



UNIVERSIDADE ESTADUAL DO CEARÁ

RAFAEL DE LIMA BARBOSA

**MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL SEGUNDO A
TÉCNICA DE MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA**

**FORTALEZA – CEARÁ
2014**

RAFAEL DE LIMA BARBOSA

MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL SEGUNDO A
TÉCNICA DE MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

Monografia apresentada ao Curso de Graduação em Física do Centro de Ciências e Tecnologia da Universidade Estadual do Ceará, como requisito parcial para obtenção do grau de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcony Silva Cunha.

FORTALEZA – CEARÁ
2014

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

Universidade Estadual do Ceará

Sistema de Bibliotecas

Barbosa, Rafael de Lima.

Modelo de Ising bidimensional segundo a técnica de matriz de transferência [recurso eletrônico] / Rafael de Lima Barbosa. - 2014.

1 CD-ROM: il.; 4 ¼ pol.

CD-ROM contendo o arquivo no formato PDF do trabalho acadêmico com 96 folhas, acondicionado em caixa de DVD Slim (19 x 14 cm x 7 mm).

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) - Universidade Estadual do Ceará, Centro de Ciências e Tecnologia, Graduação em Física, Fortaleza, 2014.

Orientação: Prof. Dr. Marcony Silva Cunha.

1. Modelo de Ising. 2. Ferromagnetismo. 3. Magnetização Espontânea. I. Título.



Universidade Estadual do Ceará

Centro de Ciências e Tecnologia
Coordenação do Curso de Física




ATA DE APRESENTAÇÃO DE MONOGRAFIA

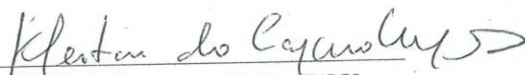
Em 11 de agosto de 2014, RAFAEL DE LIMA BARBOSA, aluno(a) regularmente matriculado no Curso de Bacharelado em Física, matrícula número 0805358 apresentou a monografia intitulada MODELO DE ISING BIDIMENSIONAL SEGUNDO A TÉCNICA DE MATRIZ DE TRANFERÊNCIA. A Banca de Defesa foi composta pelos professores: PROF. DR. MARCONY SILVA CUNHA [Orientador(a)], PROF. DR. JOSÉ RAMOS GONÇALVES e PROF. DR. KLEITON DO CARMO MENDES. Após a exposição, os professores da Banca fizeram suas observações e consideraram APROVADA a monografia apresentada. Eu, PROF. DR. MARCONY SILVA CUNHA, presidi a Banca de Defesa de Monografia e assino a ata, juntamente com os demais membros.



PROF. DR. MARCONY SILVA CUNHA [Orientador(a)]



PROF. DR. JOSÉ RAMOS GONÇALVES



PROF. DR. KLEITON DO CARMO MENDES

“A imaginação é mais importante que o conhecimento.”

(Albert Einstein)

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Kleiton do Carmo pelo apoio fundamental para o início desta monografia.

À minha mãe, Maria Juarita de Lima Barbosa, pelo suporte emocional.

Ao Professor Ramos pelos recursos necessários à realização deste trabalho.

À minha família pela paciência.

Ao Professor Marcony por ter me orientado e ajudado a concluir este trabalho.

Aos meus pais pelo apoio e a todos que, mesmo de longe, torceram muito por esse acontecimento.

RESUMO

O seguinte trabalho desenvolve as questões propostas por Valter L. Líbero no artigo “De Ising a Metropolis” sobre o modelo de *Ising* aplicado ao ferromagnetismo em redes bidimensionais. O objetivo é comparar a solução de Onsager com a técnica de matrizes de transferência a respeito dos resultados para a magnetização espontânea.

Palavras-chave: Modelo de *Ising*, ferromagnetismo, magnetização espontânea, spin, temperatura Curie

ABSTRACT

This research workout some matters purposed by Valter L. Líbero in his article “From Ising to Metropolis” about *Ising* model applied to ferromagnetism in bidimensional lattices. Our task is compare Onsager solution to transfer matrices method on their results for spontaneous magnetization.

Key words: *Ising* Model, ferromagnetism, spontaneous magnetization, spin, Curie temperature.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	9
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	10
2.1	Descrição Preliminar do Modelo de Ising.....	10
2.2	Prova da Existência de Ferromagnetismo em uma Dimensão.....	11
2.3	Transições de Fase Magnéticas.....	12
2.4	Expoentes Críticos.....	13
2.5	O Modelo de Ising Unidimensional.....	15
2.6	Correlações.....	20
2.7	Prova da Existência de Ferromagnetismo em duas Dimensões.....	25
2.8	A Solução de Onsager.....	30
2.8.1	formulação matricial.....	30
2.8.2	digressão matemática.....	37
2.8.3	a solução.....	42
2.9	A Técnica de Matriz de Transferência.....	59
3	METODOLOGIA.....	85
4	RESULTADOS.....	86
5	CONCLUSÃO.....	87
	REFERÊNCIAS.....	88
	APÊNDICE A – AS FASES MAGNÉTICAS.....	90
	APÊNDICE B – MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO.....	92
	APÊNDICE C – FUNÇÃO PARTIÇÃO.....	93
	APÊNDICE D – PRODUTO TENSORIAL.....	95

1 INTRODUÇÃO

Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising, o modelo de Ising tinha como objetivo principal estudar o ferromagnetismo. O modelo inicial era uma cadeia linear simples de momentos magnéticos. Esperava-se encontrar uma temperatura crítica acima da qual não haveria ordenamento da cadeia e abaixo da qual haveria ordenamento de toda a cadeia. Para desapontamento de Ising e seu orientador, o modelo apresentava transição de fase em temperatura nula.

Posteriormente, por meio de argumentos simples foi provado que o modelo tinha transição de fase em temperatura não nula em duas ou mais dimensões. O método matricial introduzido por Montroll e Kramers e Wannier, em 1941, mostrou-se promissor. Até que em 1944, Lars Onsager obteve a expressão completa da função partição e da energia livre de Helmholtz em duas dimensões para uma rede quadrada na ausência de campo externo. Seu método foi simplificado por Bruria Kaufman em 1949. Desde então, muitas derivações tem sido obtidas para a solução de Onsager em outros arranjos e através de técnicas numéricas, como o algoritmo de Monte Carlo de Metropolis. A expressão para a magnetização espontânea foi obtida por Yang em 1951, o qual utilizou a solução matricial de Onsager-Kaufman para definir a magnetização como um elemento de matriz, reduzindo o cálculo ao problema dos autovalores. Heisenberg propôs em 1928 um modelo semelhante e mais realista, substituindo os spins ou momentos magnéticos por operadores de spin. Tal modelo ainda não tem solução. Sua sofisticação é tamanha que em muitas situações volta-se à formulação mais simples do modelo de Ising.

