo de escada de spin integrável onde as impurezas são incorporadas através de inomogeneidades introduzidas na matriz de transferência. As EAB, as energias, o gap de spin e a transição de fase dos modelos serão discutidos em detalhes. O efeito das impurezas para diferentes valores da constante de acoplamento ao longo dos degraus, da intensidade da impureza e da concentração de impurezas será também discutido.

4.2 Modelo de escada de spin com impurezas do tipo I

Vamos começar introduzindo o primeiro modelo de escada com impurezas cuja Hamiltoniana é dada por

$$H = \sum_{i=1}^N h_{i,i+1} + \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\tau}_i - 1) + \sum_{i \in I} h_{i,\bar{i},i+1}^{imp} - \frac{J}{2} \sum_{\bar{i}=1}^l (\vec{\sigma}_{\bar{i}} \cdot \vec{\tau}_{\bar{i}} - 1) \quad (4.1)$$

onde

$$h_{i,\bar{i},i+1}^{imp} = \frac{2}{\Lambda - 8} h_{i,i+1} Q_{i,\bar{i}} - \frac{2}{\Lambda} Q_{i,\bar{i}} h_{i,i+1} \quad (4.2)$$

com $h_{i,i+1}$ e $Q_{i,\bar{i}}$ dados por

$$h_{i,i+1} = \frac{1}{4} (1 + \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1}) (1 + \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_{i+1}) \quad (4.3)$$

$$Q_{i,\bar{i}} = \frac{1}{4} [1 + (\sigma_i^x \sigma_i^x - \sigma_i^y \sigma_i^y + \sigma_i^z \sigma_i^z)] [1 + (\tau_i^x \tau_i^x - \tau_i^y \tau_i^y + \tau_i^z \tau_i^z)]. \quad (4.4)$$

Acima $\vec{\sigma}_i$ e $\vec{\tau}_i$ são as matrizes de Pauli atuando sobre o sítio i (ou o sítio da impureza \bar{i}) da perna superior ou inferior da escada, respectivamente, J é a constante de acoplamento sobre os degraus e Λ é um parâmetro arbitrário que mede a intensidade da impureza. O símbolo I denota um conjunto de índices com l elementos num conjunto de $1, 2, \dots, N$. Para cada $i \in I$ nós acoplamos uma impureza na escada de spin, situada entre os sítios i e $i + 1$ que

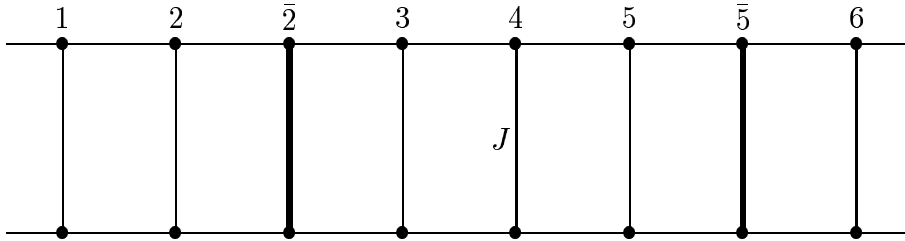


Fig. 4.1: A figura representa uma escada de spin com duas impurezas situadas nos degraus $\bar{2}$ e $\bar{5}$.

para maior clareza, nós denominamos \bar{i} . Estaremos trabalhando com a hipótese de que, se $i \in I$ então $i \pm 1 \notin I$, que significa fisicamente que não existem impurezas vizinhas. Para tratar este caso seriam necessários termos adicionais na Hamiltoniana acima para satisfazer a condição da integrabilidade. O número de degraus (equivalentemente, o comprimento da escada de spin) é N , l é o número de impurezas introduzidas no sistema e condições de contorno periódicas estão sendo adotadas. A fig. 4.1 ilustra o caso de uma escada de spin com $N = 6$ e $l = 2$.

Note que aqui além das interações de Heisenberg usuais ao longo das pernas e dos degraus, existem também interações do tipo Heisenberg entre o sítio i e o sítio \bar{i} das impurezas, bem como interações biquadráticas (que também envolvem o sítio da impureza \bar{i}). Existem também interações de três sítios envolvendo os sítios $i, i + 1$ e o sítio \bar{i} , bem como da impureza e interações entre as impurezas nos degraus da escada. Finalmente, mencionamos que a Hamiltoniana para o modelo de escada de spin baseada na representação da álgebra $su(4)$ [16] pode ser obtida a partir da eq. (4.1) fazendo-se o limite $\Lambda \rightarrow \infty$. A derivação da Hamiltoniana (4.1) é mostrada no **Apêndice E** em detalhes.

Os autovalores de energia da Hamiltoniana (4.1) são dados por (ver **Apêndice F**)

$$E = N - 2J(N - l) - 4 \sum_{i=1}^{M_1} \left(\frac{1}{\lambda_i^2 + 1} - \frac{J}{2} \right) \quad (4.5)$$

onde λ_i são as soluções das equações do ansatz de Bethe (EAB) abaixo. As EAB surgem a partir da solução exata do modelo através do método algébrico do ansatz de Bethe. Um ponto importante na derivação destas equações é que neste caso, que envolve uma combinação das representações fundamental e dual, não existe um único pseudovácuo. Isto nos força a trabalhar num subespaço de pseudovácuos, complicando consideravelmente os cálculos. Esta aproximação foi desenvolvida nos trabalhos de Abad e Ríos para redes de spin integráveis da representação $su(3)$ combinando diferentes representações (a fundamen-

tal e a sua dual) [69, 70] e no modelo $t - J$ com impurezas integrável construído através da combinação das representações fundamental e dual de uma superálgebra $gl(2/1)$ [27] (ver também [71] para uma aproximação alternativa). Aqui, nós vamos adotar a mesma estratégia para o caso da representação fundamental e dual da álgebra $SU(4)$. O procedimento é similar, mas temos que levar em conta o fato que aqui existe um nível extra no método do ansatz de Bethe. Para o presente caso as EAB são (os cálculos detalhados destas equações encontram-se no **Apêndice F**)

$$\begin{aligned} \left(\frac{\lambda_l - i}{\lambda_l + i} \right)^N &= \prod_{l \neq i}^{M_1} \frac{\lambda_l - \lambda_i - 2i}{\lambda_l - \lambda_i + 2i} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{\lambda_l - \mu_j + i}{\lambda_l - \mu_j - i} \\ \prod_{j \neq l}^{M_2} \frac{\mu_l - \mu_j - 2i}{\mu_l - \mu_j + 2i} &= \prod_{i=1}^{M_1} \frac{\mu_l - \lambda_i - i}{\mu_l - \lambda_i + i} \prod_{k=1}^{M_3} \frac{\mu_l - \nu_k - i}{\mu_l - \nu_k + i} \\ \left(\frac{\nu_l - \Lambda + i}{\nu_l - \Lambda - i} \right)^l \prod_{k \neq l}^{M_3} \frac{\nu_l - \nu_k - 2i}{\nu_l - \nu_k + 2i} &= \prod_{j=1}^{M_2} \frac{\nu_l - \mu_j - i}{\nu_l - \mu_j + i} \end{aligned} \quad (4.6)$$

A presença da impureza pode ser detectada explicitamente através do parâmetro Λ no primeiro termo da última equação acima.

Quando $J > 2$, o estado fundamental é dado pelo produto tensorial de singletos (um para cada degrau) e a energia é $E_0 = N - 2J(N - l)$. Este estado pertence a um subespaço do pseudovácuo e corresponde ao caso $M_1 = M_2 = M_3 = 0$ para as EAB (4.6). Para descrever uma excitação elementar, nós escolhemos $M_1 = 1$ e $M_2 = M_3 = 0$ nas EAB (4.6) o que nos dá o estado excitado com a mínima energia $E_1 = N - 2J(N - l) + 2J - 4$.

O gap de energia pode facilmente ser calculado e obtemos

$$\Delta = 2(J - 2). \quad (4.7)$$

Esta expressão coincide com o gap obtido para o modelo de Wang [16]. Resolvendo a equação $\Delta = 0$ para J encontramos o valor crítico $J^c = 2$, que indica o ponto crítico no qual a transição de fase sem gap para a fase com gap ocorre. Note que não surge nenhum efeito da impureza Λ sobre o gap.

A integrabilidade deste modelo pode ser mostrada pelo fato que ele pode ser mapeado para a seguinte Hamiltoniana, que por sua vez pode ser derivada a partir das matrizes R e R^* (ver equações (4.11) e (4.12) a seguir) para $J = 0$, enquanto que para $J \neq 0$ a interação sobre os degraus tem a forma de um potencial químico.

$$H = \sum_{i=1}^N h_{i,i+1} - 2J \sum_{i=1}^N X_i^{00} + \sum_{i \in I}^l h_{i,\bar{i},i+1}^{imp} + 2J \sum_{\bar{i}=1}^l X_{\bar{i}}^{00}. \quad (4.8)$$

Acima o termo $h_{i,\bar{i},i+1}^{imp}$ é dado pela mesma expressão que aparece na eq.(4.2), mas agora com $h_{i,i+1}$ e $Q_{i,\bar{i}}$ dados por

$$h_{i,i+1} = \sum_{\alpha,\beta=0}^3 X_i^{\alpha\beta} X_{i+1}^{\beta\alpha} \quad (4.9)$$

$$Q_{i,\bar{i}} = \sum_{\alpha,\beta=0}^3 X_i^{\alpha\beta} X_{\bar{i}}^{\alpha\beta}. \quad (4.10)$$

Acima $X_i^{\alpha\beta} = |\alpha_i\rangle\langle\beta_i|$ são os operadores Hubbard usuais definidos no capítulo anterior. Nesta notação fica muito simples de se verificar que os termos nos degraus para $J \neq 0$ comutam com o restante da Hamiltoniana e, portanto, não contribuem para as EAB, apenas para a energia (ver **Apêndice E**).

A matriz R associada a álgebra $SU(4)$ e sua dual R^* são dadas por

$$R_{12} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} | \\ \hline \\ \hline \\ | \end{array} \\ \begin{array}{c} 1 \\ \hline \\ \hline \\ 2 \end{array} \end{array} = \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc} a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & c & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 \end{array} \right) \quad (4.11)$$

com

$$a = -x/2 + 1, \quad b = -x/2, \quad c = 1,$$

onde

$$\begin{aligned} X_i &= V & \text{se } i \notin I, \\ X_i &= V \otimes W & \text{se } i \in I. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Em outras palavras para cada $i \in I$ nós acoplamos uma impureza dentro da escada, a qual estará situada entre os sítios i e $i + 1$.

Agora, nós definimos a matriz de monodromia

$$T(u) = \bar{R}_{01}(u)\bar{R}_{02}(u)\dots\bar{R}_{0N}(u)$$

onde o sub-índice 0 representa o espaço auxiliar e temos que

$$\begin{aligned} \bar{R}_{0i}(u) &= R_{0i}(u) & \text{para } i \notin I, \\ \bar{R}_{0i}(u) &= R_{0i}(u)R_{0\bar{i}}^*(u - \Lambda) & \text{para } i \in I. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Na forma matricial temos que

$$T(u) = \begin{pmatrix} T_1^1 & T_2^1 & T_3^1 & T_4^1 \\ T_1^2 & T_2^2 & T_3^2 & T_4^2 \\ T_1^3 & T_2^3 & T_3^3 & T_4^3 \\ T_1^4 & T_2^4 & T_3^4 & T_4^4 \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

cujos elementos são operadores que atuam sobre o espaço quântico X . Podemos mostrar, a partir das eqs. (4.13) e (4.14) que a matriz de monodromia $T(u)$ satisfaz a álgebra de Yang-Baxter

$$R_{12}(u - v)T_{13}(u)T_{23}(v) = T_{23}(v)T_{13}(u)R_{12}(u - v). \quad (4.18)$$

Note que tecnicamente as impurezas são incorporadas no sistema através da inclusão do operador $R^*(u - \Lambda)$ na matriz de transferência, que é definida por

$$\tau(u) = \text{tr}_0 T(u), \quad (4.19)$$

da qual a Hamiltoniana (4.8) (para $J = 0$) é obtida através de

$$H = -2 \frac{\partial}{\partial u} \ln \tau(u) \Big|_{u=0}. \quad (4.20)$$

Neste derivação, utilizamos as seguintes propriedades

$$[R_{i,\bar{i}}^*(-u)]^{-1} = I_{i,\bar{i}} + \frac{2}{u - 8} Q_{i,\bar{i}} \quad (4.21)$$

$$Q_{i,\bar{i}} \cdot P_{i,i+1} \cdot Q_{i,\bar{i}} = Q_{i,\bar{i}} \quad (4.22)$$

$$Q_{i,\bar{i}} \cdot Q_{i,\bar{i}} = 4 Q_{i,\bar{i}}. \quad (4.23)$$

que simplificam consideravelmente os cálculos (maiores detalhes desta derivação podem ser encontrados no **Apêndice E**). Na fig.4.2 representamos a matriz de monodromia para o caso $N = 6$ e duas impurezas situadas nos sítios ($\bar{2}$ e $\bar{5}$).

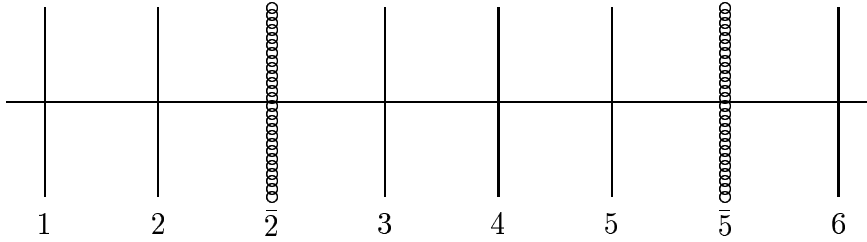


Fig. 4.2: Representação da matriz de monodromia com duas impurezas, situadas nos sítios $\bar{2}$ e $\bar{5}$.

Desta forma, mostramos como construir um modelo de escada de spin com impurezas sem violar a integrabilidade. Provamos também que para o modelo obtido, as impurezas introduzidas não afetam o gap. No que segue vamos mostrar como construir um outro modelo integrável de escada de spin onde as impurezas introduzidas afetam efetivamente o gap.

4.3 Modelo de escada de spin com impurezas do tipo II

Vamos agora definir o segundo modelo de escadas de spin integrável com impurezas, cuja Hamiltoniana é dada por

$$H = \sum_{i=1}^N h_{i,i+1} + \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\tau}_i - 1) + \sum_{i \in I} h_{i,\bar{i},i+1}^{imp} + \frac{J}{2} \sum_{\bar{i}=1}^l (\vec{\sigma}_{\bar{i}} \cdot \vec{\tau}_{\bar{i}} - 1) \quad (4.24)$$

onde

$$h_{i,i+1} = P_{i,i+1} = \frac{1}{4} (1 + \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1}) (1 + \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_{i+1}), \quad (4.25)$$

$$h_{i,\bar{i},i+1}^{imp} = \frac{4}{4 - \Lambda^2} \left\{ P_{i,\bar{i}} + P_{i,i+1} - P_{i,i+1} \right\} + \frac{2\Lambda}{4 - \Lambda^2} \left\{ P_{i,i+1} P_{i,\bar{i}} - P_{i,\bar{i}} P_{i,i+1} \right\} - \frac{2\Lambda}{4 - \Lambda^2} I_{i,\bar{i}} \quad (4.26)$$

e condições de contorno periódicas estão sendo consideradas. Acima, N e I tem o mesmo significado que no modelo anterior e l é o número total de impurezas. Desta forma a concentração de impurezas do modelo "k" pode ser definida como

$$k \equiv \frac{l}{N}.$$

Como no caso anterior, supomos que se $i \in I$, então $i \pm 1 \notin I$. Fisicamente isto significa que não existem impurezas vizinhas e portanto k não pode exceder a $1/3$. Do ponto de vista físico esta restrição não causa nenhuma dificuldade, já que praticamente todos os experimentos são realizados no regime de baixas dopagens [65]. A Hamiltoniana (4.24) contém dois parâmetros de acoplamento: J , que representa o acoplamento sobre os degraus e Λ , que representa intensidade da impureza. Essencialmente, a competição entre estes dois termos irá determinar as propriedades físicas do modelo. Notamos também que a escada de Wang [16] com $N + l$ degraus pode ser obtida tomando-se o limite $\Lambda = 0$.

Os autovalores de energia da Hamiltoniana (4.24) são dados por

$$E = (1 - 2J)N + \left(\frac{2}{2 + \Lambda} - 2J \right) l - 4 \sum_{i=1}^{M_1} \left(\frac{1}{\lambda_i^2 + 1} - \frac{J}{2} \right) \quad (4.27)$$

onde λ_i são as soluções das equações do ansatz de Bethe (EAB), obtidas através do método algébrico do ansatz de Bethe com três níveis. Diferentemente do que ocorreu no caso anterior, a derivação destas equações é mais simples devido a existência de um único pseudovácuo. Uma vez que esta aproximação é bem conhecida na literatura [72, 73, 74, 75], nós apresentamos somente o resultado final

$$\begin{aligned} \left(\frac{\lambda_l - i}{\lambda_l + i} \right)^N \left(\frac{\lambda_l - i(1 - \Lambda)}{\lambda_l + i(1 + \Lambda)} \right)^l &= \prod_{l \neq i}^{M_1} \frac{\lambda_l - \lambda_i - 2i}{\lambda_l - \lambda_i + 2i} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{\lambda_l - \mu_j + i}{\lambda_l - \mu_j - i} \\ \prod_{j \neq l}^{M_2} \frac{\mu_l - \mu_j - 2i}{\mu_l - \mu_j + 2i} &= \prod_{i=1}^{M_1} \frac{\mu_l - \lambda_i - i}{\mu_l - \lambda_i + i} \prod_{k=1}^{M_3} \frac{\mu_l - \nu_k - i}{\mu_l - \nu_k + i} \\ \prod_{k \neq l}^{M_3} \frac{\nu_l - \nu_k - 2i}{\nu_l - \nu_k + 2i} &= \prod_{j=1}^{M_2} \frac{\nu_l - \mu_j - i}{\nu_l - \mu_j + i} \end{aligned} \quad (4.28)$$

Para $J > \frac{2}{\lambda^2 + 1}$ o estado fundamental é dado pelo produto tensorial dos singletos (um para cada degrau) e a energia é $E_0 = (\frac{2}{2 + \Lambda} - 2J)l + (1 - 2J)N$, correspondendo, como no caso anterior, a escolha de $M_1 = M_2 = M_3 = 0$ para as EAB (4.28). Para descrever uma excitação elementar, nós escolhemos $M_1 = 1$ e $M_2 = M_3 = 0$ nas EAB (4.28), que fornece a energia de excitação mínima. Esta solução depende explicitamente da concentração de

impurezas $k = l/N$. Para fixar idéias, vamos primeiro considerar o caso $k = 1/3$, que leva a seguinte solução imaginária para a variável λ ¹

$$\lambda = -\frac{i}{12} \left(-3\Lambda + \frac{3^{2/3}(-16 + 3\Lambda^2)}{K} + 3^{1/3}K \right) \quad (4.29)$$

com K dado por

$$K = (-9\Lambda^3 + 4\sqrt{3}\sqrt{256 - 144\Lambda^2 + 27\Lambda^4})^{1/3}.$$

Note que a solução λ acima depende explicitamente da intensidade de impureza Λ . Esta relação é ilustrada na fig. 4.3.

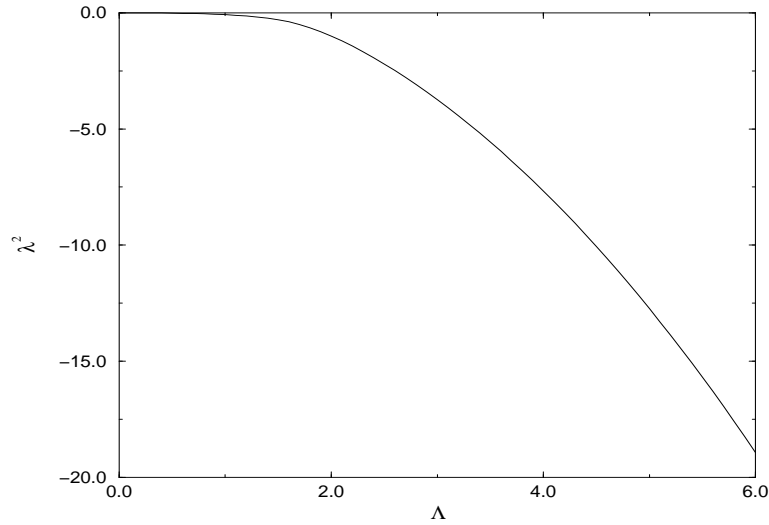


Fig. 4.3: Este gráfico mostra como a solução das EAB (λ^2) depende da impureza Λ .

Substituindo esta solução (4.29) na expressão para a energia (4.27) encontramos a energia do primeiro estado excitado E_1 , a partir da qual o gap de energia (Δ) é obtido

$$\Delta = E_1 - E_0 = 2 \left(J - \frac{2}{\lambda^2 + 1} \right). \quad (4.30)$$

Aqui, diferentemente do que aconteceu no caso anterior, a impureza afeta o gap de energia. Resolvendo a equação $\Delta = 0$ para J nós encontramos o valor crítico $J^c = \frac{2}{\lambda^2 + 1}$, indicando a linha crítica na qual a transição de fase ocorre. Esta linha de transição de fase é mostrada na fig. 4.4. Note que se aumentarmos a intensidade da impureza Λ , o valor crítico J^c também aumenta. Uma análise de ambos gráficos juntamente com a expressão do gap (4.30) revela que existe uma redução do gap quando a intensidade da impureza Λ é aumentada. Este

¹ Vamos supor, por hipótese, que o comprimento da escada N é ímpar, tal que no limite sem impurezas ($\Lambda = 0$) o gap obtido na referência [16] seja reproduzido.

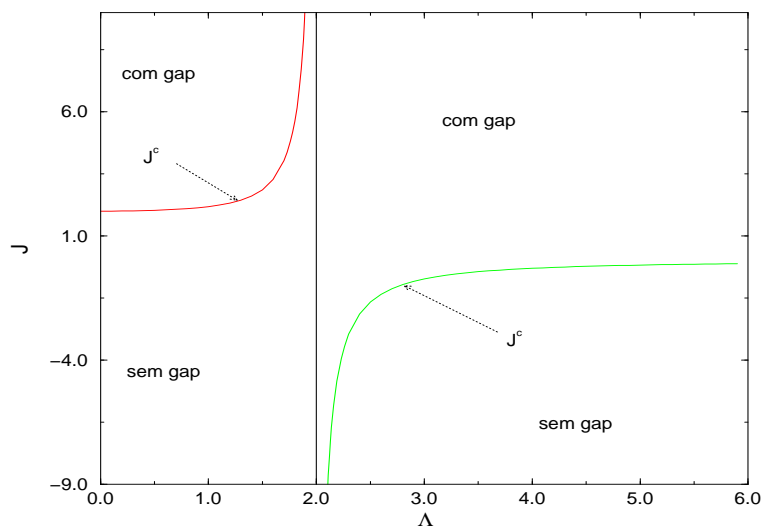


Fig. 4.4: O acoplamento nos degraus J versus a impureza Λ . Este gráfico representa o diagrama de fase do sistema. A curva ($J^c = 2/(\lambda^2 + 1)$) divide as fases com gap e sem gap.

resultado pode ser facilmente confirmado através da inspeção da fig.4.5 para três diferentes valores de J .

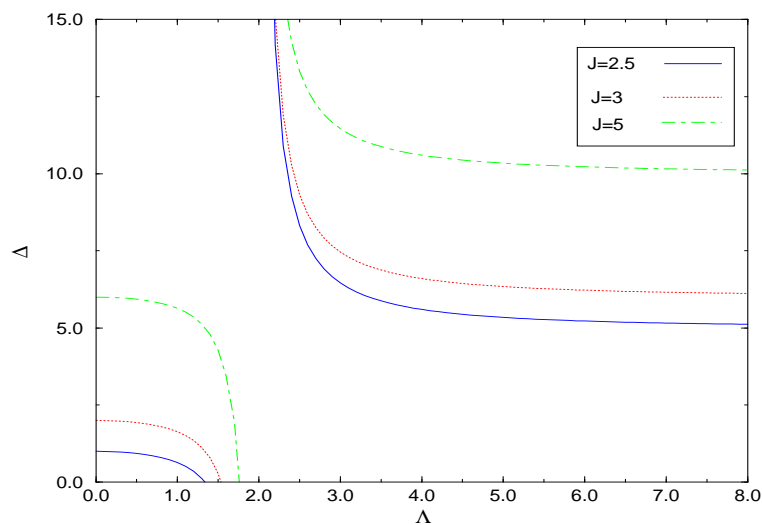


Fig. 4.5: Este gráfico mostra como o gap de energia Δ depende da intensidade da impureza Λ para diferentes valores do acoplamento J nos degraus.

Uma análise similar pode ser feita para outras concentrações k , embora em geral somente soluções numéricas das EAB (4.28) são possíveis. Essencialmente, nós observamos o mesmo tipo de comportamento qualitativo que no caso da concentração $k = 1/3$, de forma que

apresentaremos somente os resultados mais significativos para a discussão. A fig.4.6, por exemplo, ilustra o comportamento da solução das EAB associada com o menor estado mínimo excitado em função da impureza para diferentes concentrações. O fato de que o gap diminui com o aumento da intensidade da impureza Λ para valores fixos do acoplamento J , também é observado para outras concentrações, como está ilustrado na fig.4.7. Outra propriedade interessante que pode ser facilmente confirmada através da inspeção desta figura é a diminuição do gap, com o aumento da concentração de impurezas k para valores fixos de J e Λ . Isto está qualitativamente de acordo com os resultados experimentais [1].

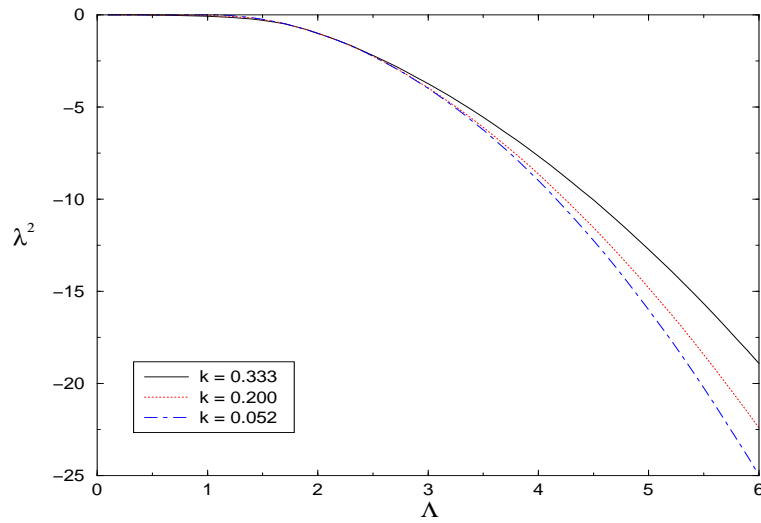


Fig. 4.6: Esta figura indica como a solução das EAB λ^2 depende da impureza Λ para diferentes concentrações de impurezas k .

A solução exata deste modelo, como no caso anterior, pode ser mostrada através do fato que o modelo pode ser mapeado para uma Hamiltoniana que tem a mesma forma da eq. (4.8), onde $h_{i,\bar{i},i+1}^{imp}$ é dado pela eq. (4.26) com $h_{i,i+1}$ escrito em termos dos operadores de Hubbard como na eq. (4.9). A diferença neste caso é que a definição da matriz de monodromia é dada por

$$T(u, \Lambda) = \bar{R}_{01}(u)\bar{R}_{02}(u)\dots\bar{R}_{0N}(u).$$

Acima temos

$$\begin{aligned} \bar{R}_{0i}(u) &= R_{0i}(u) && \text{para } i \notin I, \\ \bar{R}_{0i}(u) &= R_{0i}(u)R_{0\bar{i}}(u - \Lambda) && \text{para } i \in I. \end{aligned}$$

e a matriz R (eq. (4.11)) obedece a álgebra de Yang-Baxter (4.13). Note que na equação acima a impureza Λ está associada com a mesma matriz R , diferentemente do que aconteceu

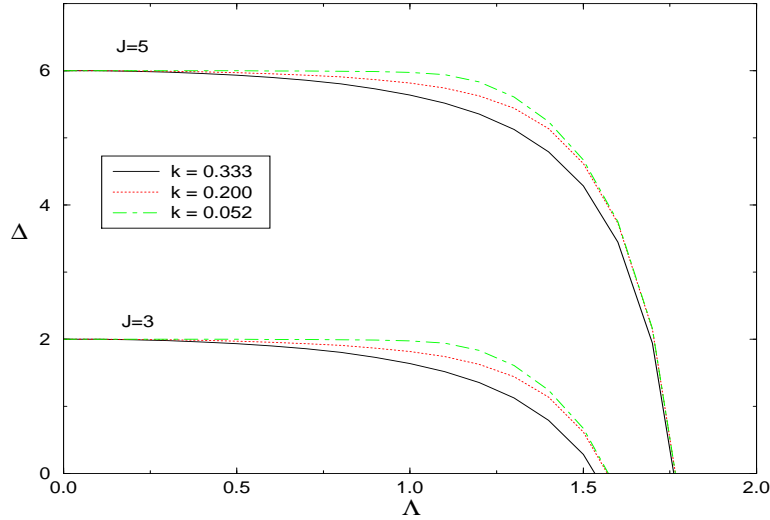


Fig. 4.7: Este gráfico mostra como o gap Δ depende da intensidade da impureza Λ para diferentes concentrações k e para diferentes valores do acoplamento J . Note que Δ diminui com o aumento da concentração para diferentes valores de J e Λ .

no caso anterior (ver eq. (4.16)), onde foi associada uma matriz (R^*), pertencente a uma representação diferente (dual). Esta é a principal razão pela diferença na estrutura das Hamiltonianas (4.1) e (4.24). A matriz de transferência é definida pela eq. (4.19), a partir da qual a Hamiltoniana é obtida através da eq. (4.20). A prova segue analogamente ao caso anterior, exceto que agora não utilizamos as propriedades (4.21), (4.22) e (4.23).

Finalmente, nós gostaríamos de mencionar que em ambos os casos, uma diferente parametrização para cada impureza poderia ser usada. Embora isto não mude consideravelmente a estrutura das Hamiltonianas e as EAB (ver , por exemplo [68], para um exemplo desta parametrização geral para o caso do modelo $t - J$ com impurezas), a existência de diferentes parâmetros faria com que a análise numérica se tornasse muito mais complexa.

Capítulo 5

Conclusões

5.1 Considerações finais

O tópico central desta tese foi o estudo de sistemas do tipo escadas de spin. Nos capítulos 1 e 2 apresentamos uma introdução e revisão das escadas de spin em geral, onde a importância e diversos resultados conhecidos na literatura foram discutidos, tanto do ponto de vista teórico quanto experimental.

No capítulo 3 definimos e investigamos um modelo de escada de spin anisotrópico integrável. Basicamente foi introduzido um novo modelo de escada de spin, que apresenta um parâmetro extra e que pode ser resolvido exatamente. Usando o método algébrico do ansatz de Bethe, as equações do ansatz de Bethe, o gap de spin e a expressão da energia foram derivados. Mostramos como o parâmetro anisotrópico afeta o diagrama de fase e a termodinâmica do modelo. Em particular, a curva da susceptibilidade magnética foi estudada em detalhe e o gap obtido através desta curva concorda muito bem com o gap analítico obtido através da solução exata do modelo. Foi discutida também a conexão com alguns compostos orgânicos, como por exemplo KCuCl_3 , $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ e $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$ e verificamos que os nossos resultados ajustam bem várias curvas experimentais. Finalmente mostramos que o modelo estudado é um caso particular de um modelo mais geral construído a partir de álgebras multiparamétricas que apresenta três parâmetros livres além dos acoplamentos.

No capítulo 4 foram definidos dois novos modelos de escadas de spin com impurezas. Apresentamos explicitamente como estas impurezas podem ser incorporadas aos modelos sem destruir a integrabilidade. As equações do ansatz de Bethe, a expressão da energia e o gap foram calculados para os dois modelos, e mostramos que nos dois casos existe uma transição de fase entre as regiões com gap e sem gap. No primeiro modelo a presença de impurezas não afeta o gap enquanto que no segundo modelo a presença das impurezas tem um papel fundamental tanto no gap quanto na transição de fase. Em particular, a redução do gap com o aumento da concentração de impurezas encontrada no modelo está qualitativamente de acordo com os resultados experimentais e numéricos que foram obtidos até o momento.

É importante salientar que tanto o modelo anisotrópico quanto os modelos com impurezas definidos nesta tese foram analisados utilizando condições de contorno periódicas e se reduzem ao modelo de escada de spin baseado na álgebra $SU(4)$ [16] para escolhas específicas dos parâmetros t e Λ (parâmetro anisotrópico e intensidade da impureza, respectivamente). Desta forma, extensões deste trabalho podem ser feitas em várias direções (ver abaixo).

Experimentalmente, a síntese de compostos com a estrutura de escadas está progredindo muito rapidamente, possibilitando cada vez mais que se testem os modelos teóricos existentes, inclusive os desta tese. Acreditamos, portanto que modelos de escadas de spin in-

tegráveis continuarão a despertar grande interesse nas áreas de Física-Matemática e Matéria Condensada.

5.2 Perspectivas para o futuro

Uma possível extensão deste trabalho seria uma generalização de métodos conhecidos em redes unidimensionais para tratar de modelos de escadas com condições de contorno mais gerais, especialmente no caso de escadas de spin com impurezas. Além disto, outros novos modelos de escadas de spin integráveis baseados em outras álgebras ou superálgebras (como a $SU(N|M)$ por exemplo) poderiam ser propostos.

Um outro tópico que poderia ser abordado é a formação de tubos de spin, tanto para o modelo anisotrópico, quanto para os modelos com impurezas. Outras propriedades termodinâmicas, como por exemplo o calor específico e a magnetização, para as quais já existem algumas curvas experimentais poderiam ser investigadas. Em particular, um cálculo analítico das propriedades termodinâmicas utilizando o ansatz de Bethe termodinâmico e/ou o método da matriz de transferência quântica proposto por A. Klümper seria outro importante projeto de pesquisa a ser abordado.

5.3 Trabalhos publicados/submetidos durante o período da tese

1– Integrable anisotropic spin-ladder model

A.P.Tonel, A. Foerster, J. Links and A.L. Malvezzi *Physical Review B* **64** (2002) 054420-054425.

2–Integrable variant of the one-dimensional Hubbard model

X-W.Guan, A. Foerster, J. Links, H-Q.Zhou, **A.P.Tonel** and R.H.Mckenzie *Journal of Mathematical Physics* **43** (2002) 3445-3457.

3– Integrable impurity spin ladder systems

A.P.Tonel, A. Foerster, X-W.Guan and J. Links *Journal of Physics A* **36**(2003) 1-12.

4–Integrable spin ladder systems

A. Foerster and **A.P.Tonel** aceito em *Journal of High Energy Physics: Proceedings of the Workshop on Integrable Theories, Solitons and Duality* (2003).

5–Integrable generalised spin ladder models based on the $SU(1|3)$ and $SU(3|1)$ algebras.

A.P.Tonel; A. Foerster, K. Hibberd and J. Links cond-mat/0105302, submetido para publicação.

6–Magnetic susceptibility of an integrable anisotropic spin ladder system

A.P.Tonel, S.R.Dahmen, A. Foerster, A.L.Malvezzi cond-mat/0302336, submetido para publicação.

7–Thermodynamical Bethe ansatz for the integrable $SU(4)$ spin ladder system with boundary impurities.

X-W. Guan, M. Batchelor, A. Foerster, **A.P.Tonel** em fase final de redação.

Apêndice A

Cálculo do gap para o modelo de escada de Heisenberg

Vamos mostrar, em linhas gerais, que o gap para o modelo de Heisenberg obtido em primeira ordem de perturbação é dado pela eq. (2.3).

Começamos redefinindo a Hamiltoniana (2.1) como

$$\bar{H} = \frac{H}{J_r} = H_0 + \alpha H_1 \quad (\text{A.1})$$

onde H_0 é a Hamiltoniana não perturbada, que leva em conta somente as interações nos degraus desacoplados, e é dado por

$$H_0 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^L \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\tau}_i. \quad (\text{A.2})$$

Já αH_1 é a Hamiltoniana perturbada ($\alpha = J_l/J_r \ll 1$), que apresenta somente interações ao longo das pernas e tem a forma

$$H_1 = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^L \{\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} + \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_{i+1}\}. \quad (\text{A.3})$$

Em primeiro lugar, devemos conhecer exatamente o conjunto de autovalores e autovetores da Hamiltoniana não perturbada (A.2). Para isso devemos resolver o seguinte problema de autovalores

$$H_0 |\psi_{k,n}^{(0)}\rangle = E_{k,n}^{(0)} |\psi_{k,n}^{(0)}\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Para ilustrar, vamos resolver o problema de autovalores acima para os casos de um e dois degraus e então generalizaremos para L degraus.