Entre as vantagens do modelo de Ising estão o fato de ser um modelo clássico, que concentra no problema estatístico toda a sua dificuldade, e também de servir como primeira aproximação para a descrição de vários tipos de fenômenos cooperativos, não só em magnetismo como na transição gás-líquido, em ferroeletricidade e outros. Não há solução para o modelo em três dimensões. Contudo, através da solução exata em duas dimensões aprendeu-se muito sobre magnetismo e mecânica estatística em geral.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 DESCRIÇÃO PRELIMINAR DO MODELO DE ISING

O modelo de Ising é uma maneira de simular a estrutura de uma substância ferromagnética, isto é, seus domínios. Mais precisamente, ele avalia a transição de fase entre o ferromagnetismo e o antiferromagnetismo. Esta transição ocorre na temperatura crítica. As descrições gerais sobre as fases magnéticas dos materiais estão no APÊNDICE AS FASES MAGNÉTICAS.

O sistema considerado é um arranjo de N pontos fixos que formam uma rede periódica n -dimensional ($n = 1,2,3$). Cada ponto da rede corresponde a uma variável de spin σ_i ($i = 1,2,\dots,N$), a qual só pode assumir dois valores: $\sigma_i = +1$ (spin up) correspondendo ao momento de spin $+\frac{1}{2}$, ou $\sigma_i = -1$ (spin down) correspondendo ao momento de spin $-\frac{1}{2}$. Um dado conjunto de números σ_i determina a configuração de todo o sistema.

Os spins interagem uns com os outros segundo o termo de troca J , que é a energia de interação. Como a energia diminui rapidamente com a distância, consideram-se somente as interações entre os vizinhos mais próximos. O Hamiltoniano do sistema, para uma rede linear e na ausência de um campo externo é dado por:

$$H(\sigma) = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (1)$$

O termo J é positivo, portanto o alinhamento paralelo de spins (spins no mesmo sentido) corresponde a uma energia $-J$ e o alinhamento antiparalelo de spins (spins em sentidos opostos) corresponde a uma energia $+J$. O alinhamento paralelo de spins corresponde a uma fase ferromagnética e o alinhamento antiparalelo corresponde a uma fase antiferromagnética. No modelo de Ising a fase ferromagnética, isto é, a existência de magnetização espontânea, é favorecida a baixas temperaturas.

2.2 PROVA DA AUSÊNCIA DE FERROMAGNETISMO EM UMA DIMENSÃO

No modelo de Ising unidimensional, a transição de fase ocorre à temperatura nula. Se os spins estão alinhados (Fig. 1(a)), todos apontam na mesma direção. Quando viramos parte do conjunto (Fig. 1(b)), ocorre um aumento de energia.

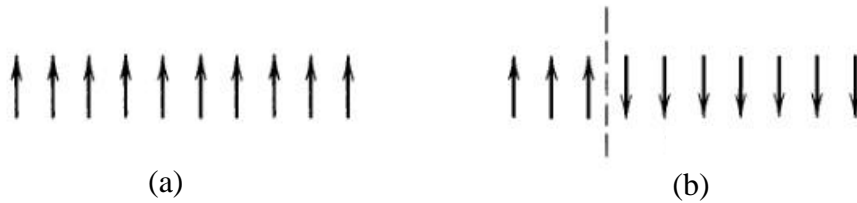


Fig. 1 (a) todos os spins estão alinhados, (b) parte dos spins está desalinhada. O custo energético para virar parte dos spins é $2J$

Peierls provou em 1936 que o modelo de Ising tem transição de fase em duas ou mais dimensões em temperatura não nula. No mesmo trabalho ele utiliza um argumento para provar que a ordem de longo alcance, isto é, o ordenamento de todos os spins persistia mesmo aumentando levemente a temperatura a partir de $T=0$. O mesmo argumento é facilmente elaborado em uma dimensão, resultando em temperatura crítica $T_c=0$, o que utilizaremos nesta seção como prova da ausência de magnetização espontânea em uma dimensão.

Partindo da Fig. 1 e da equação (1), que trata do problema sem campo externo, a energia inicial é $E_i = -NJ$ e a energia final é $E_f = -(N-1)J + J$. Assim a variação de energia é:

$$\Delta E = E_f - E_i = 2J \quad (2)$$

A entropia inicial é zero, pois há apenas um estado, enquanto a entropia final é $k \cdot \ln(N-1)$, pois há $N-1$ formas de separar os domínios, de forma que a variação da energia livre de Helmholtz, da qual tratamos no APÊNDICE FUNÇÃO PARTIÇÃO, é:

$$\Delta g = \Delta E - T\Delta S = 2J - kT \cdot \ln(N-1) \quad (3)$$

No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, para qualquer $T \neq 0$ teremos $\Delta g < 0$, mostrando que a cadeia é instável contra qualquer mudança de spin.

Assim, a única possibilidade de haver o ordenamento de todos os spins é em $T=0$, que é a temperatura crítica para um arranjo linear. Embora não haja magnetização espontânea para $T > 0$, as transições de fase podem ser observadas em laboratório.

2.3 TRANSIÇÕES DE FASE MAGNÉTICAS

As transições de fase e os comportamentos críticos para magnetização se dão como a seguir. Um material é dito em transição de fase quando uma característica macroscópica, como a densidade ou a magnetização, muda drasticamente. Considere uma barra de ferro em um forte campo magnético, H , paralelo ao seu eixo. A barra será quase completamente magnetizada, sendo que sua magnetização, M , em unidades apropriadas será $+1$. Diminuindo H a zero, M diminuirá, mas não a zero, de forma que a barra apresentará uma magnetização espontânea M_0 .

Revertendo o sentido do campo magnético, a magnetização será revertida, de forma que M é uma função ímpar de H , conforme o gráfico da Fig. 2 (a), com uma descontinuidade, de tal forma a ser considerada em transição de fase em $H=0$, já que a magnetização muda de sentido positivo para negativo.

Devido ao fato de a barra de ferro não estar realmente em equilíbrio termodinâmico, esta descontinuidade é distorcida nos experimentos e, assim, ocorre o fenômeno de histerese.

Se a temperatura é aumentada levemente, o gráfico de M continuará similar. Até que T atinja o valor crítico T_c (ponto Curie), no qual a magnetização espontânea desaparece e a função $M(H)$ tornar-se-á contínua, com uma singularidade em $H=0$, como na Fig. 2 (b).

Para qualquer aumento acima de T_c , a função $M(H)$ tornar-se-á contínua e analítica em $H=0$, como na Fig. 2 (c).