Para o caso $L = 1$, H_0 corresponde a uma rede de Heisenberg unidimensional com dois sítios e tem a forma matricial

$$H_0 = \frac{1}{4} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\tau}_1 = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}_1. \quad (\text{A.5})$$

Resolvendo o problema de autovalores encontramos energias autovetores

$$-\frac{3}{4} \quad |S \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\frac{1}{4} \quad |t^1 \rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$

$$\frac{1}{4} \quad |t^0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\frac{1}{4} \quad |t^{-1} \rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$$

A primeira energia não possui degenerescência, e seu autovetor correspondente é conhecido como singleto, já que possui spin total zero. Os outros autovetores fazem parte do tripleto e possuem spin total igual a 1, 0, -1, respectivamente.

Para $L = 2$, tem-se dois degraus que interagem muito fracamente tal que cada degrau pode ser considerado como quase independente¹ com solução idêntica ao caso $L = 1$, ou seja um singleto e um tripleto para cada degrau. Então devemos levar em conta a combinação desses autovetores, obtendo as seguintes combinações possíveis:

$$\begin{aligned} |S \rangle_1 \otimes |S \rangle_2 &= |SS \rangle & |S \rangle_1 \otimes |t^\sigma \rangle_2 &= |St^\sigma \rangle \\ |t^\sigma \rangle_1 \otimes |S \rangle_2 &= |t^\sigma S \rangle & |t^\sigma \rangle_1 \otimes |t^\sigma \rangle_2 &= |t^\sigma t^\sigma \rangle \end{aligned}$$

onde $\sigma = -1, 0, 1$.

Os autovalores de energia para cada um desses autovetores são encontrados tomando-se o valor esperado

$$\begin{aligned} \langle SS | H_0 | SS \rangle &= -\frac{3}{2} \text{ (sem degenerescência)} \\ \langle St^\sigma | H_0 | St^\sigma \rangle &= \langle t^\sigma S | H_0 | t^\sigma S \rangle = -\frac{1}{2} \text{ (com degenerescência 6)} \\ \langle t^\sigma t^\sigma | H_0 | t^\sigma t^\sigma \rangle &= \frac{1}{2} \text{ (com degenerescência 9)} \end{aligned}$$

Como podemos ver, a nossa Hamiltoniana possui um espectro de energia degenerado, isto é o espaço de Hilbert pode ser quebrado em subespaços. Em especial, neste caso, o

¹ estritamente, os degraus são independentes somente quando $J_l = 0$.

espaço de Hilbert tem dimensão $4^2 = 16 = 1 \oplus 6 \oplus 9$. Cada subespaço possui uma base ortonormal e, como é sabido da Mecânica Quântica, a combinação linear deles também são autovetores. Portanto, os autovetores tem a forma

$$|\psi_{k,n}^{(0)}\rangle = \sum_{i=1}^{g_k} C_i |\phi_{k,i}\rangle \tag{A.6}$$

onde C_i são constantes a serem determinadas, g_k é a degenerescência para cada um dos subespaços e $|\phi_{k,i}\rangle$ são cada um dos vetores que formam a base de cada subespaço. Então o problema de autovalores (A.4) tem solução

$E_{1,0}^{(0)} = -\frac{3}{2}(1)$ $E_{2,n}^{(0)} = -\frac{1}{2}(6)$ $E_{3,n}^{(0)} = \frac{1}{2}(9)$ o número entre parenteses representa a degenerescência de cada um dos subespaços.

Este mesmo raciocínio pode ser generalizado para L degraus. Para o cálculo do gap estamos interessados em saber quais são os autovalores de energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado. Veja que para L degraus a energia do estado fundamental se aproxima de $-3L/4$ (sem degenerescência) e o autovetor é o produto tensorial de singletos (um para cada degrau)

$$|SSSS\dots SSSSS\dots SSS\rangle .$$

A representação esquemática deste estado encontra-se na Fig.A.1.

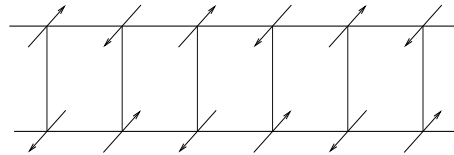


Fig. A.1: Representação esquemática para o estado fundamental. Este autoestado tem magnetização nula e um singlete em cada degrau.

Já o primeiro estado excitado tem uma energia aproximada de $-L/4$ e possui uma degenerescência de $3L$. O autovetor normalizado é uma combinação linear do tipo

$$\frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{i=1}^L C_i |SSSS\dots SSt_i^1SS\dots SSS\rangle ,$$

que significa dizer que existem singletos em todos os degraus, exceto num, em outras palavras significa destruir um singlete do estado fundamental e criar uma excitação de spin total igual a 1. Uma representação esquemática deste estado, mostrando um degrau com spin 1, é apresentada na Fig.A.2.

Agora queremos saber qual é o efeito da perturbação sobre estas duas energias em primeira ordem. A energia em primeira ordem é dada por

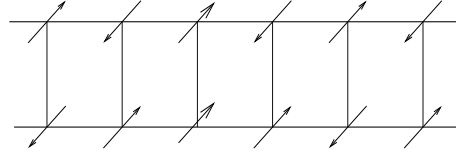


Fig. A.2: *Primeiro estado excitado com magnetização igual a 1. Este autoestado é obtido a partir do estado fundamental destruindo-se um dos singletos.*

$$E^{(1)} = E^{(0)} + \alpha \langle \psi_{kn}^{(0)} | H_1 | \psi_{kn}^{(0)} \rangle \quad (\text{A.7})$$

onde $E^{(0)}$ é a energia da Hamiltoniana não perturbada, α o parâmetro de perturbação e $\langle \psi_{kn}^{(0)} | H_1 | \psi_{kn}^{(0)} \rangle$ é o valor esperado da Hamiltoniana perturbada. Para facilitar os cálculos, já que sabemos todos os autovetores de H_0 , podemos fazer uma transformação de similaridade que deixa H_0 na forma diagonal e aplicar esta mesma transformação na Hamiltoniana perturbada. A construção desta matriz de similaridade é feita usando-se os autovetores de H_0 ordenados de acordo com os autovalores de energia, e é dada por

$$M = \begin{pmatrix} \langle \Psi_{g_1, n_1}^{(0)} | \\ \langle \Psi_{g_2, n_2}^{(0)} | \\ \langle \Psi_{g_3, n_3}^{(0)} | \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \langle \Psi_{g_k, n_k}^{(0)} | \end{pmatrix}$$

onde $M^{-1} = M^T$ é a transposta de M . Note que, para o caso de 2 degraus, a transformação $MH_0M^{-1} = \bar{H}_0$ tem a forma matricial diagonal

$$\{-3/2, -1/2, -1/2, -1/2, -1/2, -1/2, -1/2, 1/2, 1/2, 1/2, 1/2, 1/2, 1/2, 1/2, 1/2, 1/2\}.$$

Aplicando-se esta mesma transformação em H_1

$$\bar{H}_1 = MH_1M^{-1}$$

podemos ver que \bar{H}_1 pode ser dividido em duas partes

$$\bar{H}_1 = H_D + H'.$$

O H_D é uma matriz bloco diagonal que tem projeções nos mesmos subespaços

$$H_D = \sum_{k=1}^3 P_k H_1 P_k$$

enquanto H' tem projeções em subespaços diferentes

$$H' = \sum_{k \neq k'}^3 P_k H_1 P_{k'}.$$

Acima, P_k é o operador projetor em cada um dos subespaços, e a soma de todos os projetores deve ser igual a identidade

$$\sum_k P_k = 1.$$

Então a nossa Hamiltoniana (A.1) após a transformação de similaridade pode ser escrita como

$$\bar{H} = \bar{H}_0 + \alpha H_D + \alpha H'. \quad (\text{A.8})$$

Veja que, quando tomamos o valor esperado de \bar{H}_1 , H' não contribui para a energia em primeira ordem por construção, já que H' representa projeções em subespaços diferentes, portanto

$$\langle \psi_{k,n}^{(0)} | \bar{H}_1 | \psi_{k,n}^{(0)} \rangle = \langle \psi_{k,n}^{(0)} | H_D | \psi_{k,n}^{(0)} \rangle. \quad (\text{A.9})$$

Logo, a energia em primeira ordem é dada por $E^{(1)} = E^{(0)} + \alpha \langle \psi_{kn}^{(0)} | H_D | \psi_{kn}^{(0)} \rangle$.

A grande vantagem deste método é que H_D tem a forma bloco diagonal (cada bloco relacionado a uma energia), então em vez de diagonalizarmos a matriz H_D , podemos diagonalizar cada um dos blocos, em especial aqueles relacionados com a energia do estado fundamental e do primeiro estado excitado. Para dois degraus, o bloco de H_D relacionado a energia do estado fundamental é um número igual a zero, isto implica em dizer que não há contribuição em primeira ordem para o estado fundamental. Já para a energia do primeiro estado excitado existe um bloco e H_D com dimensão 6×6 (para L degraus tem uma dimensão de $3L \times 3L$). Devemos diagonalizar este bloco 6×6 e encontrar a contribuição de primeira ordem para o primeiro estado excitado. Conhecendo-se estas duas energias em primeira ordem, nós podemos calcular o gap, obtendo

$$\Delta = E_1^{(1)} - E_0^{(1)} \sim J_r - J_l + \mathcal{O}\left(\frac{J_l^2}{J_r}\right). \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Método algébrico do ansatz de Bethe para o modelo multiparamétrico

Neste apêndice vamos derivar as equações do ansatz de Bethe para o modelo multiparamétrico baseado na álgebra $SU(4)$ com três parâmetros livres (t_1, t_2, t_3) que se reduz ao modelo anisotrópico para a escolha particular $t_3 = 1$, $t_2 = 1/t$ e $t_1 = t$.

A técnica utilizada é o método algébrico do ansatz de Bethe com três níveis.

Começaremos apresentando a matriz R [76, 77]

$$R = \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc|cccc} a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t_1^{-1}b & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_2^{-1}b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & c & 0 & 0 & t_1b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_1b & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_3^{-1}b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & t_1^{-1}b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_2^{-1}b & 0 & 0 & c & 0 \\ - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - & - \\ 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_2b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_3b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c & 0 & 0 & t_2b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a \end{array} \right), \quad (\text{B.1})$$

onde $a = x + 1$, $b = x$, $c = 1$ e t_1, t_2, t_3 são três parâmetros livres..

Pode-se verificar facilmente que a matriz R acima satisfaz as Equações de Yang-Baxter

$$R_{12}(x-y)R_{13}(x)R_{23}(y) = R_{23}(y)R_{13}(x)R_{12}(x-y). \quad (\text{B.2})$$

Seguindo o método algébrico do ansatz de Bethe a matriz de monodromia para estes modelos T é definida como

$$T(x) = R_{01}(x)R_{02}(x) \dots R_{0L}(x) \quad (\text{B.3})$$

ou, da forma matricial

$$T(x) = \begin{pmatrix} T_1^1 & T_2^1 & T_3^1 & T_4^1 \\ T_1^2 & T_2^2 & T_3^2 & T_4^2 \\ T_1^3 & T_2^3 & T_3^3 & T_4^3 \\ T_1^4 & T_2^4 & T_3^4 & T_4^4 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

A matriz de transferência tem a forma

$$\tau(x) = \text{tr}T(x) = \sum_{\rho=1}^4 T_{\rho}^{\rho}. \quad (\text{B.5})$$

Os autovalores da matriz de transferência são dados por

$$\tau(x)\Psi = \left(T_1^1(x) + \sum_{\rho=2}^4 T_{\rho}^{\rho}(x) \right) \Psi. \quad (\text{B.6})$$

Utilizando a eq. (B.2), podemos mostrar que a matriz de monodromia acima obedece as Equações de Yang-Baxter (EYB)

$$R_{12}(x-y)T_{13}(x)T_{23}(y) = T_{23}(y)T_{13}(x)R_{12}(x-y), \quad (\text{B.7})$$

onde seguem as relações de comutação (para mais detalhes ver a referência [72])

$$T_{\rho}^{\rho}(x)T_{\sigma}^{\sigma}(y) = \frac{R_{\rho\rho}^{\rho\rho}(y-x)}{R_{\sigma\rho}^{\sigma\rho}(y-x)}T_{\sigma}^{\sigma}(y)T_{\rho}^{\rho}(x) + t.i. \quad (\text{B.8})$$

$$T_{\sigma}^{\rho}(x)T_{\gamma}^{\tau}(y) = \sum_{a,b} \frac{R_{\sigma b}^{a\gamma}(x-y)}{R_{\rho\tau}^{\sigma\tau}(x-y)}T_b^{\tau}(y)T_a^{\rho}(x) + t.i. \quad (\text{B.9})$$

B.1 Método algébrico do ansatz de Bethe

B.1.1 Primeiro nível

Os autovetores são dados por

$$\Psi = T_{\alpha_1}^1(x_1) \dots T_{\alpha_{M_1}}^1(x_{M_1})\Phi\Psi_{(1)}^{\{\alpha\}}, \quad \alpha_i = 2, 3, 4 \quad (\text{B.10})$$

acima

$$\Phi = \otimes_{i=1}^N \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_i$$

representa o pseudovácuo para o primeiro nível. Usando a relação (B.8), podemos calcular a primeira parte de (B.6)

$$T_1^1(x)\Psi = T_1^1(x)T_{\alpha_1}^1(x_1)\dots T_{\alpha_{M_1}}^1(x_{M_1})\Phi\Psi_{(1)}^{\{\alpha\}}, \quad (\text{B.11})$$

Note que usando a relação (B.8), podemos conduzir T_1^1 para à direita até chegar ao pseudovácuo e depois usar o fato de que o estado Φ é um autoestado de T_λ^λ . Portanto

$$T_1^1(x)\Phi = \left(R_{11}^{11}(x)\right)^N \Phi \quad (\text{B.12})$$

logo

$$T_1^1(x)\Psi = \Lambda_1(x)\Psi + t.i., \quad (\text{B.13})$$

com

$$\Lambda_1(x) = \left(R_{11}^{11}(x)\right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{11}^{11}(x_i - x)}{R_{\alpha_1}^{\alpha_1}(x_i - x)} \quad \alpha = 2, 3, 4. \quad (\text{B.14})$$

Para a segunda parte de (B.6) temos

$$\sum_{\rho=2}^4 T_\rho^\rho(x)\Psi = \sum_{\rho=2}^4 T_\rho^\rho(x)T_{\alpha_1}^1(x_1)\dots T_{\alpha_{M_1}}^1(x_{M_1})\Phi\Psi_{(1)}^{\{\alpha\}}. \quad (\text{B.15})$$

Agora usamos a relação de comutação (B.9). Aplicando uma vez temos

$$\begin{aligned} T_\rho^\rho(x)T_{\alpha_1}^1(x_1) \dots T_{\alpha_{M_1}}^1(x_{M_1})\Phi\Psi_{(1)}^{\{\alpha\}} &= \frac{R_{\rho b}^{a\alpha_1}(x - x_i)}{R_{\rho 1}^{\rho 1}(x - x_i)} \\ &T_b^1(x_1)T_a^\rho(x)T_{\alpha_2}^1(x_2)\dots T_{\alpha_{M_1}}^1(x_{M_1})\Phi\Psi_{(1)}^{\{\alpha\}} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

podemos aplicar a relação (B.9) $(M_1 - 1)$ vezes para obter

$$\begin{aligned} T_\rho^\rho(x)\Psi &= \prod_{i=1}^{M_1} \frac{1}{R_{\rho 1}^{\rho 1}(x - x_i)} \\ &R_{\rho b}^{a\alpha_1}(x - x_1)R_{ab_1}^{a_1\alpha_2}(x - x_2)\dots R_{a_{M_1-2}b_{M_1-1}}^{a_{M_1-1}\alpha_{M_1}}(x - x_{M_1}) \\ &T_b^1(x_1)T_{b_1}^1(x_2)\dots T_{b_{M_1-1}}^1(x_{M_1})T_{a_{M_1-1}}^\rho(x)\Phi\Psi_{(1)}^{\{\alpha\}}. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Agora definimos:

$$T_\rho^{a_{M_1-1}} = R_{a_{M_1-2}b_{M_1-1}}^{a_{M_1-1}\alpha_{M_1}}(x - x_{M_1})\dots R_{ab_1}^{a_1\alpha_2}(x - x_2)R_{\rho b}^{a\alpha_1}(x - x_1) \quad (\text{B.18})$$

onde

$$T_{a_{M_1-1}}^\rho \Phi = \delta_{a_{M_1-1}}^\rho \left(R_{\rho 1}^{\rho 1}(x) \right)^N \Phi. \quad (\text{B.19})$$

Portanto

$$\begin{aligned} T_\rho^\rho(x) \Psi &= \left(R_{\rho 1}^{\rho 1}(x) \right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{1}{R_{\rho 1}^{\rho 1}(x - x_i)} \\ &T_\rho^\rho(x; x_1 \dots x_{M_1}) T_b^1(x_1) \dots T_{b_{M_1-1}}^1(x_{M_1}) \Phi \Psi_{(1)}^{\{\alpha\}}. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Substituindo (B.20) em (B.15)

$$\sum_{\rho=2}^4 T_\rho^\rho(x) \Psi = T_b^1(x_1) \dots T_{b_{M_1-1}}^1(x_{M_1}) \Phi \tau_{(1)}(x; x_1 \dots x_{M_1}) \Psi_{(1)}^{\{b\}} \quad (\text{B.21})$$

onde definimos

$$\begin{aligned} \tau_{(1)}(x; x_1 \dots x_{M_1}) &= \sum_{\rho=2}^4 \hat{T}_\rho^\rho(x) \\ &= \sum_{\rho=2}^4 \left(R_{\rho 1}^{\rho 1}(x) \right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{1}{R_{\rho 1}^{\rho 1}(x - x_i)} T_\rho^\rho(x; x_1 \dots x_{M_1}) \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

Como sendo a nova matriz de transferência de um novo problema de autovalores.

B.1.2 Segundo nível

A matriz de monodromia para este novo problema é

$$T_{(1)} = \begin{pmatrix} T_2^2 & T_3^2 & T_4^2 \\ T_2^3 & T_3^3 & T_4^3 \\ T_2^4 & T_3^4 & T_4^4 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.23})$$

Os autovetores são definidos como

$$\Psi_{(1)}^{\{b\}} = T_{\beta_1}^2(y_2) \dots T_{\beta_{M_2}}^2(y_{M_2}) \Phi_{(1)} \Psi_{(2)}^{\{\beta\}}, \quad \beta_i = 3, 4 \quad (\text{B.24})$$

onde

$$\Phi_{(1)} = \otimes_{i=1}^{M_1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_i$$

representa o pseudovácuo para o segundo nível.

Os autovalores podem ser calculados por

$$\begin{aligned} \tau_{(1)} \Psi_{(1)}^{\{b\}} &= \left(T_2^2(x; x_1 \dots x_{M_1}) + \sum_{\rho=3}^4 T_\rho^\rho(x; x_1 \dots x_{M_1}) \right) \\ &T_{\beta_1}^2(y_1) \dots T_{\beta_{M_2}}^2(y_{M_2}) \Phi_{(1)} \Psi_{(2)}^{\{\beta\}}. \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Usando a relação (B.8), podemos calcular a primeira parte de (B.25)

$$T_2^2(x; x_1 \dots x_{M_1}) \Psi_{(1)} = \left(R_{21}^{21}(x) \right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{1}{R_{21}^{21}(x - x_i)} T_2^2(x; x_1 \dots x_{M_1}) \\ T_{\beta_1}^1(y_1) \dots T_{\beta_{M_2}}^1(y_{M_2}) \Phi_{(1)} \Psi_{(1)}^{\{\beta\}}, \quad \beta_i = 3, 4 \quad (\text{B.26})$$

Agora podemos usar a relação (B.9) para deslocar T_2^2 para à direita e usar o fato que

$$T_2^2(x; x_1 \dots x_{M_1}) \Phi_{(1)} = \prod_{i=1}^{M_1} R_{22}^{22}(x - x_i) \Phi_{(1)}, \quad (\text{B.27})$$

chegando ao seguinte resultado

$$T_2^2(x; x_1 \dots x_{M_1}) \Psi_{(1)} = \Lambda_2 \Psi_{(1)} + t.i., \quad (\text{B.28})$$

onde

$$\Lambda_2 = \left(R_{21}^{21}(x) \right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{22}^{22}(x - x_i)}{R_{21}^{21}(x - x_i)} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{R_{22}^{22}(y_j - x)}{R_{\beta_2}^{\beta_2}(y_j - x)} \quad \beta = 3, 4. \quad (\text{B.29})$$

Agora passamos a resolver a segunda parte de (B.25)

$$\sum_{\rho=3}^4 T_\rho^\rho(x; x_1 \dots x_{M_1}) \Psi_{(1)} = \sum_{\rho=3}^4 T_\rho^\rho(x; x_1 \dots x_{M_1}) \\ T_{\beta_1}^2(y_1) \dots T_{\beta_{M_2}}^2(y_{M_2}) \Phi_{(1)} \Psi_{(2)}^{\{\beta\}}. \quad (\text{B.30})$$

Usando a eq. (B.9)

$$= \sum_{\rho=3}^4 \left(R_{\rho 1}^{\rho 1}(x) \right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{1}{R_{\rho 1}^{\rho 1}(x - x_i)} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{1}{R_{\rho 2}^{\rho 2}(x - y_j)} T_{b_1}^2(y_1) \dots T_{b_{M_2}}^2(y_{M_2}) \\ R_{\rho b_1}^{a_1 \beta_1}(x - y_1) R_{a_2 b_2}^{a_2 \beta_2}(x - y_2) \dots R_{a_{M_2-1} b_{M_2}}^{a_{M_2-1} \beta_{M_2}}(x - y_{M_2-2}) \\ T_{a_{M_2}}^\rho(x; x_1 \dots x_{M_1}) \Phi_{(1)} \Psi_{(2)}^{\{\delta\}}. \quad (\text{B.31})$$

Mas

$$T_{a_{M_2}}^\rho(x; x_1 \dots x_{M_1}) \Phi_{(1)} = \delta_{a_{M_2}}^\rho \prod_{i=1}^{M_1} R_{\rho 2}^{\rho 2}(x - x_i) \quad (\text{B.32})$$

e então temos

$$= T_{b_1}^2(y_1) \dots T_{b_{M_2}}^2(y_{M_2}) \quad \Phi_{(1)} \sum_{\rho=3}^4 \left(R_{\rho 1}^{\rho 1}(x) \right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{\rho 2}^{\rho 2}(x - x_i)}{R_{\rho 1}^{\rho 1}(x - x_i)} \\ \prod_{j=1}^{M_2} \frac{1}{R_{\rho 2}^{\rho 2}(x - y_j)} T_\rho^\rho(x; x_i; y_1 \dots y_{M_2}) \Psi_{(2)}. \quad (\text{B.33})$$

Em (B.33) surge um novo problema de autovalores,

$$\sum_{\rho=3}^4 \hat{T}_{\rho}^{\rho}(x; x_i; y_1 \dots y_{M_2}) \Psi_{(1)} = T_{b_1}^2(y_1) \dots T_{b_{M_2}}^2(y_{M_2}) \Phi_{(1)} \times \sum_{\rho=3}^4 \hat{T}_{\rho}^{\rho}(x; x_i; y_1 \dots y_{M_2}) \Psi_{(2)}^{\{\delta\}}. \quad (\text{B.34})$$

onde definimos

$$\hat{T}_{\rho}^{\rho}(x; \{x_i\}; y_1 \dots y_{M_2}) = \left(R_{\rho 1}^{\rho 1}(x) \right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{\rho 2}^{\rho 2}(x - x_i)}{R_{\rho 1}^{\rho 1}(x - x_i)} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{1}{R_{\rho 2}^{\rho 2}(x - y_j)} T_{\rho}^{\rho}. \quad (\text{B.35})$$

B.1.3 Terceiro nível

A matriz de monodromia para este novo nível é

$$T_{(2)} = \begin{pmatrix} T_3^3 & T_4^3 \\ T_4^4 & T_4^4 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.36})$$

Os autovetores são dados por

$$\Psi_{(2)} = T_4^3(z_1) \dots T_4^3(z_{M_3}) \Phi_{(2)} \quad (\text{B.37})$$

onde

$$\Phi_{(2)} = \otimes_{i=1}^{M_2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_i$$

representa o pseudovácuo para o terceiro nível.

Os autovalores são dados por

$$\sum_{\rho=3}^4 \hat{T}_{\rho}^{\rho}(x; \{y_i\}) \Psi_{(2)} = \left(\hat{T}_3^3(x; \{y\}) + \hat{T}_4^4(x; \{y\}) \right) \Psi_{(2)}. \quad (\text{B.38})$$

Na primeira parte de (B.38) temos

$$\hat{T}_3^3 \Psi_{(2)} = \left(R_{31}^{31}(x) \right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{32}^{32}(x - x_i)}{R_{31}^{31}(x - x_i)} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{1}{R_{32}^{32}(x - y_j)} T_3^3(x; \{x_i\}; \{y_i\}) T_4^3(z_1) \dots T_4^3(z_{M_3}) \Phi_{(2)}. \quad (\text{B.39})$$

Usando a relação (B.8) e levando em conta que

$$T_3^3(x; \{x_i\}; \{y_i\}) \Phi_{(2)} = \prod_{j=1}^{M_2} R_{33}^{33}(x - y_j) \Phi_{(2)}, \quad (\text{B.40})$$

chegamos ao seguinte resultado

$$\begin{aligned} \hat{T}_3^3(x; \{x_i\}; \{y_i\})\Psi_{(2)} &= \left(R_{31}^{31}(x)\right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{32}^{32}(x-x_i)}{R_{31}^{31}(x-x_i)} \\ &\quad \prod_{j=1}^{M_2} \frac{R_{33}^{33}(x-y_j)}{R_{32}^{32}(x-y_j)} \prod_{k=1}^{M_3} \frac{R_{33}^{33}(z_k-x)}{R_{43}^{43}(z_k-x)} \Psi_{(2)} + t.i.. \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

Seguindo o mesmo procedimento anterior obtemos

$$\begin{aligned} \hat{T}_4^4(x; \{x_i\}; \{y_i\})\Psi_{(2)} &= \left(R_{41}^{41}(x)\right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{42}^{42}(x-x_i)}{R_{41}^{41}(x-x_i)} \\ &\quad \prod_{j=1}^{M_2} \frac{R_{43}^{43}(x-y_j)}{R_{42}^{42}(x-y_j)} \prod_{k=1}^{M_3} \frac{R_{44}^{44}(x-z_k)}{R_{43}^{43}(x-z_k)} \Psi_{(2)} + t.i.. \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

onde usamos

$$T_4^4(x; \{x_i\}; \{y_i\})\Phi_{(2)} = \prod_{j=1}^{M_2} R_{43}^{43}(x-y_j)\Phi_{(2)}. \quad (\text{B.43})$$

Substituindo (B.41) e (B.42) em (B.38) e voltando a expressão (B.20), após algumas manipulações algébricas o problema de autovalores da matriz de transferência

$$\tau\Psi = \Lambda\Psi$$

tem solução $\Lambda = \sum_{i=1}^4 \Lambda_i$ onde

$$\Lambda_1 = \left(R_{11}^{11}(x)\right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{11}^{11}(x_i-x)}{R_{\alpha 1}^{\alpha 1}(x_i-x)}, \quad \alpha = 2, 3, 4 \quad (\text{B.44})$$

$$\Lambda_2 = \left(R_{21}^{21}(x)\right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{22}^{22}(x-x_i)}{R_{21}^{21}(x-x_i)} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{R_{22}^{22}(y_j-x)}{R_{\beta 2}^{\beta 2}(y_j-x)}, \quad \beta = 3, 4 \quad (\text{B.45})$$

$$\Lambda_3 = \left(R_{31}^{31}(x)\right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{32}^{32}(x-x_i)}{R_{31}^{31}(x-x_i)} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{R_{33}^{33}(x-y_j)}{R_{32}^{32}(x-y_j)} \prod_{k=1}^{M_3} \frac{R_{33}^{33}(z_k-x)}{R_{43}^{43}(z_k-x)} \quad (\text{B.46})$$

$$\Lambda_4 = \left(R_{41}^{41}(x)\right)^N \prod_{i=1}^{M_1} \frac{R_{42}^{42}(x-x_i)}{R_{41}^{41}(x-x_i)} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{R_{43}^{43}(x-y_j)}{R_{42}^{42}(x-y_j)} \prod_{k=1}^{M_3} \frac{R_{44}^{44}(x-z_k)}{R_{43}^{43}(x-z_k)} \quad (\text{B.47})$$

Note na eq. (B.44) acima que temos um termo do tipo $R_{\alpha 1}^{\alpha 1}$, $\alpha = 2, 3, 4$. Dependendo do escolha de α , teremos um elemento diferente da matriz R . Assim, vamos definir N_α como o número de vezes que α aparece sendo que, $N_2 + N_3 + N_4 = M_1$ por construção. Procedemos similarmente nos outros casos (ver [72] para maiores detalhes).

As equações acima, após a substituição de cada elemento da matriz R , podem ser escritas como:

$$\Lambda_1 = t_1^{-N_2} t_2^{-N_3} t_3^{-N_4} a^N(x) \prod_{i=1}^{M_1} \frac{a(x_i - x)}{b(x_i - x)}, \quad M_1 = N_2 + N_3 + N_4 \quad (\text{B.48})$$

$$\Lambda_2 = t_1^{N-M_1} t_4^{-N_3} t_5^{-N_4} b^N(x) \prod_{i=1}^{M_1} \frac{a(x - x_i)}{b(x - x_i)} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{a(y_j - x)}{b(y_j - x)}, \quad M_2 = N_3 + N_4 \quad (\text{B.49})$$

$$\Lambda_3 = t_2^{N-M_1} t_4^{M_1-M_2} t_6^{-M_3} b^N(x) \prod_{j=1}^{M_2} \frac{a(x - y_j)}{b(x - y_j)} \prod_{k=1}^{M_3} \frac{a(z_k - x)}{b(z_k - x)} \quad M_3 = N_4 \quad (\text{B.50})$$

$$\Lambda_4 = t_3^{N-M_1} t_5^{M_1-M_2} t_6^{M_2-M_3} b^N(x) \prod_{k=1}^{M_3} \frac{a(x - z_k)}{b(x - z_k)}. \quad (\text{B.51})$$

Conhecendo-se os autovalores da matriz de transferência, podemos encontrar as equações do ansatz de Bethe.

B.2 Equações do ansatz de Bethe

Note que determinadas escolhas do argumento dos autovalores Λ_i podem apresentar pólos (ou divergências). Uma forma de obtermos as equações do ansatz de Bethe de um modo mais simples, é usar o fato de que o autovalor Λ deve ser uma quantidade finita. Usando este argumento nós podemos encontrar as equações como segue [78];

Para encontrar a primeira EAB, partimos da expressão

$$\frac{\Lambda(x)}{\Lambda_2(x)} = \frac{\Lambda_1(x)}{\Lambda_2(x)} + 1 + \frac{\Lambda_3(x)}{\Lambda_2(x)} + \frac{\Lambda_4(x)}{\Lambda_2(x)} \quad (\text{B.52})$$

tomando o limite $x \rightarrow x_l$, $l = 1 \dots M_1$, temos que

$$\Lambda_1 \rightarrow \infty$$

$$\Lambda_2 \rightarrow \infty$$

$$\Lambda_3 \rightarrow \textit{finito}$$

$$\Lambda_4 \rightarrow \textit{finito}$$

Portanto,

$$\frac{\Lambda(x_l)}{\Lambda_2(x_l)} = \frac{\Lambda_1(x_l)}{\Lambda_2(x_l)} + 1. \quad (\text{B.53})$$

Exigindo que o autovalor $\Lambda(x_l)$ seja uma quantidade finita, ficamos com

$$\frac{\Lambda_1(x_l)}{\Lambda_2(x_l)} = -1, \quad (\text{B.54})$$

que gera a primeira EAB.

As outras equações são obtidas de forma similar e encontramos:

a) para $x \rightarrow y_l, l = 1, \dots, M_2$ os limites

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &\rightarrow \textit{finito} \\ \Lambda_2 &\rightarrow \infty \\ \Lambda_3 &\rightarrow \infty \\ \Lambda_4 &\rightarrow \textit{finito}, \end{aligned}$$

e a segunda equação EAB é dada por

$$\frac{\Lambda_2(y_l)}{\Lambda_3(y_l)} = -1. \quad (\text{B.55})$$

b) para $x \rightarrow z_l, l = 1, \dots, M_3$ temos

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &\rightarrow \textit{finito} \\ \Lambda_2 &\rightarrow \textit{finito} \\ \Lambda_3 &\rightarrow \infty \\ \Lambda_4 &\rightarrow \infty, \end{aligned}$$

e a terceira equação de EAB é dada por

$$\frac{\Lambda_3(z_l)}{\Lambda_4(z_l)} = -1. \quad (\text{B.56})$$

Substituindo os valores de $\Lambda_i, i = 1, 2, 3, 4$ encontramos as equações (3.17) para o modelo multiparamétrico ou então as equações (3.4) para o modelo anisotrópico quando substituímos $t_1 = t, t_2 = 1/t$ e $t_3 = 1$.

B.3 Autovalores de energia

Os autovalores de energia são dados pela expressão (na ausência de um termo de potencial químico $J_r = 0$)

$$E = \frac{\partial}{\partial x} \ln(\Lambda(x))|_{x=0} = \Lambda(x)^{-1} \frac{\partial}{\partial x} \Lambda(x)|_{x=0}. \quad (\text{B.57})$$

Podemos observar dos autovalores da matriz de transferência dados pelas equações (B.48,B.49,B.50,B.51) que a energia somente depende de Λ_1 . Desenvolvendo os cálculos encontramos:

$$\Lambda(0) = A(t_1, t_2, t_3) \prod_{i=1}^{M_1} \frac{x_i + 1}{x_i}$$

$$\Lambda'(0) = A(t_1, t_2, t_3) L \prod_{i=1}^{M_1} \frac{x_i + 1}{x_i} + A(t_1, t_2, t_3) \sum_{i=1}^{M_1} \frac{1}{x_i^2} \prod_{j \neq i} \frac{x_j + 1}{x_j}$$

onde

$$A(t_1, t_2, t_3) = t_1^{-N_2} t_2^{-N_3} t_3^{-N_4} a^L(x).$$

Substituindo estes valores na eq.(B.57) encontramos

$$E = L + \sum_{i=1}^{M_1} \frac{1}{x_i(x_i + 1)}.$$

Fazendo a troca de variável $x_i \rightarrow ix_i - 1/2$ encontramos a contribuição da energia sem termo de potencial químico

$$E = L - \sum_{i=1}^{M_1} \frac{1}{x_i^2 + 1/4}.$$

A contribuição para energia devido ao termo de potencial químico é muito simples quando usamos a forma diagonal

$$H_{pq} = -2J_r \sum_{i=1}^L X_i^{00}$$

onde

$$X_i^{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_i. \quad (\text{B.58})$$

Portanto, a contribuição deste termo para a energia é $-2J_r N_0$, onde N_0 é o número total de singletos. Note que quantidade

$$L = N_0 + N_1 + N_2 + N_3$$

deve ser conservada. Portanto, $N_0 = L - M_1$ onde $M_1 = N_1 + N_2 + N_3$ é o número de tripletos existente no sistema. Desta forma a contribuição do potencial químico para a energia é

$$E_{pq} = -2J_r(L - M_1)$$

Desta forma, a energia total para o modelo é

$$E = - \sum_{i=1}^{M_1} \left(\frac{1}{x_i^2 + 1/4} - 2J_r \right) + (1 - 2J_r)L.$$

que é exatamente a expressão de energia apresentada na equação (3.3).

Apêndice C

Comparação entre a diagonalização exata e a solução das EAB para dois degraus

Neste apêndice, iremos comparar os resultados obtidos da diagonalização exata com as soluções das equações do ansatz de Bethe (EAB) para o caso do modelo anisotrópico com 2 degraus.

C.1 Diagonalização exata

Por simplicidade, usaremos a Hamiltoniana dada pela eq.(3.10). O cálculo que mostra a transformação de similaridade que leva a Hamiltoniana (3.1) para a Hamiltoniana(3.10), para o caso de 2 degraus, é mostrado explicitamente no **Apêndice D**. A Hamiltoniana total (3.10) para dois degraus, supondo condições de contorno periódicas, é dada por

$$\hat{H} = \hat{h}_{12} + \hat{h}_{21} - 2J_r P_q \quad (\text{C.1})$$

$$P_q := \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.4})$$

A diagonalização exata da Hamiltoniana acima (C.1), nos leva ao seguinte conjunto de autovalores e autovetores :

energias	multiplicidade	autovetores
$2-4J_r$	1	$(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
$-2J_r-(t+1/t)$	2	$(0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0, 0, 0)$ $(0, 1, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
$-2J_r+(t+1/t)$	2	$(0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0)$ $(0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
$(t+1/t)$	2	$(0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$ $(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1, 0)$
$-(t+1/t)$	2	$(0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$ $(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0, 0, 1, 0)$
$-2J_r+2$	1	$(0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
$-2J_r - 2$	1	$(0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$
2	4	$(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1)$ $(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$ $(0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0)$ $(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0)$
-2	1	$(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, -1, 0, 0, 0)$

Note que, na base que estamos utilizando, é obvio que o primeiro autovetor acima corresponde ao produto tensorial de dois singletos, um em cada degrau. Podemos verificar facilmente que na região $J_r > 1 + (t + 1/t)/2$ a menor energia é $E_0 = 2 - 4J_r$ e o primeiro estado excitado $E_1 = -2J_r - (t + 1/t)$.