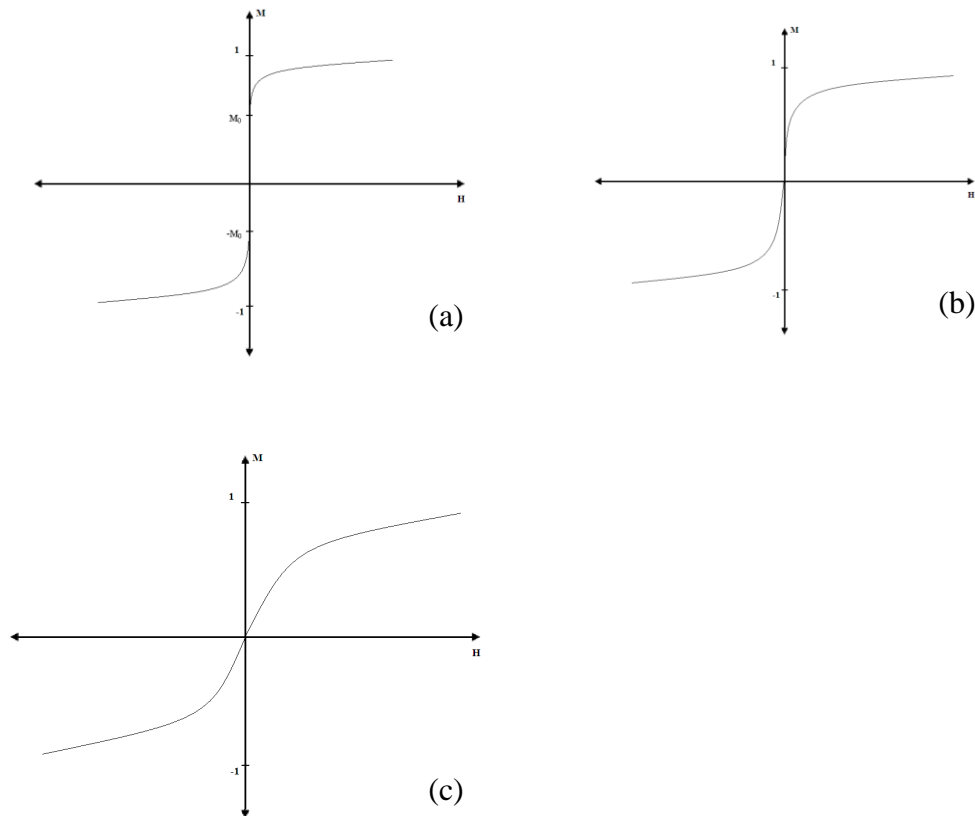


Fig. 2 de $M(H)$ para (a) $T < T_C$, (b) $T = T_C$, (c) $T > T_C$. Adaptado de "Exactly Solved Models in Statistical Mechanics", de R. J. Baxter.

2.4 EXPOENTES CRÍTICOS

As funções termodinâmicas possuem singularidades próximas do ponto crítico, de forma que divergem. Uma avaliação mais precisa do comportamento das quantidades termodinâmicas mais importantes nas proximidades do ponto crítico é feito considerando-as funções da temperatura. Para isso são usadas leis de potências, cujos expoentes são chamados expoentes críticos.

Define-se susceptibilidade magnética:

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M(H, T)}{\partial H} \quad (4)$$

Ao se considerar o comportamento crítico é conveniente se substituir T por:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (5)$$

de forma que, no caso do magnetismo, as funções termodinâmicas tenham singularidades em $H=t=0$. Espera-se que estas singularidades sejam normalmente potências simples de expoentes não inteiros.

Espera-se que:

$$M_0(T) \sim (-t)^\beta \quad \text{para } t \rightarrow 0^- \quad (6)$$

$$M(H, T_c) \sim H^{\frac{1}{\delta}} \quad \text{para } H \rightarrow 0 \quad (7)$$

$$\chi(0, T) \sim t^{-\gamma} \quad \text{para } t \rightarrow 0^+ \quad (8)$$

$$\chi(0, T) \sim (-t)^{-\gamma'} \quad \text{para } t \rightarrow 0^- \quad (9)$$

onde $M_0(T)$ é a magnetização espontânea e a notação $X \sim Y$ significa que X/Y tende a um limite não nulo. Os expoentes críticos associados com magnetização $\beta, \delta, \gamma, \gamma'$ são números, independentes de H e T .

Torna-se usual se definirem dois expoentes críticos α e α' de forma que próximo de T_c o calor específico em campo nulo diverge segundo uma lei de potência :

$$C(0, T) \sim t^{-\alpha} \quad \text{para } t \rightarrow 0^+ \quad (10)$$

$$C(0, T) \sim (-t)^{-\alpha'} \quad \text{para } t \rightarrow 0^- \quad (11)$$

A definição acima pode apresentar dificuldade na medida em que $C(0, T)$ permanece finito para t indo a zero por valores positivos ou negativos, embora seja uma função analítica em $t=0$. Por exemplo, $C(0, T)$ pode ter um simples salto descontínuo em $t=0$, como ocorre no modelo de campo médio (ou Bragg-Willians).

2.5 O MODELO DE ISING UNIDIMENSIONAL

Agora detalharemos o problema original de Ernest Ising.

O problema em uma dimensão consiste num arranjo linear e circular fechado de spins (Fig. 1), sendo que cada spin interage com os dois mais próximos e com o campo magnético externo.

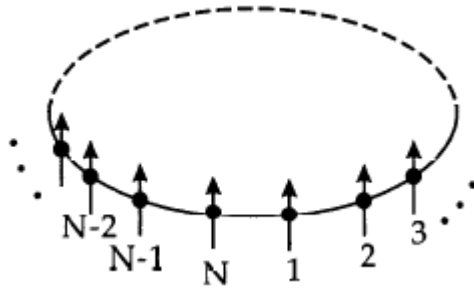


Fig. 3 – “Thermodynamics and Statistical Mechanics”, Walter Greiner, Ludwig Neise, Horst Stöcker, pág. 438

Resolver o modelo de Ising significa escrever a função partição canônica:

$$Z_N = \sum_{\sigma} \left[\frac{-E(\sigma)}{kT} \right] \quad (12)$$

onde k é a constante de Boltzmann, $k=1,38 \times 10^{-23}$.