Outra observação interessante é que no limite em que $t = 1$ e $J_r = 0$, que corresponde ao caso em que o modelo efetivamente apresenta simetria $SU(4)$, o espectro acima se reduz a:

energias	multiplicidade
2	10
-2	6

Este resultado está de acordo com a decomposição de Clebsh-Gordon esperada, $4 \otimes 4 = 10 \otimes 6$. A nível das equações do ansatz de Bethe, isto significa que só iremos encontrar duas soluções, já que é um fato bem conhecido que as soluções das EAB correspondem apenas aos vetores de peso máximo da álgebra

C.2 Soluções das EAB

Agora passaremos a resolver as EAB (3.4) para dois degraus. Queremos, de fato encontrar qual escolha dos números quânticos nos leva as energias E_0 e E_1 .

A escolha $M_1 = M_2 = M_3 = 0$ implica diretamente em que não existem as equações do ansatz de Bethe o que corresponde a um estado com energia igual $E_0 = 2 - 4J_r$ (ver eq. (3.18) para energia). Para a escolha $(M_1 = 1, M_2 = M_3 = 0)$ temos que resolver a seguinte EAB:

$$\left(\frac{\lambda - i/2}{\lambda + i/2}\right)^2 = t^{-2},$$

que dá como resultado

$$\lambda = \frac{it - 1}{2t + 1}.$$

A energia para este estado é $E_1 = -2J_r - (t + 1/t)$.

C.3 Comparação

Na tabela abaixo fazemos a comparação para os dois casos

D.exata	EAB
$2-4J_r$	$2-4J_r$
$-2J_r-(t+1/t)$	$-2J_r-(t+1/t)$

Desta forma acabamos de mostrar que os dois métodos produzem os mesmos resultados. E que, para uma determinada região a energia $2 - 4J_r$ realmente representa o estado fundamental e que a energia $-2J_r - (t + 1/t)$ é a energia do primeiro estado excitado.

Tendo estas energias, a do estado fundamental e a do primeiro estado excitado, nós podemos facilmente encontrar o gap de spin. Por definição o gap é dado por

$$\Delta = E_1 - E_0 = 2(J_r - 1 - \frac{1}{2}(t + \frac{1}{t})).$$

Apêndice D

Transformação de similaridade

Neste apêndice vamos mostrar que as hamiltonianas (3.1) e (3.10) estão relacionados por uma transformação de similaridade, isto é,

$$\hat{H} = BHB^{-1}$$

onde $B = A_1 \otimes A_2 \otimes \dots \otimes A_L$ onde A é a matriz que realiza a seguinte transformação de base

$$\begin{aligned} |\uparrow, \uparrow\rangle &\rightarrow |0\rangle \equiv 1/\sqrt{2}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle), \\ |\uparrow, \downarrow\rangle &\rightarrow |1\rangle \equiv |\uparrow, \uparrow\rangle, \\ |\downarrow, \uparrow\rangle &\rightarrow |2\rangle \equiv 1/\sqrt{2}(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle), \\ |\downarrow, \downarrow\rangle &\rightarrow |3\rangle \equiv |\downarrow, \downarrow\rangle. \end{aligned} \tag{D.1}$$

A base 1 á esquerda, normalmente é usada para descrever sistemas unidimensionais. A base 2 á direita representa o conjunto de autovetores de uma interação do tipo Heisenberg tomados sobre um degrau da escada (dois sítios numa XXX): $|0\rangle$ corresponde ao singleto e $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ representam as três componentes de um tripleto.

Explicitamente, temos

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{D.2}$$

e que tem uma inversa dada por

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{D.3}$$

Esta transformação não altera a forma matricial do primeiro termo da Hamiltoniana, enquanto que leva a segundo termo da Hamiltoniana (termo do potencial químico) para uma forma diagonal [16].

Apêndice E

Derivação da Hamiltoniana com impurezas no espaço dual

Neste apêndice vamos apresentar em detalhes a derivação da Hamiltoniana do modelo de escada com impurezas do tipo I (4.1).

Vamos também mostrar que o termo de potencial químico comuta com o restante da Hamiltoniana. Começamos mostrando que as matrizes R (4.11) e R^* (4.12) podem ser escritas de forma compacta como

$$R_{ij}(u) = -\frac{u}{2}I_{ij} + P_{ij} \quad (\text{E.1})$$

$$R_{ij}^*(u) = I_{ij} + \frac{u}{2}Q_{ij} \quad (\text{E.2})$$

onde I_{ij} é o operador identidade (16×16) e

$$P_{ij}(u) = \sum_{\alpha, \beta=0}^3 X_i^{\alpha\beta} X_j^{\beta\alpha} \quad (\text{E.3})$$

$$Q_{ij}(u) = \sum_{\alpha, \beta=0}^3 X_i^{\alpha\beta} X_j^{\alpha\beta} \quad (\text{E.4})$$

aqui $X_i^{\alpha\beta}$ são os operadores de Hubbard. Vamos inicialmente considerar apenas uma impureza situada em \bar{i} .

A matriz de monodromia é dada por

$$T(u, \lambda) = R_{01}(u) \dots R_{0i}(u) R_{0\bar{i}}^*(u - \lambda) R_{0i+1}(u) \dots R_{0N}(u) \quad (\text{E.5})$$

ou de uma forma mais compacta

$$T(u, \lambda) = \prod_{k=1}^i R_{0k}(u) R_{0\bar{i}}^*(u - \lambda) \prod_{l=i+1}^N R_{0l}(u). \quad (\text{E.6})$$

A Hamiltoniana é dada pela definição

$$H = \frac{\partial}{\partial u} \ln(\tau(u, \lambda))|_{u=0} = \tau^{-1}(0, \lambda) \tau'(0, \lambda). \quad (\text{E.7})$$

onde $\tau(u, \lambda)$ é a matriz de transferência que é dada pelo traço da matriz de monodromia.

Então temos que..

$$\tau(0, \lambda) = \prod_{k=1}^i P_{0k}(u) R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) \prod_{l=i+1}^N P_{0l}. \quad (\text{E.8})$$

logo

$$[\tau(0, \lambda)]^{-1} = \prod_{k=1}^i P_{0k} [R_{0\bar{i}}^*(-\lambda)]^{-1} \prod_{l=i+1}^N P_{0l}. \quad (\text{E.9})$$

já que $\tau(0, \lambda) \cdot [\tau(0, \lambda)]^{-1} = 1$. Acima usamos usamos o fato de que $R_{ij}(0) = P_{ij}$.

Cálculo da derivada de $\tau(u, \lambda)$ em função de u para $u = 0$

$$\begin{aligned} \tau'(0, \lambda) &= \sum_{k=1}^{i-1} R'_{0k}(0) \prod_{j \neq k} P_{0j} P_{0i} R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) \prod_{l=i+1}^N P_{0l} \\ &+ \prod_{k=1}^{i-1} P_{0k} P_{0i} P_{0i} R'_{0i}(0) R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) \prod_{l=i+1}^N P_{0l} \\ &+ \prod_{k=1}^i P_{0k} R_{0\bar{i}}^{*'}(-\lambda) \prod_{l=i+1}^N P_{0l} \\ &+ \prod_{k=1}^i P_{0k} R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) P_{0i+1} P_{0i+1} R'_{0i+1}(0) P_{0i+1} P_{0i+1} \prod_{l=i+2}^N P_{0l} \\ &+ \prod_{k=1}^i P_{0k} R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) P_{0i+1} \sum_{l=i+2}^N R'_{0l}(0) \prod_{j \neq l} P_{0j} \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

$$\begin{aligned} \tau'(0, \lambda) &= -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{i-1} \prod_{j \neq k} P_{0j} P_{0i} R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) \prod_{l=i+1}^N P_{0l} \\ &+ \prod_{k=1}^i P_{0k} h_{0i} R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) \prod_{l=i+1}^N P_{0l} \\ &+ \prod_{k=1}^i P_{0k} R_{0\bar{i}}^{*'}(-\lambda) \prod_{l=i+1}^N P_{0l} \\ &+ \prod_{k=1}^i P_{0k} R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) h_{0i+1} \prod_{l=i+1}^N P_{0l} \\ &- \frac{1}{2} \prod_{k=1}^i P_{0k} R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) P_{0i+1} \sum_{l=i+2}^N \prod_{j \neq l} P_{0j} \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

onde usamos

$$P_{0i} \cdot P_{0i} = I_{0i}$$

$$P_{0i+1} \cdot h_{0i+1} \cdot P_{0i+1} = h_{0i+1}$$

$$R'_{0i}(0) = -\frac{1}{2}I_{0i}$$

o símbolo (\prime) representa a derivada em função de u . Assim, substituindo as expressões (E.9) e (E.11) em (E.7), encontramos

$$\begin{aligned} H &= \tau^{-1}(0, \lambda)\tau'(0, \lambda) \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{i-1} P_{0k} - \frac{1}{2}\sum_{k=i+2}^N P_{0k} + h_{0i} \\ &+ R_{0\bar{i}}^*(-\lambda)[R_{0\bar{i}}^*(-\lambda)]^{-1} + R_{0\bar{i}}^*(-\lambda)h_{0i+1}[R_{0\bar{i}}^*(-\lambda)]^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

As seguintes expressões serão utilizadas no que segue

$$h_{0i} = -\frac{1}{2}P_{0i}$$

$$R_{0\bar{i}}^*(-\lambda) = I_{0i} - \frac{2}{\lambda}Q_{0i}, \quad [R_{0\bar{i}}^*(-\lambda)]' = -\frac{2}{\lambda^2}Q_{0i}$$

$$[R_{0\bar{i}}^*(-\lambda)]^{-1} = I_{0i} + \frac{2}{\lambda - 8}Q_{0i}.$$

Agora a Hamiltoniana pode ser escrita como

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{i-1} P_{0k} - \frac{1}{2}\sum_{k=i+2}^N P_{0k} - \frac{1}{2}P_{0i} \\ &- \left[\frac{2}{\lambda^2}Q_{0\bar{i}} \left[I_{0\bar{i}} + \frac{2}{\lambda - 8}Q_{0\bar{i}} \right] - \frac{1}{2} \left[I_{0\bar{i}} - \frac{2}{\lambda}Q_{0\bar{i}} \right] \left[P_{0i+1} \right] \left[I_{0\bar{i}} + \frac{2}{\lambda - 8}Q_{0\bar{i}} \right] \right] \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{i-1} P_{0k} - \frac{1}{2}\sum_{k=i+2}^N P_{0k} - \frac{1}{2}P_{0i} - \frac{2}{\lambda^2}Q_{0\bar{i}} - \frac{4}{\lambda^2(\lambda - 8)}Q_{0\bar{i}}Q_{0\bar{i}} \\ &- \frac{1}{2} \left[P_{0i+1} - \frac{2}{\lambda}Q_{0\bar{i}}P_{0i+1} \right] \left[I_{0\bar{i}} + \frac{2}{\lambda - 8}Q_{0\bar{i}} \right] \end{aligned} \quad (\text{E.14})$$

$$\begin{aligned}
 H &= -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{i-1} P_{0k} - \frac{1}{2} \sum_{k=i+2}^N P_{0k} - \frac{1}{2} P_{0i} - \frac{1}{2} P_{0i+1} \\
 &- \frac{2}{\lambda^2} Q_{0\bar{i}} - \frac{4}{\lambda^2(\lambda-8)} Q_{0\bar{i}} Q_{0\bar{i}} - \frac{1}{(\lambda-8)} P_{0i+1} Q_{0\bar{i}} \\
 &+ \frac{1}{\lambda} Q_{0\bar{i}} P_{0i+1} + \frac{2}{\lambda(\lambda-8)} Q_{0\bar{i}} P_{0i+1} Q_{0\bar{i}}.
 \end{aligned} \tag{E.15}$$

Antes de proseguir, vamos provar as seguintes propriedades:

$$Q_{i,\bar{i}} \cdot Q_{i,\bar{i}} = 4Q_{i,\bar{i}} \tag{E.16}$$

$$Q_{i,\bar{i}} \cdot P_{i,i+1} \cdot Q_{i,\bar{i}} = Q_{i,\bar{i}} \tag{E.17}$$

Para a primeira propriedade (E.16) temos que resolver o produto matricial que surge a partir da interação entre dois degraus. O elemento matricial deste produto é dado por

$$(Q_{i,\bar{i}} \cdot Q_{i,\bar{i}})_{a_2, b_2}^{a, b} = \sum_{a_1, b_1=1}^4 (Q_{i,\bar{i}})_{a_1, b_1}^{a, b} (Q_{i,\bar{i}})_{a_2, b_2}^{a_1, b_1}. \tag{E.18}$$

Mas note que os elementos da matriz $Q_{i,\bar{i}}$ podem ser escritos na forma

$$(Q_{i,\bar{i}})_{a_1, b_1}^{a, b} = \delta_b^a \delta_{b_1}^{a_1}. \tag{E.19}$$

Substituindo (E.19) em (E.18) temos

$$(Q_{i,\bar{i}} \cdot Q_{i,\bar{i}})_{a_2, b_2}^{a, b} = \sum_{a_1, b_1=1}^4 \delta_b^a \delta_{b_1}^{a_1} \delta_{b_1}^{a_1} \delta_{b_2}^{a_2} = \delta_b^a \delta_{b_2}^{a_2} \sum_{a_1, b_1=1}^4 \delta_{b_1}^{a_1} \delta_{b_1}^{a_1} \tag{E.20}$$

$$(Q_{i,\bar{i}} \cdot Q_{i,\bar{i}})_{a_2, b_2}^{a, b} = 4\delta_b^a \delta_{b_2}^{a_2} = 4(Q_{i,\bar{i}})_{a_2, b_2}^{a, b}. \tag{E.21}$$

Logo podemos concluir que

$$Q_{i,\bar{i}} \cdot Q_{i,\bar{i}} = 4Q_{i,\bar{i}}.$$

Para provar a segunda propriedade (E.17) temos que considerar a interação entre três degraus e resolver o produto matricial

$$(Q_{i,\bar{i}} \cdot P_{i,i+1} \cdot Q_{i,\bar{i}})_{a_3, b_3, c_3}^{a, b, c} = \sum_{a_1, b_1, c_1=1}^4 \sum_{a_2, b_2, c_2=1}^4 (Q_{i,\bar{i}})_{a_1, b_1, c_1}^{a, b, c} (P_{i,i+1})_{a_2, b_2, c_2}^{a_1, b_1, c_1} (Q_{i,\bar{i}})_{a_3, b_3, c_3}^{a_2, b_2, c_2}. \tag{E.22}$$

Os elementos da matriz $P_{i,i+1}$ podem ser escritos como

$$(P_{i,i+1})_{a_2, b_2, c_2}^{a_1, b_1, c_1} = \delta_{c_2}^{a_1} \delta_{b_2}^{b_1} \delta_{a_1}^{c_1}. \tag{E.23}$$

Substituindo (E.19) e (E.23) em (E.22) temos

$$(Q_{i,\bar{i}} \cdot P_{i,i+1} \cdot Q_{i,\bar{i}})_{a_3,b_3,c_3}^{a,b,c} = \sum_{a_1,b_1,c_1=1}^4 \sum_{a_2,b_2,c_2=1}^4 (\delta_b^a \delta_{b_1}^{a_1} \delta_{c_1}^c) (\delta_{c_2}^{a_1} \delta_{b_2}^{b_1} \delta_{a_2}^{c_1}) (\delta_{b_2}^{a_2} \delta_{b_3}^{a_3} \delta_{c_3}^{c_2}) \quad (\text{E.24})$$

$$(Q_{i,\bar{i}} \cdot P_{i,i+1} \cdot Q_{i,\bar{i}})_{a_3,b_3,c_3}^{a,b,c} = \sum_{b_1=1}^4 \sum_{a_2,c_2=1}^4 \delta_b^a \delta_{c_2}^{b_1} \delta_{a_2}^c \delta_{a_2}^{b_1} \delta_{b_3}^{a_3} \delta_{c_3}^{c_2} = \sum_{b_1=1}^4 \delta_b^a \delta_{c_3}^{b_1} \delta_{b_1}^c \delta_{b_3}^{a_3} = \delta_b^a \delta_{b_3}^{a_3} \delta_{c_3}^c = (Q_{i,\bar{i}})_{a_3,b_3,c_3}^{a,b,c}, \quad (\text{E.25})$$

que na forma matricial pode ser escrito como

$$Q_{i,\bar{i}} \cdot P_{i,i+1} \cdot Q_{i,\bar{i}} = Q_{i,\bar{i}} \quad (\text{E.26})$$

Substituindo esta duas propriedades na eq. (E.15) pode ser simplificada.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N P_{0k} - \left(\frac{2}{\lambda^2} + \frac{16}{\lambda^2(\lambda-8)} - \frac{2}{\lambda(\lambda-8)} \right) Q_{0\bar{i}} - \frac{1}{\lambda-8} P_{0i+1} Q_{0\bar{i}} + \frac{1}{\lambda} Q_{0\bar{i}} P_{0i+1} \quad (\text{E.27})$$

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N P_{0k} - \frac{1}{\lambda-8} P_{0i+1} Q_{0\bar{i}} + \frac{1}{\lambda} Q_{0\bar{i}} P_{0i+1} \quad (\text{E.28})$$

onde

$$h_{ij} = -\frac{1}{2} P_{ij}.$$

Assim

$$H = \sum_{i=1}^N h_{ij} + \frac{2}{\lambda-8} h_{i,i+1} Q_{i\bar{i}} - \frac{2}{\lambda} Q_{i\bar{i}} h_{i,i+1} \quad (\text{E.29})$$

Os cálculos efetuados acima podem ser facilmente generalizados para o caso “ l ” impurezas não-vizinhas. Neste caso, temos

$$H = \sum_{i=1}^N h_{ij} + \sum_{\bar{i} \in I}^l h_{i,\bar{i},i+1}^{imp} \quad (\text{E.30})$$

onde

$$h_{i,\bar{i},i+1}^{imp} = \frac{2}{\lambda-8} h_{i,i+1} Q_{i,\bar{i}} - \frac{2}{\lambda} Q_{i,\bar{i}} h_{i,i+1} \quad (\text{E.31})$$

e

$$h_{i,i+1} = \sum_{\alpha,\beta=0}^3 X_i^{\alpha\beta} \otimes X_{i+1}^{\beta\alpha}. \quad (\text{E.32})$$

Na eq.(E.30) nós podemos adicionar um termo de potencial químico do tipo

$$P_q = -2J \sum_{i=1}^N X_i^{00} + 2J \sum_{\bar{i}=1}^l X_{\bar{i}}^{00}, \quad (\text{E.33})$$

desde que

$$[H, P_q] = 0. \quad (\text{E.34})$$

Se esta condição for satisfeita, então nós podemos efetuar diagonalização simultânea. Para que a relação de comutação acima (E.34) se cumpra, basta mostrar que

$$\left[h_{i,i+1} + h_{i,\bar{i},i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00} \right] = 0 \quad (\text{E.35})$$

$$\left[h_{i,i+1} + h_{i,\bar{i},i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00} \right] = \left[h_{i,i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00} \right] + \left[h_{i,\bar{i},i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00} \right] \quad (\text{E.36})$$

Resolvendo o primeiro termo da eq.(E.35)

$$\left[h_{i,i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00} \right] = \left[h_{i,i+1}, X_i^{00} + X_{i+1}^{00} \right] - \left[h_{i,i+1}, X_{\bar{i}}^{00} \right] \quad (\text{E.37})$$

veja que o segundo comutador do lado direito da equação acima é zero, pois os operadores atuam em espaços diferentes. Mas

$$\begin{aligned} \left[h_{i,i+1}, X_i^{00} + X_{i+1}^{00} \right] &= \left[\sum_{\alpha,\beta=0}^3 X_i^{\alpha\beta} \otimes X_{i+1}^{\beta\alpha}, X_i^{00} + X_{i+1}^{00} \right] \\ &= \sum_{\alpha,\beta=0}^3 \left(X_i^{\alpha\beta} \cdot X_i^{00} - X_i^{00} \cdot X_i^{\alpha\beta} \right) \otimes X_{i+1}^{\beta\alpha} \\ &+ \sum_{\alpha,\beta=0}^3 X_i^{\beta\alpha} \otimes \left(X_{i+1}^{\beta\alpha} \cdot X_{i+1}^{00} - X_{i+1}^{00} \cdot X_{i+1}^{\beta\alpha} \right) \end{aligned} \quad (\text{E.38})$$

agora lembramos que

$$X_i^{\alpha\beta} \cdot X_i^{00} = X_i^{\alpha 0}.$$

Então temos que

$$\begin{aligned} \left[h_{i,i+1}, X_i^{00} + X_{i+1}^{00} \right] &= \sum_{\alpha=0}^3 X_i^{\alpha 0} \otimes X_{i+1}^{0\alpha} - \sum_{\beta=0}^3 X_i^{0\beta} \otimes X_{i+1}^{\beta 0} \\ &+ \sum_{\beta=0}^3 X_i^{0\beta} \otimes X_{i+1}^{\beta 0} - \sum_{\alpha=0}^3 X_i^{\alpha 0} \otimes X_{i+1}^{0\alpha} = 0 \end{aligned} \quad (\text{E.39})$$

Agora resolveremos o segundo termo da eq. (E.35)

$$\begin{aligned}
 [h_{i,\bar{i},i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}] &= [Bh_{i,i+1}Q_{i,\bar{i}} + CQ_{i,\bar{i}}h_{i,i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}] \\
 &= B[h_{i,i+1}Q_{i,\bar{i}}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}] \\
 &\quad + C[Q_{i,\bar{i}}h_{i,i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}]
 \end{aligned} \tag{E.40}$$

acima $B = \frac{2}{\lambda-8}$ e $C = \frac{-2}{\lambda}$. Resolvendo a eq. acima

$$\begin{aligned}
 [h_{i,\bar{i},i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}] &= Bh_{i,i+1}[Q_{i,\bar{i}}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}] \\
 &\quad + B[h_{i,i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}]Q_{i,\bar{i}} \\
 &\quad + CQ_{i,\bar{i}}[h_{i,i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}] \\
 &\quad + C[Q_{i,\bar{i}}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}]h_{i,i+1}
 \end{aligned} \tag{E.41}$$

acima usamos a seguinte propriedade

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B.$$

Mas

$$[Q_{i,\bar{i}}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}] = [Q_{i,\bar{i}}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00}] + [Q_{i,\bar{i}}, X_{i+1}^{00}] = 0 \tag{E.42}$$

e

$$[h_{i,i+1}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} + X_{i+1}^{00}] = [h_{i,i+1}, X_i^{00} + X_{i+1}^{00}] - [h_{i,i+1}, X_{\bar{i}}^{00}] = 0 \tag{E.43}$$

já que

$$\begin{aligned}
 [Q_{i,\bar{i}}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00}] &= \left[\sum_{\alpha,\beta=0}^3 X_i^{\alpha\beta} \otimes X_{\bar{i}}^{\alpha\beta}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00} \right] \\
 &= \sum_{\alpha,\beta=0}^3 (X_i^{\alpha\beta} \cdot X_i^{00} - X_i^{00} \cdot X_i^{\alpha\beta}) \otimes X_{\bar{i}}^{\alpha\beta} \\
 &\quad - \sum_{\alpha,\beta=0}^3 X_i^{\alpha\beta} \otimes (X_{\bar{i}}^{\alpha\beta} \cdot X_{\bar{i}}^{00} - X_{\bar{i}}^{00} \cdot X_{\bar{i}}^{\alpha\beta})
 \end{aligned} \tag{E.44}$$

$$\begin{aligned}
 [Q_{i,\bar{i}}, X_i^{00} - X_{\bar{i}}^{00}] &= \sum_{\alpha=0}^3 X_i^{\alpha 0} \otimes X_{\bar{i}}^{\alpha 0} - \sum_{\beta=0}^3 X_i^{0\beta} \otimes X_{\bar{i}}^{0\beta} \\
 &\quad - \sum_{\alpha=0}^3 X_i^{\alpha 0} \otimes X_{\bar{i}}^{\alpha 0} + \sum_{\beta=0}^3 X_i^{0\beta} \otimes X_{\bar{i}}^{0\beta} = 0
 \end{aligned} \tag{E.45}$$

portanto $[H, P_q] = 0$.

Apêndice F

Método Algébrico do Ansatz de Bethe para o modelo com impurezas

O objetivo deste apêndice é encontrar as equações do ansatz de Bethe e as energias para o modelo de impureza (cap.4). Para este fim, vamos basicamente generalizar os cálculos realizados em [69, 70].

Essencialmente neste apêndice nós desejamos resolver o problema de autovalores da matriz de transferência

$$\tau\Psi = \lambda\Psi. \quad (\text{F.1})$$

A matriz $R(4.11)$ atua num produto tensorial de dois espaços quadrimensinais $V \otimes V$ enquanto a matriz R^* (4.12) atua num produto tensorial do tipo $V \otimes W$, onde W é um espaço quadridimensional de uma representação dual. As matrizes acima satisfazem as seguintes equações de Yang-Baxter

$$R_{12}(u-v)R_{13}^*(u)R_{23}^*(v) = R_{23}^*(v)R_{13}^*(u)R_{12}(u-v) \quad (\text{F.2})$$

atuando sobre um espaço $V \otimes V \otimes W$.

O modelo de impureza é construído sobre um espaço quântico genérico representado por V e o espaço da impureza W .

Supondo que o modelo pode ter mais de uma impureza, adotamos a seguinte definição $I = \{p_1, p_2, \dots, p_l\}$, $1 \leq p_i \leq N$ e

$$X = \bigotimes_{i=1}^N X_i$$

onde

$$\begin{aligned} X_i &= V && \text{if } i \notin I, \\ X_i &= V \otimes W && \text{if } i \in I. \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

Em outras palavras para cada $i \in I$ nós acoplamos uma impureza dentro da rede que estará situada entre os sítios i e $i + 1$. L é o número total de degraus ($L = N + l$) e l é o número total de impurezas.

Agora definimos a matriz de monodromia

$$T(u) = \bar{R}_{01}(u)\bar{R}_{02}(u)\dots\bar{R}_{0N}(u)$$

onde temos

$$\begin{aligned} \bar{R}_{0i}(u) &= R_{0i}(u) && \text{para } i \notin I, \\ \bar{R}_{0i}(u) &= R_{0i'}(u)R_{0i''}^*(u - \Lambda) && \text{para } i \in I \end{aligned}$$

ou na forma matricial

$$T(u) = \begin{pmatrix} A & B_2 & B_3 & B_4 \\ C_2 & D_{22} & D_{23} & D_{24} \\ C_3 & D_{32} & D_{33} & D_{34} \\ C_4 & D_{42} & D_{43} & D_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & \vec{B} \\ \vec{C} & \hat{D} \end{pmatrix}. \quad (\text{F.4})$$

cujos elementos são operadores que atuam no espaço quântico X . A matriz $T(u)$ satisfaz a álgebra de Yang-Baxter

$$R_{12}(u - v)T_{13}(u)T_{23}(v) = T_{23}(v)T_{13}(u)R_{12}(u - v) \quad (\text{F.5})$$

Desta equação nós podemos obter as seguintes relações de comutação

$$\vec{B}(x) \otimes \vec{B}(y) = \left(\vec{B}(y) \otimes \vec{B}(x) \right) \cdot R^{(1)}(x - y) \quad (\text{F.6})$$

$$A(x)\vec{B}(y) = \frac{a(y-x)}{b(y-x)}\vec{B}(y)A(x) - \frac{c(y-x)}{b(y-x)}\vec{B}(x)A(y) \quad (\text{F.7})$$

$$\hat{D}(x) \otimes \vec{B}(y) = \frac{a(x-y)}{b(x-y)} \left(\vec{B}(y) \otimes \hat{D}(x) \right) \cdot R^{(1)}(x - y) - \frac{c(x-y)}{b(x-y)}\vec{B}(x) \otimes \hat{D}(y) \quad (\text{F.8})$$

onde

$$R^{(1)}(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{b} & 0 & | & \bar{c} & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{b} & | & 0 & 0 & 0 & | & \bar{c} & 0 & 0 \\ - & - & - & | & - & - & - & | & - & - & - \\ 0 & \bar{c} & 0 & | & \bar{b} & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 1 & 0 & | & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & \bar{b} & | & 0 & \bar{c} & 0 \\ - & - & - & | & - & - & - & | & - & - & - \\ 0 & 0 & \bar{c} & | & 0 & 0 & 0 & | & \bar{b} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & \bar{c} & | & 0 & \bar{b} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 0 & | & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{F.9})$$

com

$$\bar{b}(x) = \frac{b(x)}{a(x)}, \quad \bar{c}(x) = \frac{c(x)}{a(x)}.$$

Para encontrar os autovalores e autovetores da matriz de transferência

$$\tau(u) = (A(u) + \tau_D(u)) \quad (\text{F.10})$$

nós usamos o método do ansatz de Bethe com três níveis.

O problema de autovalores é dado por

$$\tau(u)\Psi(\vec{u}) = (A(u) + \tau_D(u)) \Psi(\vec{u}) \quad (\text{F.11})$$

com

$$\Psi(\vec{u}) = B_{i_1}(u_1)B_{i_2}(u_2) \dots B_{i_r}(u_r)X^{i_1, \dots, i_r}|1 \rangle$$

onde $i_l = 2, 3, 4$ e $l = 1, \dots, r$. Acima X^{i_1, \dots, i_r} é um coeficiente para ser determinado e $|1 \rangle$ é o primeiro pseudovácuo.

A escolha deste pseudovácuo é feita de tal forma que

$$C_\alpha(u)|1 \rangle = 0 \quad \alpha = 2, 3, 4 \quad (\text{F.12})$$

Então, o primeiro pseudovácuo $|1 \rangle \in X$ é dado por

$$|1 \rangle = \bigotimes_{i=1}^N w^i$$

onde

$$\begin{aligned} w^i &= u & \text{for } i \notin I, \\ w^i &= u \otimes k & \text{for } i = p_j \in I. \end{aligned}$$

e k pode assumir os valores $\bar{d}, \bar{s}, \bar{t}$ dados por

$$u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{F.13})$$

$$\bar{d} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \bar{s} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \bar{t} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{F.14})$$

O pseudovácuo tem a seguinte representação diagramática

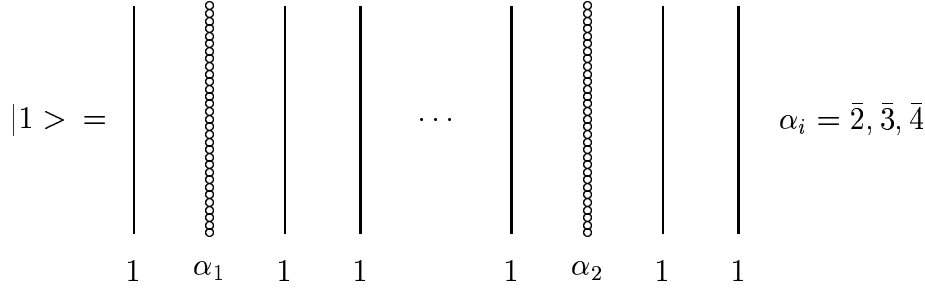


Fig. F.1: representação do pseudovácuo para o primeiro nível do ansatz de Bethe.

Deste modo, temos

$$\begin{aligned}
 A(u)|1\rangle &= [a(u)]^N [c(u)]^l |1\rangle \\
 B_\alpha(u)|1\rangle &\neq 0, \quad \alpha = 2, 3, 4 \\
 D_{ij}(u)|1\rangle &\in X, \quad i, j = 2, 3, 4
 \end{aligned}
 \tag{F.15}$$

Agora, podemos resolver a primeira parte da equação (F.11). Usando a eq. (F.7), dois tipos de termos surgem quando A comuta através de B_α . No primeiro tipo A e B_α preservam seus argumentos e no segundo seus argumentos são trocados. No primeiro tipo, os termos são chamados de “termos desejados” porque eles darão um vetor proporcional a Ψ , e o segundo tipo são os “termos indesejados” (t.i.). Encontramos que

$$A(u)\Psi(\vec{u}) = \lambda_A(u, \vec{u})\Psi(\vec{u}) + t.i., \tag{F.16}$$

onde

$$\lambda_1(u, \vec{u}) = [a(u)]^N [c(u)]^l \prod_{i=1}^r \frac{a(u_i - u)}{b(u_i - u)} \tag{F.17}$$

A segunda parte da equação (F.11), depois de usar a relação de comutação eq. (F.8) pode ser escrita como

$$\tau_D(u)\Psi(\vec{u}) = \prod_{i=1}^r \frac{a(u - u_i)}{b(u - u_i)} B_{i_1}(u_1) B_{i_2}(u_2) \dots B_{i_r}(u_r) \tau^{(1)}(u, \vec{u}) X^{i_1, \dots, i_r} |1\rangle + t.i. \tag{F.18}$$

acima

$$\tau^{(1)}(u, \vec{u}) = \text{tr}(T^{(1)}(u, \vec{u})) = \left(A^{(1)}(u, \vec{u}) + \tau_{D^{(1)}}(u, \vec{u}) \right)$$

com

$$T^{(1)}(u, \vec{u}) = \hat{D}(u) \cdot \Phi(u, \vec{u}) = \begin{pmatrix} A^{(1)} & B_2^{(1)} & B_3^{(1)} \\ C_2^{(1)} & D_{11}^{(1)} & D_{12}^{(1)} \\ C_3^{(1)} & D_{21}^{(1)} & D_{22}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{(1)} & \vec{B}^{(1)} \\ \vec{C}^{(1)} & \hat{D}^{(1)} \end{pmatrix} \quad (\text{F.19})$$

e

$$\Phi(u, \vec{u}) = R_{or}^{(1)}(u - u_r) R_{o,r-1}^{(1)}(u - u_{r-1}) \dots R_{o1}^{(1)}(u - u_1) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 \\ \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \\ \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma_3 \end{pmatrix} \quad (\text{F.20})$$

O operador $T^{(1)}$ pode ser escrito como

$$\begin{aligned} A^{(1)} &= D_{22}\alpha_1 + D_{23}\beta_1 + D_{24}\gamma_1 \\ B_2^{(1)} &= D_{22}\alpha_2 + D_{23}\beta_2 + D_{24}\gamma_2 \\ B_3^{(1)} &= D_{22}\alpha_3 + D_{23}\beta_3 + D_{24}\gamma_3 \\ C_2^{(1)} &= D_{32}\alpha_1 + D_{33}\beta_1 + D_{34}\gamma_1 \\ C_3^{(1)} &= D_{42}\alpha_1 + D_{43}\beta_1 + D_{44}\gamma_1 \\ D_{11}^{(1)} &= D_{32}\alpha_2 + D_{33}\beta_2 + D_{34}\gamma_2 \\ D_{12}^{(1)} &= D_{32}\alpha_3 + D_{33}\beta_3 + D_{34}\gamma_3 \\ D_{21}^{(1)} &= D_{42}\alpha_2 + D_{43}\beta_2 + D_{44}\gamma_2 \\ D_{22}^{(1)} &= D_{42}\alpha_3 + D_{43}\beta_3 + D_{44}\gamma_3. \end{aligned} \quad (\text{F.21})$$

A eq.(F.18) representa um novo problema de autovalores. Então agora passamos a resolver o problema de autovalores do segundo nível através do ansatz de Bethe para diagonalizar a matriz $\tau^{(1)}$. A matriz $\tau^{(1)}$ é simplesmente a matriz de transferência para um sistema invariante $SU(3)$ atuando numa representação tensorial de N cópias de uma representação com inomogeneidades $\{u\}$ e l sub-representações das impurezas num espaço dual.