O Hamiltoniano do Sistema é dado por:

$$E(\sigma) = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (13)$$

J corresponde à constante de acoplamento entre os spins e H corresponde ao campo magnético externo, também considerado constante. Os spins σ_i (spin de Ising) são associados às suas orientações, podendo, assumir os valores $\sigma_i = +1$ (spin up), correspondendo ao momento de spin $+1/2$, ou $\sigma_i = -1$ (spin down), correspondendo ao momento de spin $-1/2$. Dessa forma, a função partição se escreve:

$$Z_N(H, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp\left\{\beta \sum_{i=1}^N \left[J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}H(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]\right\}$$

com $\beta = \frac{1}{kT}$ (14)

Contabilizando a estrutura da cadeia de spins, podemos avaliar a relação de simetria nas somas $\sigma_{N+1} = \sigma_1$.

Originalmente, Ising usou um método combinatório para calcular a função partição. Contudo, H. A. Kramers e G. H. Wannier utilizaram uma formulação matricial mais simples, e elegante.

Definindo P um operador no espaço de spin (matriz 2x2) cujos elementos de matriz são dados por:

$$\langle \sigma_i | P | \sigma_{i+1} \rangle = \exp\left\{\beta \left[J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}H(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]\right\} \quad (15)$$

Os elementos de matriz são:

$$\begin{aligned} \langle +1 | P | +1 \rangle &= \exp[\beta(J + H)] \\ \langle -1 | P | -1 \rangle &= \exp[\beta(J - H)] \\ \langle +1 | P | -1 \rangle &= \langle -1 | P | +1 \rangle = \exp[-\beta J] \end{aligned} \quad (16)$$

Se um spin $\sigma_k = +1$ corresponde ao vetor unitário $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e um spin $\sigma_k = -1$ corresponde ao vetor unitário $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, a matriz P tem representações:

$$P = \begin{pmatrix} \exp[\beta(J + H)] & \exp[-\beta J] \\ \exp[-\beta J] & \exp[\beta(J - H)] \end{pmatrix} \quad (17)$$

Completando a equação (4) obtemos:

$$Z_N(H, T) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \langle \sigma_1 | P | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | P | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_N | P | \sigma_1 \rangle \quad (18)$$

Como os estados $|\pm 1\rangle$ formam um conjunto completo, a relação de clausura $\sum_{\sigma=\pm 1} |\sigma\rangle\langle\sigma| = 1$ é verificada, assim:

$$Z_N(H, T) = \langle \sigma_1 | P^N | \sigma_1 \rangle = \text{Tr} P^N \quad (19)$$

A matriz dos autovalores é encontrada transformando P na forma diagonal através da equação secular:

$$\begin{vmatrix} \exp[\beta(J+H)] - \lambda & \exp[-\beta J] \\ \exp[-\beta J] & \exp[\beta(J-H)] - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\lambda^2 - 2\lambda \exp[\beta J] \cosh(\beta H) + 2 \sinh(2\beta J) = 0 \quad (20)$$

onde o 1º termo da igualdade acima é chamado polinômio característico. Assim:

$$\lambda_{1,2} = \exp(\beta J) \cosh(\beta H) \pm [\exp(-2\beta J) + \exp(2\beta J) \sinh^2(\beta H)]^{\frac{1}{2}} \quad (21)$$

$$Z_N(H, T) = \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (22)$$

de tal forma que, com a função partição calculada, as funções termodinâmicas são obtidas da energia livre de Helmholtz:

$$g(H, T) = -kT \ln Z_N(H, T) \quad (23)$$

a qual no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, temos:

$$g(H, T) = -kT \ln \{ \lambda_1^N + \lambda_2^N \} = -kT \ln \{ \lambda_1^N [1 + (\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^N] \}$$

$$= -kT \ln \lambda_1^N = -NkT \ln \lambda_1 \quad (24)$$

já que $\lambda_2 < \lambda_1$.

As funções:

$$U(H, T) = -kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{g}{kT} \right) \quad (\text{energia interna}) \quad (25)$$

$$C(H, T) = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (\text{capacidade térmica}) \quad (26)$$

$$M(H, T) = -\frac{\partial g}{\partial H} = \left\langle \sum_{i=1}^N s_i \right\rangle \quad (\text{magnetização}) \quad (27)$$

são as consideradas neste trabalho.

Tomando a equação (21), a energia livre de Helmholtz por spin é:

$$\frac{1}{N} g(H, T) = -J - kT \ln [\cosh(\beta H) + \sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)}] \quad (28)$$

pois:

$$\lambda_1 = \exp \{ \beta J [\cosh(\beta H) + \sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)}] \} \quad (29)$$

a magnetização por spin é:

$$\frac{1}{N} M(H, T) = -\frac{1}{N} \frac{\partial g}{\partial H} = \frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)}} \quad (30)$$

Os gráficos de $N^{-1}M(H, T)$ para várias temperaturas estão na Fig. 4.

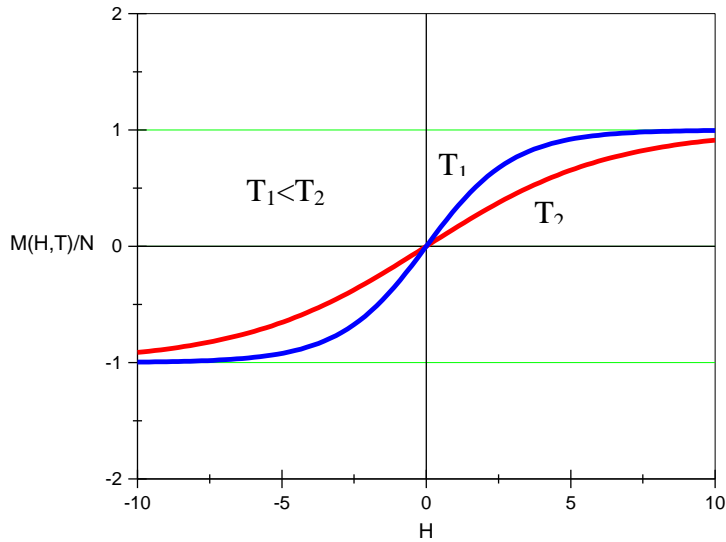


Fig. 4 Magnetização por spin do modelo de Ising em uma dimensão. Não há magnetização espontânea

Logo, para qualquer $T > 0$:

$$\frac{1}{N} M(0, T) = 0 \quad (31)$$

de forma que não há magnetização espontânea em uma dimensão.

Conforme dito na seção 2.3, a magnetização é uma função ímpar de H :

$$M(-H, T) = -M(H, T) \quad (32)$$

Da equação (27) e da Fig. 4 sabe-se que os valores da função magnetização por spin estão no intervalo:

$$-1 \leq \frac{M(H, T)}{N} \leq 1 \quad (33)$$

Como ilustra a Fig. 2 (b), a inclinação da função magnetização é infinita no ponto crítico $T=T_c$. Diferenciando a equação (27) com relação a H :

$$\frac{\partial M(H,T)}{\partial H} = \chi(H,T) \quad (34)$$

onde χ é a função susceptibilidade magnética.