Um fato importante é que $T^{(1)}(u, \vec{u})$ satisfaz as equações do ansatz de Bethe com a matriz $R^{(1)}$ dada por eq. (F.9)

$$R_{12}^{(1)}(u - v) T_{13}^{(1)}(u) T_{23}^{(1)}(v) = T_{23}^{(1)}(v) T_{13}^{(1)}(u) R_{12}^{(1)}(u - v). \quad (\text{F.22})$$

a qual, no segundo nível, permite-nos resolver o problema de autovalores. Desta equação, nós obtemos as seguintes regras de comutação

$$\vec{B}^{(1)}(x) \otimes \vec{B}^{(1)}(y) = \left(\vec{B}^{(1)}(y) \otimes \vec{B}^{(1)}(x) \right) \cdot R^{(2)}(x - y) \quad (\text{F.23})$$

$$A(x)^{(1)}\vec{B}^{(1)}(y) = \frac{a(y-x)}{b(y-x)}\vec{B}^{(1)}(y)A^{(1)}(x) - \frac{c(y-x)}{b(y-x)}\vec{B}^{(1)}(x)A^{(1)}(y) \quad (\text{F.24})$$

$$\hat{D}^{(1)}(x) \otimes \vec{B}^{(1)}(y) = \frac{a(x-y)}{b(x-y)} \left(\vec{B}^{(1)}(y) \otimes \hat{D}^{(1)}(x) \right) \cdot R^{(2)}(x-y) - \frac{c(x-y)}{b(x-y)} \vec{B}^{(1)}(x) \otimes \hat{D}^{(1)}(y) \quad (\text{F.25})$$

onde

$$R^{(2)}(x) = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{b} & \bar{c} & 0 \\ \hline - & - & - & - \\ 0 & \bar{c} & \bar{b} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \quad (\text{F.26})$$

com

$$\bar{b}(x) = \frac{b(x)}{a(x)}, \quad \bar{c}(x) = \frac{c(x)}{a(x)}.$$

O novo problema de autovalores, agora é escrito

$$\tau^{(1)}(u, \vec{u})\Psi^{(1)}(\vec{v}) = \left(A^{(1)}(u, \vec{u}) + \tau_D^{(1)}(u, \vec{u}) \right) \Psi^{(1)}(\vec{v}) \quad (\text{F.27})$$

procedendo como no caso anterior, procuraremos os autoestados que tem a forma

$$\Psi^{(1)}(\vec{v}) = X^{i_1, \dots, i_r} |1 \rangle = B_{j_1}^{(1)}(v_1) B_{j_2}^{(1)}(v_2) \dots B_{j_s}^{(1)}(v_s) Y^{j_1, \dots, j_s} |1 \rangle^{(1)}$$

onde $j_l = 2, 3$ e $l = 1, \dots, s$. Acima Y^{j_1, \dots, j_s} é um coeficiente a ser determinado no próximo nível e $|1 \rangle^{(1)}$ é o pseudovácuo do segundo nível e é dado por

$$|1 \rangle^{(1)} = |1 \rangle \otimes |2 \rangle$$

ou em sua representação diagramática o qual é aniquilado por $C_\alpha^{(1)}(u, \vec{u})$, $\alpha = 2, 3$. Note

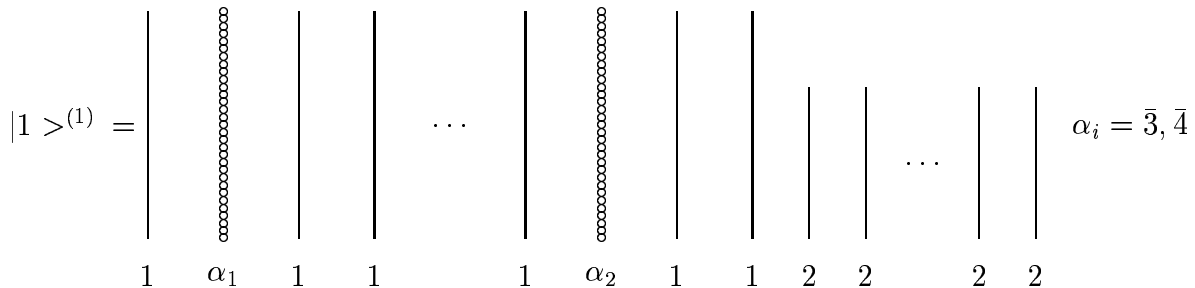


Fig. F.2: representação do pseudovácuo para o segundo nível do ansatz de Bethe.

que os operadores $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$, $i = 1, 2, 3$ de (F.20) atuam sobre a segunda parte $|1 \rangle^{(1)}$ e os

operadores D_{ij} sobre a primeira. O tensor X^{i_1, \dots, i_r} , $i_l = 2, 3, 4$ atua num espaço com 3^r dimensões gerado pela base

$$e_l^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad e_l^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad e_l^3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad l = 1, \dots, r \quad (\text{F.28})$$

Então $|2\rangle$ pode ser escrito como

$$|2\rangle = e_1^1 \otimes e_2^1 \otimes \dots \otimes e_r^1$$

Quando $T^{(1)}$ atua neste pseudovácuo produz

$$\begin{aligned} A^{(1)}(u)|1\rangle^{(1)} &= [b(u)]^N [c(u)]^l |1\rangle^{(1)} \\ B_\alpha^{(1)}(u)|1\rangle^{(1)} &\neq 0, \quad \alpha = 2, 3 \\ C_\alpha^{(1)}(u)|1\rangle^{(1)} &= 0, \quad \alpha = 2, 3 \\ D_{i,j}^{(1)}|1\rangle^{(1)} &\neq 0, \quad i, j = 2, 3 \end{aligned} \quad (\text{F.29})$$

Usando eq. (F.24), dois tipos de termos surgem quando $A^{(1)}$ é comutado através de $B_\alpha^{(1)}$. No primeiro $A^{(1)}$ e $B_\alpha^{(1)}$ preservam seus argumentos e no segundo seus argumentos são trocados. Para a primeira parte da equação (F.27), encontramos

$$A^{(1)}(u, \vec{u})\Psi^{(1)}(\vec{v}) = \lambda_{A^{(1)}}(u, \vec{u}, \vec{v})\Psi^{(1)}(\vec{v}) + t.i., \quad (\text{F.30})$$

onde

$$\lambda_{A^{(1)}}(u, \vec{u}, \vec{v}) = [b(u)]^N [c(u)]^l \prod_{j=1}^s \frac{a(v_j - u)}{b(v_j - u)} \quad (\text{F.31})$$

A segunda parte da eq. (F.27), depois de usarmos a relação de comutação (F.25) pode ser escrita como

$$\tau_D^{(1)}(u, \vec{u})\Psi^{(1)}(\vec{v}) = \prod_{j=1}^s \frac{a(u - v_j)}{b(u - v_j)} B_{j_1}^{(1)}(v_1) B_{j_2}^{(1)}(v_2) \dots B_{j_s}^{(1)}(v_s) \tau^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) Y^{j_1, \dots, j_s} |1\rangle^{(1)} + t.i. \quad (\text{F.32})$$

acima

$$\tau^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) = \text{tr}[T^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v})] = (A^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) + D^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}))$$

com

$$T^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) = \hat{D}^{(1)}(u, \vec{u}) \cdot \Phi^{(1)}(u, \vec{u}, \vec{v}) = \begin{pmatrix} A^{(2)} & B^{(2)} \\ C^{(2)} & D^{(2)} \end{pmatrix} \quad (\text{F.33})$$

e

$$\Phi^{(1)}(u, \vec{u}, \vec{v}) = R_{os}^{(2)}(u - v_s) R_{o(s-1)}^{(2)}(u - v_{s-1}) \dots R_{o1}^{(2)}(u - v_1) = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ b_1 & b_2 \end{pmatrix} \quad (\text{F.34})$$

Os operadores de $T^{(2)}$ podem ser escritos como

$$\begin{aligned} A^{(2)} &= D_{11}^{(1)} a_1 + D_{12}^{(1)} b_1 \\ B^{(2)} &= D_{11}^{(1)} a_2 + D_{12}^{(1)} b_2 \\ C^{(2)} &= D_{21}^{(1)} a_1 + D_{22}^{(1)} b_1 \\ D^{(2)} &= D_{21}^{(1)} a_2 + D_{22}^{(1)} b_2 \end{aligned} \quad (\text{F.35})$$

A eq.(F.32) representa um novo problema de autovalores, então usamos novamente o ansatz de Bethe para o terceiro nível, para diagonalizar a matriz $\tau^{(2)}$.

A matriz $\tau^{(2)}$ é simplesmente a matriz de transferência para um sistema invariante $SU(2)$. Entretanto, o fato interessante é que $T^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v})$ satisfaz as eq. de Yang-Baxter com a matriz $R^{(2)}$ dada por (F.26)

$$R_{12}^{(2)}(u - v) T_{13}^{(2)}(u) T_{23}^{(2)}(v) = T_{23}^{(2)}(v) T_{13}^{(2)}(u) R_{12}^{(2)}(u - v). \quad (\text{F.36})$$

com a qual ,no terceiro nível, permite-nos a resolver o problema. A partir destas equações, podemos obter as seguintes relações de comutação

$$A(x)^{(2)} B^{(2)}(y) = \frac{a(y-x)}{b(y-x)} B^{(2)}(y) A^{(2)}(x) - \frac{c(y-x)}{b(y-x)} B^{(2)}(x) A^{(2)}(y) \quad (\text{F.37})$$

$$D^{(2)}(x) B^{(2)}(y) = \frac{a(x-y)}{b(x-y)} B^{(2)}(y) D^{(2)}(x) - \frac{c(x-y)}{b(x-y)} B^{(2)}(x) D^{(2)}(y) \quad (\text{F.38})$$

Agora nós precisamos resolver o problema de autovalores neste terceiro nível. O problema de autovalores deste nível é dado por

$$\tau^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) \Psi^{(2)}(\vec{z}) = \left(A^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) + D^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) \right) \Psi^{(2)}(\vec{z}) \quad (\text{F.39})$$

procedendo exatamente da mesma forma que no nível anterior . Procuraremos os autovalores da forma

$$\Psi^{(2)}(\vec{z}) = Y^{j_1, \dots, j_s} |1 \rangle^{(1)} = B_{k_1}^{(2)}(z_1) B_{k_2}^{(2)}(z_2) \dots B_{k_t}^{(2)}(z_t) |1 \rangle^{(2)}$$

Acima $|1 \rangle^{(2)}$ é o pseudovácuo do terceiro nível que é dado

$$|1 \rangle^{(2)} = |1 \rangle^{(1)} \otimes |3 \rangle$$

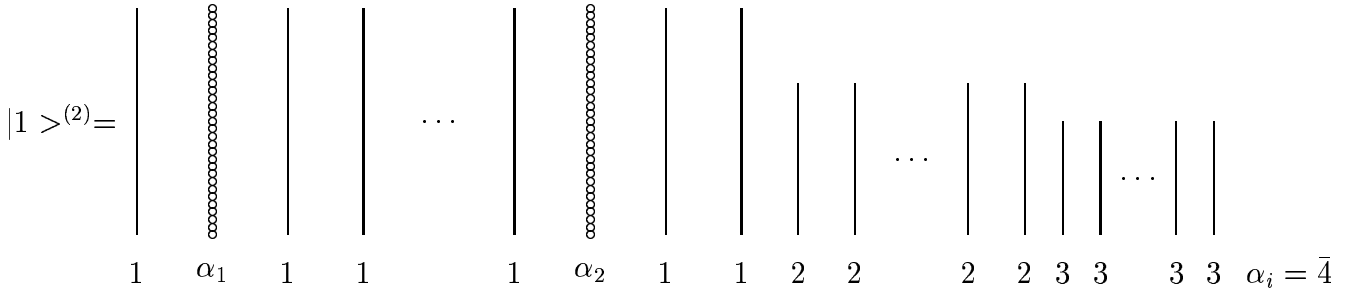


Fig. F.3: representação do pseudovácuo para o terceiro nível do ansatz de Bethe.

ou numa representação diagramática

o qual é aniquilado $C^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v})$. Note que estes operadores $a_i, b_i, i = 1, 2$ da (eq. (F.34)) atuam sobre a segunda parte do pseudovácuo $|1 \rangle^{(2)}$ e os operadores de $D_{ij}^{(1)}$ sobre a primeira. O tensor $Y^{j_1, \dots, j_s}, i_l = 2, 3$ atua num espaço de dimensão 2^s que é gerado pelo vetores da base

$$f_l^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad f_l^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad l = 1, \dots, s \quad (\text{F.40})$$

Então $|3 \rangle$ pode ser escrita como

$$|2 \rangle = f_1^1 \otimes f_2^1 \otimes \dots \otimes f_s^1$$

Quando $T^{(2)}$ atua no pseudovácuo produz

$$\begin{aligned} A^{(2)}(u)|1 \rangle^{(2)} &= [b(u)]^N [c(u)]^l \prod_{i=1}^r \frac{b(u-u_i)}{a(u-u_i)} |1 \rangle^{(2)} \\ D^{(2)}(u)|1 \rangle^{(2)} &= [b(u)]^N [e(u)]^l \prod_{i=1}^r \frac{b(u-u_i)}{a(u-u_i)} \prod_{j=1}^s \frac{a(u-v_j)}{b(u-v_j)} |1 \rangle^{(2)} \end{aligned} \quad (\text{F.41})$$

Para o terceiro nível, nós temos que

$$A^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) \Psi^{(2)}(\vec{z}) = \lambda_{A^{(2)}}(u, \vec{u}, \vec{v}) \Psi^{(2)}(\vec{z}) + u.t. \quad (\text{F.42})$$

$$D^{(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) \Psi^{(2)}(\vec{z}) = \lambda_{D^{(2)}}(u, \vec{u}, \vec{v}) \Psi^{(2)}(\vec{z}) + u.t. \quad (\text{F.43})$$

onde

$$\lambda_{A^{(2)}}(u, \vec{u}, \vec{v}) = [b(u)]^N [c(u)]^l \prod_{i=1}^r \frac{b(u-u_i)}{a(u-u_i)} \prod_{q=1}^t \frac{a(z_q-u)}{b(z_q-u)}$$

$$\lambda_{D(2)}(u, \vec{u}, \vec{v}) = [b(u)]^N [e(u)]^t \prod_{i=1}^r \frac{b(u - u_i)}{a(u - u_i)} \prod_{j=1}^s \frac{a(u - v_j)}{b(u - v_j)} \prod_{q=1}^t \frac{a(u - z_q)}{b(u - z_q)}$$

Então, nós temos a solução do sistema total (F.1)

$$\tau\Psi = \Lambda\Psi$$

onde $\Lambda = \sum_{i=1}^4 \Lambda_i$ com

$$\Lambda_1 = [a(u)]^N [c(u)]^l \prod_{i=1}^r \frac{a(u_i - u)}{b(u_i - u)} \quad (\text{F.44})$$

$$\Lambda_2 = [b(u)]^N [c(u)]^l \prod_{i=1}^r \frac{a(u - u_i)}{b(u - u_i)} \prod_{j=1}^s \frac{a(v_j - u)}{b(v_j - u)} \quad (\text{F.45})$$

$$\Lambda_3 = [b(u)]^N [c(u)]^l \prod_{j=1}^s \frac{a(u - v_j)}{b(u - v_j)} \prod_{q=1}^t \frac{a(z_q - u)}{b(z_q - u)} \quad (\text{F.46})$$

$$\Lambda_4 = [b(u)]^N [e(u)]^l \prod_{q=1}^t \frac{a(u - z_q)}{b(u - z_q)} \quad (\text{F.47})$$

As três equações do ansatz de Bethe são obtidas usando o critério que o autovalor Λ deve ser finito, analogamente ao que foi feito no **Apêndice B**,

$$\frac{\Lambda_1(x_l)}{\Lambda_2(x_l)} = -1 \quad l = 1 \dots r = M_1$$

$$\frac{\Lambda_2(y_l)}{\Lambda_3(y_l)} = -1 \quad l = 1 \dots s = M_2$$

$$\frac{\Lambda_3(z_l)}{\Lambda_4(z_l)} = -1 \quad l = 1 \dots t = M_3.$$

Substituindo as expressões e usando a troca de variável nas equações acima

$$x_l \longrightarrow ix_l + 1$$

$$y_l \longrightarrow iy_l + 2$$

$$z_l \longrightarrow iz_l + 3$$

$$\lambda \longrightarrow i\lambda + 4$$

nós obtemos

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{x_l - i}{x_l + i}\right)^N &= \prod_{l \neq i}^{M_1} \frac{x_l - x_i - 2i}{x_l - x_i + 2i} \prod_{j=1}^{M_2} \frac{x_l - y_j + i}{x_l - y_j - i} \\
 \prod_{j \neq l}^{M_2} \frac{y_l - y_j - 2i}{y_l - y_j + 2i} &= \prod_{i=1}^{M_1} \frac{y_l - x_i - i}{y_l - x_i + i} \prod_{k=1}^{M_3} \frac{y_l - z_k - i}{y_l - z_k + i} \\
 \left(\frac{z_l - \Lambda + i}{z_l - \Lambda - i}\right)^l \prod_{k \neq l}^{M_3} \frac{z_l - z_k - 2i}{z_l - z_k + 2i} &= \prod_{j=1}^{M_2} \frac{z_l - y_j - i}{z_l - y_j + i}.
 \end{aligned} \tag{F.48}$$

Os autovalores de energia agora podem ser facilmente calculados, através de

$$H = -2 \frac{\partial}{\partial u} \ln(\tau(u, \lambda))|_{u=0}$$

e então a energia é dada por

$$E = -2 \left[\Lambda^{-1}(0) \Lambda'(0) \right]. \tag{F.49}$$

Observando os autovalores da matriz de transferência (F.44,F.45,F.46,F.47), vemos que somente existirá uma contribuição de Λ_1 , já que $b(0) = 0$. Portanto,

$$\Lambda^{-1}(0) = \prod_{i=1}^{M_1} \frac{-u_i + 2}{-u_i} \tag{F.50}$$

$$\Lambda'(0) = -\frac{N}{2} \prod_{i=1}^{M_1} \frac{-u_i + 2}{-u_i} + \sum_{i=1}^{M_1} \frac{2}{u_i^2} \prod_{j \neq i} \frac{-u_j + 2}{-u_j} \tag{F.51}$$

então

$$\Lambda^{-1}(0) \Lambda'(0) = -\frac{N}{2} + \sum_{i=1}^{M_1} \frac{2}{u_i(u_i - 2)} \tag{F.52}$$

agora fazemos a troca de variável $u_l \rightarrow iu_l + 1$, obtemos

$$E = N - 4 \sum_{i=1}^{M_1} \frac{1}{u_i^2 + 1}. \tag{F.53}$$

Note que esta energia não é a total, já que falta a contribuição do potencial químico

$$H_{pq} = -2J \sum_{i=1}^N X_i^{00} + 2J \sum_{\bar{i}=1}^l X_{\bar{i}}^{00}. \tag{F.54}$$

Esta contribuição é dada por

$$E_{P_q} = -2J \left[N_0 - \bar{N}_0 \right]. \tag{F.55}$$

Note que as quantidades

$$N = N_0 + N_1 + N_2 + N_3$$

$$l = \bar{N}_0 + \bar{N}_1 + \bar{N}_2 + \bar{N}_3$$

devem ser conservadas. Mas

$$N - l = N_0 - \bar{N}_0 + M_1$$

onde $M_1 = N_1 - \bar{N}_1 + N_2 - \bar{N}_2 + N_3 - \bar{N}_3$. Portanto temos

$$N_0 - \bar{N}_0 = N - l - M_1$$

. Substituindo na eq. (F.55) temos que

$$E_{P_q} = -2J [N - l - M_1]. \tag{F.56}$$

Então a energia total é dada por $E_T = E + E_{P_q}$ que dá

$$E_T = N - 2J(N - l) - 4 \sum_{i=1}^{M_1} \left(\frac{1}{\lambda_i^2 + 1} - \frac{J}{2} \right) \tag{F.57}$$

que é a eq.(4.5) do capítulo 4.

Referências

- [1] DAGOTTO, E. Experiments on ladders reveal a complex interplay between a spin-gapped normal state and superconductivity. *Rep. Prog. Phys.*, London, v. 62, n. 11 , p. 1525-1571, Nov. 1999.
- [2] AZUMA, M.; HIROI, Z.; TAKANO, M.; ISHIDA, K.; KITAOKA, Y. Observation of a spin gap in SrCu_2O_3 comprising spin-1/2 quasi-1D two-leg ladders. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 73, n. 25 , p. 3463-3466, Dec. 1994.
- [3] HIROI, Z.; AZUMA, M.; TAKANO, M.; BANDO, Y. A new homologous series $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ found in the SrO – CuO system treated under high-pressure. *J. Solid State Chem.*, Orlando, v. 95, n. 1, p. 230-238, Nov. 1991.
- [4] CHABOUSSANT, G.; JULIEN, M.-H.; FAGOT-REVURAT, Y.; LÉVY, L. P.; BERTHIER, C.; HORVATIC, M.; PIOVESANA, O. Identification of nuclear relaxation processes in a gapped quantum magnetic: ^1H NMR in the $S = 1/2$ Heisenberg ladder $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 79, n. 5, p. 925-928 , Aug. 1997.
- [5] TANAKA, H.; TAKATSU, K.; SHIRAMURA, W.; ONO, T. Singlet ground state and excitation gap in the double spin chain system KCuCl_3 . *J. Phys. Soc. Jpn.*, Tokyo, v. 65, n. 7, p. 1945-1948, July 1996.
- [6] RICE, T. M.; GOPALAN, S.; SIGRIST, M. Superconductivity, spin gap and Luttinger liquids in a class of cuprates. *Europhys. Lett.*, Les Ulis, v. 23, n. 6, p. 445-449, Aug. 1993.
- [7] ISHIDA, K.; KITAOKA, Y.; TOKUNAGA, Y.; MATSUMOTO, S.; ASAYAMA, K.; AZUMA, M.; HIROI, Z.; TAKANO, M. Spin correlation and spin gap in quasi-one-dimensional spin-1/2 cuprate oxides: $A^{63}\text{Cu}$ NMR study. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 53, n. 5, p. 2827-2834, Feb. 1996.

- [8] ECCLESTON, R. S.; AZUMA, M.; TAKANO, M. Neutron-scattering and susceptibility study of spin chains and spin ladders in $(\text{Sr}_{0.8}\text{Ca}_{0.2})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 53, n. 22, p. R14721-R14724, June 1996.
- [9] NAGATA, T.; UEHARA, M.; GOTO, J.; AKIMITSU, J.; MOTOYAMA, N.; EISAKI, H.; UCHIDA, S.; TAKAHASHI, H.; NAKANISHI, T.; MÔRI, N. Pressure-induced dimensional crossover and superconductivity in the hole-doped two-leg ladder compound $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 81, n. 5, p. 1090-1093, Aug. 1998.
- [10] UEHARA, M.; NAGATA, T.; AKIMITSU, J.; TAKAHASHI, H.; MÔRI, N.; KINOSHITA, K. Superconductivity in the ladder material $\text{Sr}_{0.4}\text{Ca}_{13.6}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41.84}$. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Tokyo, v. 65, n. 9, p. 2764-2767, Sept. 1996.
- [11] DAGOTTO, E.; RICE, T. M. Surprises on the way from one-to two-dimensional quantum magnets: the ladder materials. *Science*, London, v. 271, n. 5249, p. 618-623, Feb. 1996.
- [12] RICE, T. M. t - J ladders and cuprate ladder compounds. *Z. Phys. B*, Berlin, v. 103, n. 2, p. 165-172, June 1997.
- [13] ALBEVERIO, S.; FEI, S.-M.; WANG, Y. An exactly solvable model of generalized spin ladder. *Europhys. Lett.*, Les Ulis, v. 47, n. 3, p. 364-370, Aug. 1999.
- [14] FRAHM, H.; RÖDENBECK, C. Integrable models of coupled Heisenberg chains. *Europhys. Lett.*, Les Ulis, v. 33, n. 1, p. 47-52, Jan. 1996.
- [15] FRAHM, H.; RODENBECK, C. Properties of the chiral spin liquid state in generalized spin ladders. *J. Phys. A*, Bristol, v. 30, n. 13, p. 4467-4479, July 1997.
- [16] WANG, Y. Exact solution of a spin-ladder model. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 60, n. 13, p. 9236-9239, Oct. 1999.
- [17] BATCHELOR, M. T.; MASLEN, M. Exactly solvable quantum spin tubes and ladders. *J. Phys. A*, Bristol, v. 32, n. 33, p. L377-L380, Aug. 1999.
- [18] BATCHELOR, M. T.; GIER, Y. de; LINKS, J.; MASLEN, M. Exactly solvable quantum spin ladders associated with the orthogonal and symplectic Lie algebras. *J. Phys. A*, Bristol, v. 33, n. 12, p. L97-L101, Mar. 2000.
- [19] GIER, J. de; BATCHELOR, M. T.; MASLEN, M. Phase diagram of the $\text{SU}(8)$ quantum spin tube. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 61, n. 22, p. 15196-15202, June 2000.

- [20] LINKS, J.; FOERSTER, A. Solution of a two-leg spin ladder system. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 62, n. 1, p. 65-68, July 2000.
- [21] FOERSTER, A.; HIBBERD, K.E.; LINKS, J. R.; RODITI, I. Quantum spin ladder systems associated with $su(2|2)$. *J. Phys. A*, Bristol, v. 34, n. 5, p. L25-L29, Feb. 2001.
- [22] TONEL, A. P.; FOERSTER, A.; LINKS, J.; MALVEZZI, A. L. Integrable anisotropic spin ladder model. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 64, n. 5, 054420 5p., Aug. 2001.
- [23] WANG, Y.; SCHLOTTMANN, P. Open $su(4)$ -invariant spin ladder with boundary defects. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 62, n. 6, p. 3845-3851, Aug. 2000.
- [24] ANDREI, N.; JOHANNESSON, H. Heisenberg chain with impurities (an integrable model). *Phys. Lett. A*, Amsterdam, v. 100, n. 2, p. 108-112, Jan. 1984.
- [25] BEDÜRFTIG, G.; ESSLER, F. H. L.; FRAHM, H. Exact solution of a $t - J$ chain with impurity. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 489, n. 3, p. 697-736, Apr. 1997.
- [26] FOERSTER, A.; LINKS, J.; TONEL, A. P. Algebraic properties of an integrable $t - J$ model with impurities. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 552, n. 3, p. 707-726, July 1999.
- [27] LINKS, J.; FOERSTER, A. Integrability of a $t - J$ model with impurities. *J. Phys. A*, Bristol, v. 32, n. 1, p. 147-157, Jan. 1999.
- [28] SCHMITTECKERT, P.; SCHWAB, P.; ECKERN, U. Quantum coherence in an exactly solvable one-dimensional model with defects. *Europhys. Lett.*, Les Ulis, v. 34, n. 1, p. 75, Apr. 1996.
- [29] ECKLE, H.-P.; PUNNOOSE, A.; RÖMER, R. A. Absence of backscattering at integrable impurities in one-dimensional quantum many-body systems. *Europhys. Lett.*, Les Ulis, v. 39, n. 3, p. 293-298, Aug. 1997.
- [30] GUAN, X.-W.; GRIMM, U.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. Integrable impurities for an open fermions chain. *J. Phys. A*, Bristol, v. 33, n. 21, p. 3863-3879, June 2000.
- [31] BARES, P.-A. Exact results for a one-dimensional $t - J$ model with impurities. Disponível na internet: <<http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/9412011>>. Acesso em: 2 dez. 1994
- [32] RESHETIKHIN, N. Multiparameter quantum groups and twisted quasi triangular Hopf algebras. *Lett. Math. Phys.*, Dordrecht, v. 20, n. 4, p. 331-335, Nov. 1990.

- [33] TROYER, M.; TSUNETSUGU, H.; WÜRTZ, D. Thermodynamics and spin gap of the Heisenberg ladder calculated by the look-ahead Lanczos algorithm. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 50, n. 18, p. 13515-13527, Nov. 1994.
- [34] CABRA, D. C.; HONECKER, A.; PUJOL, P. Magnetization curves of antiferromagnetic Heisenberg spin-1/2 ladders. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 79, n. 25, p. 5126-5129, Dec. 1997.
- [35] MORGENSTERN, I.; WÜRTZ, D. Numerical evaluation of the partition function for one-dimensional quantum systems. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 32, n. 1, p. 523-526, July 1985.
- [36] BETSUYAKU, H. Study of one-dimensional quantum spin systems by the transfer matrix method. *Prog. Theor. Phys.*, Kyoto, v. 73, n. 2, p. 319-331, Feb. 1985.
- [37] SUZUKI, M.; MIYASHITA, S.; TAKASU, M. Thermofield quantum Monte Carlo method and its applications to quantum spin systems. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 35, n. 7, p. 3569-3575, Mar. 1987.
- [38] SUZUKI, M. Transfer matrix method and Monte Carlo simulation in quantum spin systems. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 31, n. 5, p. 2957-2965, Mar. 1985.
- [39] SUZUKI, M. Relationship between d-dimensional quantum spin systems and (d+1)-dimensional Ising systems. *Prog. Theor. Phys.*, Kyoto, v. 56, n. 5, p. 1454-1469, Nov. 1976.
- [40] GUTKNECHT, M. K. A Completed Theory of the Unsymmetric Lanczos Process and Related Algorithms. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Philadelphia, v. 15, n. 5, p. 15-18, Jan. 1994.
- [41] GUTKNECHT, M. K. A completed theory of the unsymmetric Lanczos process and related algorithms. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Philadelphia, v. 13, n. 2, p. 594-639, Apr. 1992.
- [42] BARNES, T.; DAGOTTO, E.; RIERA, J.; SWANSON, E. S. Excitation spectrum of Heisenberg spin ladders. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 47, n. 6, p. 3196-3203, Feb. 1993.
- [43] WHITE, S. R.; NOACK, R. M.; SCALAPINO, D. Y. W. Resonating valence bond theory of coupled Heisenberg chains. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 73, n. 6, p. 886-889, Aug. 1994.

- [44] AZUMA, M.; HIROI, Z.; TAKANO, M.; ISHIDA, K.; KITAOKA, Y. Observation of a spin gap in SrCu_2O_3 comprising spin 1/2 quasi-1D two-leg ladders. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 73, n. 25, p. 3463-3466, Dec. 1994.
- [45] REIGROTZKI, M.; TSUNETSUGU, H.; RICE, T. M. Strong coupling expansions for antiferromagnetic Heisenberg $S = 1/2$ ladders. Disponível na internet: <<http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/9408023>>. Acesso em: 03 ago. 1994.
- [46] FRISCHMUTH, B.; AMMON, B.; TROYER, M. Susceptibility and low-temperature thermodynamics of spin-1/2 Heisenberg ladders. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 54, n. 6, p. R3714-R3717, Aug. 1996.
- [47] HIROI, Z. $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{2.5}$ as a doped spin-ladder compound. *J. Solid State Chem.*, Orlando, v. 123, n. 2, p. 223-235, May 1996.
- [48] MATSUDA, M.; KATSUMATA, K.; ECCLESTON, R. S.; BREHMER, S.; MIKESKA, H.-J. Magnetic excitations and exchange interactions in the spin-1/2 two leg ladder compound $\text{La}_6\text{Ca}_8\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 62, n. 13, p. 8903-8908, Oct. 2000.
- [49] DAGOTTO, E.; RIERA, J.; SCALAPINO, D. Superconductivity in ladders and coupled planes. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 45, n. 10, p. 5744-5747, Mar. 1992.
- [50] BETHE, H. Theory of metals. I. Eigenvalues and eigenfunctions of the linear atomic chain. *Z. Phys.*, Berlin, v. 71, n. 3/4, p. 205-226, Aug. 1931.
- [51] TAKHTADZHAN, L.; FADDEEV, L. D. The quantum method of the inverse problem and the XYZ Heisenberg model. *Russ. Math. Surveys*, Moscou, v. 34, n. 5, p. 11-68, Sept./Oct. 1979.
- [52] BEDNORZ, J. G.; MÜLLER, K. A. Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O systems. *Z. Phys. B*, Berlin, v. 64, n. 2, p. 189-193, Sept. 1986
- [53] NAKAMURA, T.; OKAMOTO, K. Theoretical analysis of the experiments on the double-spin-chain compound KCuCl_3 . *Phys. Rev. B*, Melville, v. 58, n. 5, p. 2411-2414, Aug. 1998.
- [54] GIER, J. de; BATCHELOR, M. T. Magnetization plateaus in a solvable 3-leg spin ladder. *Phys. Rev. B*, Melville, v. 62, n. 6, p. R3584-R3587, Aug. 2000.

- [55] FRAHM, H.; KUNDU, A. The phase diagram of an exactly solvable $t - J$ ladder model. *J. Phys.:* Condens. Matter, Bristol, v. 11, n. 50, p. L557-L562, Dec. 1999.
- [56] BATCHELOR, M. T.; MASLEN, M. Ground state energy and mass gap of a generalized quantum spin ladder. *J. Phys. A*, Bristol, v. 33, n. 3, p. 443-448, Jan. 2000.
- [57] KUNDU, A. Construction of quasi-two-and higher-dimensional quantum integrable models. *J. Math. Phys.*, Melville, v. 41, n. 2, p. 721-727, Feb. 2000.
- [58] HAYWARD, C. A.; POILBLANC, D.; LÉVY, L. P. Magnetization of $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$: a Heisenberg spin-ladder system, *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 54, n. 18, p. R12649-R12652, Nov. 1996.
- [59] TSVELICK, A. M.; WIEGMANN, P. B. Exact results in the theory of magnetic alloys. *Adv. Phys.*, London, v.32, n. 4, p. 453-713, July/Aug. 1983.
- [60] WATSON, B. C.; KOTOV, V. N.; MEISEL, M. W.; HALL, D. W.; GRANROTH, G. E.; MONTFROOIJ, W. T.; NAGLER, S. E.; JENSEN, D. A.; BACKOV, R.; PETRUSKA, M. A.; FANUCCI, G. E.; TALHAM, D. R. Magnetic spin ladder $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$: high-field magnetization and scaling near quantum criticality. *Phys. Rev. Lett.*, Melville, v. 86, n. 22, p. 5168-5171, May 2001.
- [61] NERSESYAN, A. A.; TSVELIK, A. M. One-dimensional spin-liquid without magnon excitations. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 78, n. 20, p. 3939-3942, May 1997.
- [62] CHABOUSSANT, G.; FAGOT-REVURAT, Y.; JULIEN, M.-H.; HANSON, M. E.; BERTHIER, C.; HORVATIC, M.; LÉVY, L. P.; PIOVESANA, O. Nuclear magnetic resonance study of the $S = 1/2$ Heisenberg ladder $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$: quantum phase transition and critical dynamics, *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 80, n. 12, p. 2713-2716, Mar. 1998.
- [63] TAKATSU, K.; SHIRAMURA, W.; TANAKA, H. Ground state of double spin chain systems TiCuCl_3 , NH_4CuCl_3 and KCuBr_3 . *J. Phys. Soc. Jpn.*, Tokyo, v. 66, n. 6, p. 1611-1614, June 1997.
- [64] CHABOUSSANT, G.; CROWELL, P. A.; LEVY, L. P.; PIOVESANA, O.; MADOURI, A.; MAILLY, D. Experimental phase diagram of $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$: a quasi-one-dimensional antiferromagnetic spin-1/2 Heisenberg ladder. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 55, n. 5, p. 3046-3049, Feb. 1997.

- [65] HEWITT, K. C.; IRWIN, J. C. Doping dependence of the superconducting gap in $\text{Bi}_2\text{Cr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$. Disponível na internet: <<http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/0012413>>. Acesso em: 13 dez. 2000.
- [66] IINO, Y.; IMADA, M. Effects of nonmagnetic impurity doping on spin ladder system. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Tokyo, v. 65, n. 12, p. 3728-3731, Dec. 1996.
- [67] MOTONE, Y.; KATOH, N.; FURUKAMA, N.; IMADA, M. Impurity effect on spin ladder system. *J. Phys. Soc. Jpn.*, Tokyo, v. 65, n. 7, p. 1949-1952, July 1996.
- [68] AMBJORN, J.; ARNAUDON, D.; SEDRAKYAN, A.; SEDRAKYAN, T.; SORBA, P. Integrable ladder $t - J$ model with staggered shift of the spectral parameter. *J. Phys. A*, Bristol, v. 34, n. 30, p. 5887-5900, Aug. 2001.
- [69] ABAD, J.; RÍOS, M. Method for solving integrable A_2 spin chains combining different representations. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 53, n. 21, p. 14000-14003, June 1996.
- [70] ABAD, J.; RÍOS, M. Integrable $\text{su}(3)$ spin chain combining different representations. *J. Phys. A*, Bristol, v. 30, n. 17, p. 5887-5909, Sept. 1997.
- [71] MARTINS, M. Integrable mixed vertex models from braid- monoid algebra. Disponível na internet: <<http://xxx.lanl.gov/abs/solv-int/9903006>>. Acesso em: 01 mar. 1999.
- [72] BABELON, O.; VEGA, H. J. de; VIALLET, C.-M. Exact solution of the $Z_{N+1}XZ_{N+1}$ symmetric generalization of the XXZ model. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 200, n. 2, p. 266-280, Feb. 1982.
- [73] KULISH, P. P.; RESHETIKHIN, N. Y. Diagonalization of $\text{Gl}(N)$ invariant transfer-matrices and quantum N -wave system (Lee Model). *J. Phys. A*, Bristol, v. 16, n. 16, p. L591-L596, Nov. 1983.
- [74] VEGA, H. J. de; LOPES, E. Exact solution of the Perk-Schultz model. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 67, n. 4, p. 489-492, July 1991.
- [75] SCHULTZ, C. L. Eigenvectors of the multi-component generalization of the six-vertex model. *Physica A*, Amsterdam, v. 122, n. 1/2, p. 71-88, Oct./Nov. 1983.
- [76] FOERSTER, A.; LINKS, J.; RODITI, I. Integrable multiparametric quantum spin chains. *J. Phys. A*, Bristol, v. 31, n. 2, p. 687-695, Jan. 1998.
- [77] FOERSTER, A.; RODITI, I.; RODRIGUES, L.M.C.S. Integrable multiparametric $SU(N)$ chain. *Mod. Phys. Lett. A*, Singapore, v. 11, n. 12, p. 987-993, Apr. 1996.

-
- [78] TONEL, P. T. *Propriedades algébrica de um modelo $t - J$ integrável com impurezas*. 1999. 99 f. Dissertação (Mestrado em Física) - Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1999.