A função $\chi(H,T)$ em uma dimensão é então obtida:

$$\chi(H,T) = \beta \frac{\exp(-4\beta J) \cosh(\beta H)}{[\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)]^{3/2}} \quad (35)$$

Para os limites $H \rightarrow 0$ e $T \rightarrow 0$:

$$\chi(H,T) \rightarrow \infty \quad (36)$$

mostrando assim que, para $T \rightarrow 0$ e $H \rightarrow 0$, a função M tem um comportamento crítico de transição de fase.

2.6 CORRELAÇÕES

A função correlação para dadas duas posições em uma rede, no modelo de Ising uma rede de spins, determina qual a probabilidade de os spins serem iguais.

A correlação entre dois spins i e j é:

$$f_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (37)$$

Se a contribuição energética do Hamiltoniano é invariante sob translação, como o é na maioria das situações, $\langle \sigma_i \rangle$ é igual para todas as posições i . Utilizando a equação (4) do

APÊNDICE FUNÇÃO PARTIÇÃO:

$$\begin{aligned} \frac{M(H,T)}{N} &= N^{-1} \langle \sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_N \rangle \\ &= N^{-1} \cdot Z_N^{-1} \left(\sum_{\sigma} (\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_N) \right) \cdot \exp \left\{ \left[E_0(\sigma) - H \sum_i \sigma_i \right] \right\} \end{aligned} \quad (38)$$

onde $E_0(\sigma)$ é a contribuição interna do Hamiltoniano de spins. De forma que $\langle \sigma_i \rangle$ é o mesmo para todas as contribuições i , isto é:

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle = \frac{M(H, T)}{N} \quad (39)$$

e, de forma similar, a função f_{ij} dependerá apenas no vetor distância \vec{r}_{ij} entre as posições i e j :

$$f_{ij} = f_{ij}(\vec{r}_{ij}) \quad (40)$$

onde $f(\vec{r})$ é a função correlação.

A ordem de curto alcance é descrita pelas correlações para pequenas distâncias entre as posições. A ordem de longo alcance é o limite para grandes distâncias.

Longe de T_c , espera-se que a função $f(\vec{r})$ decaia exponencialmente à medida que \vec{r} se torna maior. Mais precisamente, seja \hat{k} um vetor unitário fixo, espera-se que:

$$f(x\hat{k}) \sim x^{-\tau} e^{-\frac{x}{\xi}} \quad \text{para } x \rightarrow \infty \quad (41)$$

onde τ é um número e ξ é o comprimento de correlação na direção \hat{k} .

O comprimento de correlação é uma função de H e T , e é esperado que tenda ao infinito em T_c . De fato, esta propriedade de o comprimento de correlação se tornar infinito pode ser considerada um indício de um ponto crítico. Espera-se que:

$$\begin{aligned} \xi(0, T) &\sim t^{-\nu} && \text{para } t \rightarrow 0^+ \\ &\sim t^{-\nu'} && \text{para } t \rightarrow 0^- \end{aligned} \quad (42)$$

onde ν e ν' são os expoentes críticos de comprimento de correlação.

Espera-se que a dependência de ξ na direção \hat{k} desapareça próximo a T_c .

Agora utilizaremos a técnica de matriz de transferência para calcularmos as correlações spin-spin.

Usando as equações (13), (15) e a equação (1) do APÊNDICE FUNÇÃO PARTIÇÃO, a probabilidade de um sistema estar em um estado $\sigma \equiv \{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_N\}$ é:

$$Z_N^{-1} P(\sigma_1, \sigma_2) P(\sigma_2, \sigma_3) P(\sigma_3, \sigma_4) \cdots P(\sigma_N, \sigma_1) \quad (43)$$

onde $P(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ é o operador cujos elementos de matriz são $\langle \sigma_i | P | \sigma_{i+1} \rangle$, os mesmos da equação (15).

Considere V uma matriz de base 2x2 com vetores coluna (x_1, x_2) , isto é:

$$V = (x_1, x_2) \quad (44)$$

sendo x_1 e x_2 autovetores de P , de modo que:

$$Px_j = \lambda_j x_j, \quad j = 1, 2 \quad (45)$$

Temos da equação anterior:

$$PV = V \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (46)$$

Como P é uma matriz simétrica, é possível x_1 e x_2 ortogonais e linearmente independentes, resultando que V tenha uma inversa V^{-1} . Multiplicando o lado direito da equação (46) por V^{-1} :

$$P = V \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} V^{-1} \quad (47)$$

Considere a correlação entre os spins σ_1 e σ_3 . O valor médio de $\sigma_1 \sigma_3$ é:

$$\langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle = Z_N^{-1} \sum_{\sigma} \sigma_1 P(\sigma_1, \sigma_2) P(\sigma_2, \sigma_3) \sigma_3 P(\sigma_3, \sigma_4) \cdots P(\sigma_N, \sigma_1) \quad (48)$$

A equação anterior pode ser escrita em termos de matrizes: considere S sendo a matriz diagonal:

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (49)$$

A matriz S tem elementos:

$$S(\sigma, \sigma') = \sigma \cdot \delta(\sigma, \sigma') \quad (50)$$

Então o lado direito da equação (48) pode ser escrito como:

$$Z_N^{-1} \text{Tr} S P P S P \dots P, \quad (51)$$

assim:

$$\langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle = Z_N^{-1} \text{Tr} S P^2 S P^{N-2} \quad (52)$$

Similarmente, se $0 \leq j - i \leq N$:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = Z_N^{-1} \text{Tr} S P^{j-i} S P^{N+i-j} \quad (53)$$

$$\langle \sigma_i \rangle = Z_N^{-1} \text{Tr} S P^N \quad (54)$$

de forma que $\langle \sigma_i \rangle$ é independente de i e $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ depende apenas da diferença $j-i$, mostrando assim a invariância do sistema sob translação.

A matriz P é conhecida como matriz de transferência, e pode ser definida para modelos de duas ou mais dimensões.

Utilizando as equações (17), (44) e (45) no cálculo dos autovalores de P , observa-se que a matriz V pode ser escolhida ortogonal, dada por:

$$V = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\text{sen}\phi \\ \text{sen}\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \quad (55)$$

As transformações de similaridade da eq. (47) podem ser aplicadas simultaneamente para P e S , substituindo P e S por:

$$V^{-1}PV = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (56)$$

$$V^{-1}SV = \begin{pmatrix} \cos 2\phi & -\text{sen} 2\phi \\ -\text{sen} 2\phi & -\cos 2\phi \end{pmatrix} \quad (57)$$

respectivamente.

Substituindo a expressão da eq. (56) por P na equação (19), obtemos:

$$Z_N = \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}^N = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (58)$$

que é idêntica à equação (22).

Substituindo as eq.s (56) e (57) nas eq.s (53) e (54), tomando-se o limite $N \rightarrow \infty$ e mantendo-se o valor $j-i$ fixo, obtemos:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \cos^2 2\phi + \text{sen}^2 2\phi \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i} \quad (59)$$

$$\langle \sigma_i \rangle = \cos 2\phi \quad (60)$$

considerando λ_1 o maior dos autovalores.

A equação (60), combinada à equação (30), resulta numa avaliação do número ϕ :

$$\cot g(2\phi) = \exp(2K) \cdot \text{senh}(h) \quad (61)$$

com $K=J/kT$ e $h=H/kT$.

Das equações (37), (59) e (60) a função correlação f_{ij} pode ser calculada:

$$\begin{aligned} f_{ij} &= \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \\ &= \text{sen}^2(2\phi) \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^{j-i} \end{aligned} \quad (62)$$

Como $\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right| < 1$, concluímos que f_{ij} decai exponencialmente a zero à medida que $j-i$

assume valores maiores, e da equação (41) o comprimento de correlação ξ é dado(em unidades de espaçamento de rede) por:

$$\xi = \left[\ln \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right) \right]^{-1} \quad (63)$$

2.7 PROVA DA EXISTÊNCIA DE FERROMAGNETISMO EM DUAS DIMENSÕES

O argumento de Peierls prova que em campo magnético externo nulo e em temperaturas não nulas o valor médio termodinâmico do momento dipolo magnético é diferente de zero em duas dimensões. Griffiths em 1964 propôs uma demonstração similar à de Peierls.

Agora segue uma demonstração similar à de Griffiths(Statistical Mechanics; Shang-Keng Ma; página 301-305). Antes da rigorosa demonstração matemática segue uma argumentação teórica.

Considere uma rede quadrada como a ilustrada na Fig. 5.

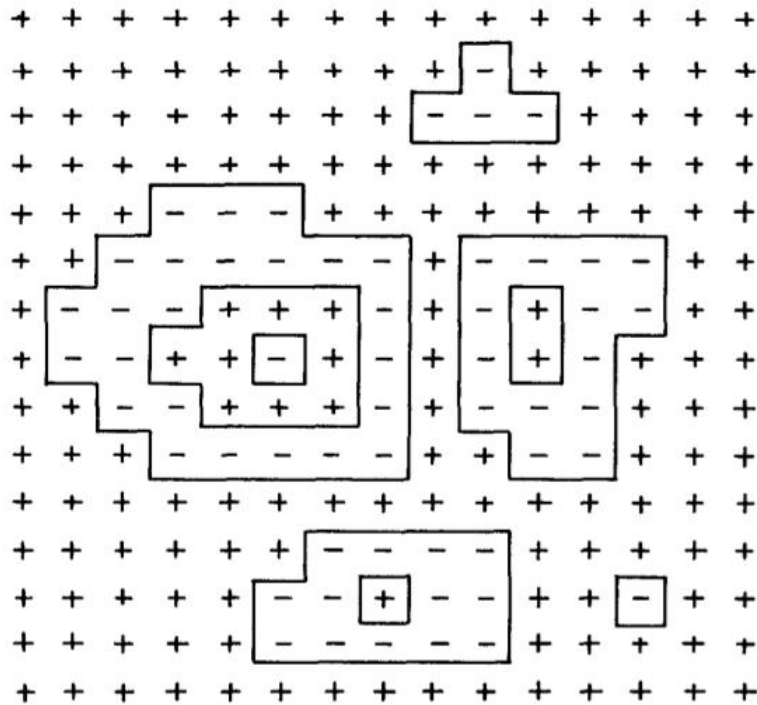


Fig. 5 “Statistical Mechanics”, Shang-Keng Ma, página 302

A energia total é:

$$H(s) = \sum_{i,j} (-J_{ij} s_i s_j) - h \sum_i s_i$$

$$J_{ij} = J > 0 \quad \text{i e j são vizinhos imediatos}$$

$$J_{ij} = 0 \quad \text{ademais} \quad (64)$$

onde $H(s)$ é o Hamiltoniano do sistema e h é o campo externo.

Utilizaremos as definições de ponto de partição e linha de partição. Na figura os spins de valores +1 e -1 são representados por + e -, respectivamente.

Cada ponto, isto é, cada spin tem quatro vizinhos mais próximos. Existe um ponto de partição entre cada par de spins vizinhos com sinais opostos. Ao serem conectados, estes pontos formam linhas de partição, dividindo a rede em regiões. O comprimento de cada linha de partição é determinado pelo número de pontos da linha.

O momento magnético total da rede é a área da região positiva menos a área da região negativa. Para se criarem linhas de partição, a temperatura T do sistema deve ser aumentada. Quando $T=0$, todos os spins têm a mesma direção e não há nenhuma linha de partição. Se o perímetro de uma certa região negativa é L , a energia é $2JL$, porque a energia de cada ponto de partição é $2J$. Logo a probabilidade de haver esta região negativa é:

$$e^{-\frac{2JL}{kT}} \quad (65)$$

Considerando $h=0$ e L no mínimo igual a 4, para temperaturas suficientemente baixas deve haver regiões negativas de áreas pequenas em relação ao sistema. Dessa forma, haverá mais spins positivos do que negativos e o momento magnético total é diferente de zero, provando-se assim a existência de ferromagnetismo.

Agora segue a rigorosa demonstração matemática.

Tomemos um spin qualquer s_i e consideremos p_+ e p_- as probabilidades de ele assumir os valores $+1$ e -1 , respectivamente.

O valor médio termodinâmico de s_i é:

$$\langle s_i \rangle = p_+ - p_- \quad (66)$$

O objetivo é provarmos que para uma temperatura T suficientemente pequena temos $\langle s_i \rangle \neq 0$, isto é, $p_- < p_+$.

Se s_i tiver valor -1 , ele deverá estar circundado por um número ímpar de linhas. E se s_i estiver circundado por um número par de linhas, terá valor $+1$.

Se s_i não estiver circundado por nenhuma linha, terá valor $+1$. Consideremos agora s_i como à linha de partição mais interna e tendo valor -1 . Mudando os valores dos spins mais internos para $+1$, teremos uma linha a menos e esta será a configuração para $s_i=+1$.

Assim a probabilidade para uma configuração $s_i = -1$ pode ser escrita como:

$$\frac{e^{-\frac{2JL}{kT}} \cdot e^{-\frac{2JL'}{kT}}}{Z} \quad (67)$$

L é o comprimento da linha de partição mais interna e L' é a soma das outras linhas. Z é a função partição.

A equação anterior nos dá apenas uma configuração. Consideremos $G(L)$ a função que nos dá o número de configurações com comprimento L na linha mais interna. Utilizaremos $G(L)$ no cálculo de p_- . Para fazê-lo devemos fixar as linhas externas de forma que estas não sejam interceptadas. Desconsiderando esta restrição, superestimamos $G(L)$ e cosequentemente p_- .

Assim a probabilidade de $s_i = -1$ deve ser menor que:

$$\frac{\left(G(L) \cdot e^{-\frac{2LJ}{kT}} \right) \cdot e^{-\frac{2L'J}{kT}}}{Z} \quad (68)$$

onde o termo fora do parêntese é justamente a probabilidade p_+ .

Temos então:

$$p_- < \left(\sum_L G(L) \cdot e^{-\frac{2LJ}{kT}} \right) p_+ \quad (69)$$

E $G(L)$ é o número de maneiras de traçar uma linha em torno de s_i . Há três modos de desenhar um passo, sempre começando de um ponto.

Para se desenhar L passos, têm-se $4 \times 3^{L-1}$ modos.

Queremos que L volte ao ponto inicial, de forma que o número total é menor que $4 \times 3^{L-1}$.

Pode-se traçar a linha no sentido horário ou no sentido anti-horário.

Mais uma vez superestimando $G(L)$, devemos dividir $4 \times 3^{L-1}$ por $2L$.

Assim:

$$G(L) < \frac{4}{2L} 3^{L-1} \left(\frac{L}{4}\right)^2 \quad (70)$$

onde $\left(\frac{L}{4}\right)^2$ é a maior área que pode ser delimitada pela linha de partição. Como pode estar em qualquer ponto dentro da curva, $G(L)$ deve conter este fator. Substituindo a equação (35) na equação (34):

$$p_- < \sum_{L=4}^{\infty} \frac{L}{8} 3^{L-1} e^{-\frac{2JL}{kT}} \quad (71)$$

onde o termo p_+ é desconsiderado por ser menor que 1. Calculando a série na equação (36):

$$p_- < \frac{4e^{-4\alpha} - 3e^{-5\alpha}}{24(1 - e^{-\alpha})^2}$$

$$\alpha = \frac{2J}{kT} - \ln 3 \quad (72)$$

$$\langle s_i \rangle = 1 - 2p_- > 1 - \frac{(4e^{-4\alpha} - 3e^{-5\alpha})}{12(1 - e^{-\alpha})^2} \quad (73)$$

Se $kT = J$, $e^{-\alpha}$ é menor que $\frac{1}{2}$, portanto se $T < \frac{J}{k}$ a conclusão acima resulta

em:

$$\langle s_i \rangle > \frac{91}{96} \quad (74)$$

Na demonstração acima os spins mais externos devem ser fixados em $+1$, do contrário $\langle s_i \rangle$ deve ser igual a zero, pois na ausência de campo externo o modelo apresenta uma simetria:

$$H(s) = H(-s) \quad (75)$$

Ferromagnetismo significa que qualquer mínima força aplicada, por exemplo uma força aplicada a uma pequena região do sistema, resulta em $\langle s_i \rangle \neq 0$. A demonstração acima pode ser estendida para três ou mais dimensões.

2.8 A SOLUÇÃO DE ONSAGER

2.8.1 FORMULAÇÃO MATRICIAL

O modelo de Ising bidimensional é formulado em termos de matrizes para chegarmos a uma solução exata do modelo. A rede quadrada do problema deste capítulo (Fig. 6a) está na topologia de um toróide (Fig. 6b), ao invés da topologia de um cilindro utilizada no trabalho de Onsager. A solução a seguir está baseada na formulação de Kaufman.

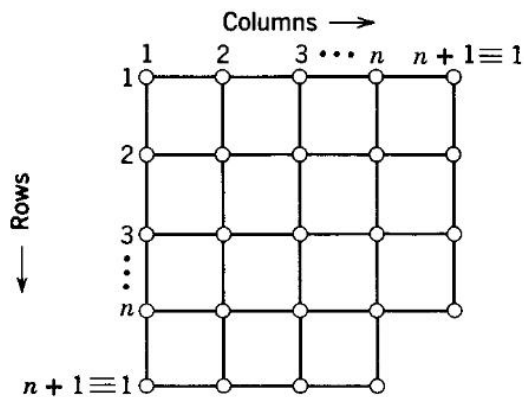


Fig. 6a

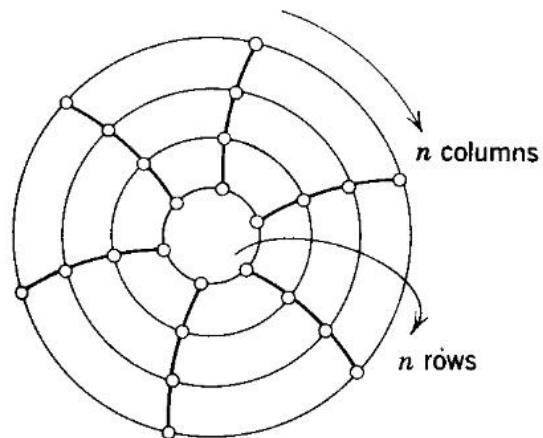


Fig. 6b

Fig. 6a Rede de Ising bidimensional

Fig. 6b Topologia da rede de Ising bidimensional

Considere uma rede quadrada de $N=n^2$ spins com n linhas e n colunas, com a condição de que as configurações das $(n+1)$ -ésimas linhas e colunas sejam idênticas com as primeiras linhas e colunas, respectivamente. Sendo μ_α ($\alpha=1, \dots, n$) o conjunto de coordenadas de spin da linha α :

$$\mu_\alpha = \{s_1, s_2, s_3, \dots, s_n\} \quad (76)$$

A condição de contorno do toróide implica:

$$\mu_{\alpha+1} \equiv \mu_\alpha \quad (77)$$

A rede completa é definida por $\{\mu_1, \dots, \mu_n\}$, onde a linha α interage apenas com as linhas $(\alpha+1)$ e $(\alpha-1)$. Considere $E(\mu, \mu')$ a energia de interação entre duas linhas da rede de spins vizinhas, e $E(\mu)$ a energia de interação entre os spins da linha μ com seus vizinhos mais próximos na linha e com o campo externo. Então:

$$E(\mu, \mu') = -J \sum_{k=1}^n s_k s'_k \quad (78)$$

$$E(\mu) = -J \sum_{k=1}^n s_k s_{k+1} - H \sum_{k=1}^n s_k \quad (79)$$

onde:

$$\begin{aligned} \mu &\equiv \{s_1, \dots, s_n\} \\ \mu' &\equiv \{s'_1, \dots, s'_n\} \end{aligned} \quad (80)$$

A condição de contorno do toróide implica em cada linha:

$$s_{n+1} \equiv s_1 \quad (81)$$

A energia total da configuração da rede é dada por:

$$U_N(\mu_1, \dots, \mu_n) = \sum_{\alpha=1}^n [E(\mu_\alpha, \mu_{\alpha+1}) + E(\mu_\alpha)] \quad (82)$$

onde $E(\mu_\alpha, \mu_{\alpha+1})$ e $E(\mu_\alpha)$ equivalem, respectivamente, às equações (78) e (79).

A função partição é:

$$Z_N(H, T) = \sum_{\mu_1} \cdots \sum_{\mu_n} \exp \left\{ -\beta \sum_{\alpha=1}^n [E(\mu_\alpha, \mu_{\alpha+1}) + E(\mu_\alpha)] \right\} \quad (83)$$

Como cada spin da rede assume somente duas configurações a rede é composta de n linhas e n colunas. Considere a matriz P do tipo $2^n \times 2^n$ cujos elementos de matriz são:

$$\langle \mu | P | \mu' \rangle = \exp \left\{ -\beta [E(\mu, \mu') + E(\mu)] \right\} \quad (84)$$

A função partição se torna:

$$\begin{aligned} Z_N(H, T) &= \sum_{\mu_1} \cdots \sum_{\mu_n} \langle \mu_1 | P | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | P | \mu_3 \rangle \cdots \langle \mu_n | P | \mu_1 \rangle \\ &= \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | P | \mu_1 \rangle = \text{Tr} P^n \end{aligned} \quad (85)$$

A rede bidimensional neste trabalho é convertida de um cilindro para um toróide de modo a facilitar a diagonalização de P . A mesma na forma diagonal se torna:

$$P = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_{2^n} \end{bmatrix} \quad (86)$$

onde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{2^n}$ são os 2^n autovalores de P . A matriz P^n , que também é diagonal, tem elementos $(\lambda_1)^n, (\lambda_2)^n, \dots, (\lambda_{2^n})^n$, de forma que:

$$Z_N(H, T) = \sum_{\alpha=1}^{2^n} (\lambda_\alpha)^n \quad (87)$$

Espera-se que P seja da ordem de e^n já que, da eq. (84), $E(\mu, \mu')$ e $E(\mu)$ são da ordem de n . Se λ_{\max} é o maior autovalor de P e se:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{n} \ln(\lambda_{\max}) \right] = \text{número finito} \quad (88)$$

O modelo possui solução finita. Se, além disso, todos os autovalores λ_α são positivos, o que será confirmado adiante:

$$(\lambda_{\max})^n \leq Z_N \leq 2^n (\lambda_{\max})^n \quad (89)$$

ou:

$$\frac{1}{n} \ln \lambda_{\max} \leq \frac{1}{n^2} \ln Z_N \leq \frac{1}{n} \ln \lambda_{\max} + \frac{1}{n} \ln 2 \quad (90)$$

e portanto:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \lambda_{\max} \quad (91)$$

onde $N=n^2$.

Agora segue uma descrição explícita de P . Da eq. (84) e das eq.s (78) e (79) é possível obter os elementos da matriz P na forma:

$$\langle s_1, \dots, s_n | P | s'_1, \dots, s'_n \rangle = \prod_{k=1}^n e^{\beta H s_k} e^{\beta J s_k s_{k+1}} e^{\beta J s_k s'_k} \quad (92)$$

Definindo três matrizes $2^n \times 2^n$ V_1 , V_2 e V_3 , cujos elementos de matriz são:

$$\langle s_1, \dots, s_n | V_1 | s'_1, \dots, s'_n \rangle \equiv \prod_{k=1}^n e^{\beta J s_k s'_k} \quad (93)$$

$$\langle s_1, \dots, s_n | V_2 | s'_1, \dots, s'_n \rangle = \delta_{s_1 s'_1} \cdots \delta_{s_n s'_n} \prod_{k=1}^n e^{\beta H s_k s_{k+1}} \quad (94)$$

$$\langle s_1, \dots, s_n | V_3 | s'_1, \dots, s'_n \rangle = \delta_{s_1 s'_1} \cdots \delta_{s_n s'_n} \prod_{k=1}^n e^{\beta H s_k} \quad (95)$$

onde $\delta_{ss'}$ é o delta de Kronecker. Utilizando uma multiplicação de matriz usual:

$$\begin{aligned} & \langle s_1, \dots, s_n | P | s'_1, \dots, s'_n \rangle \\ &= \sum_{s''_1, \dots, s''_n} \sum_{s'''_1, \dots, s'''_n} \langle s_1, \dots, s_n | V_3 | s''_1, \dots, s''_n \rangle \\ & \cdot \langle s''_1, \dots, s''_n | V_2 | s'''_1, \dots, s'''_n \rangle \langle s'''_1, \dots, s'''_n | V_1 | s'_1, \dots, s'_n \rangle \end{aligned} \quad (96)$$

verificando-se assim que:

$$P = V_3 V_2 V_1' \quad (97)$$

As matrizes V_1', V_2 e V_3 comutam entre si, já que V_2 e V_3 são diagonais e podem ser expressas em termos de matrizes especiais. Considere as matrizes de Pauli X, Y e Z :

$$X \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (98)$$

com as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned} X^2 &= 1, & Y^2 &= 1, & Z^2 &= 1 \\ XY + YX &= 0, & YZ + ZY &= 0, & ZX + XZ &= 0 \\ XY &= iZ, & YZ &= iX, & ZX &= iY \end{aligned} \quad (99)$$

Definem-se as matrizes $2^n \times 2^n$ $X_\alpha, Y_\alpha, Z_\alpha$ ($\alpha=1, \dots, n$) como os produtos tensoriais que seguem:

$$\begin{aligned}
X_\alpha &= 1 \times 1 \times \cdots \times X \times \cdots \times 1 & (n \text{ fatores}) \\
Y_\alpha &= 1 \times 1 \times \cdots \times Y \times \cdots \times 1 & (n \text{ fatores}) \\
Z_\alpha &= 1 \times 1 \times \cdots \times Z \times \cdots \times 1 & (n \text{ fatores})
\end{aligned} \tag{100}$$

\uparrow
 $(\alpha - \text{ésimo fator})$

Para $\alpha \neq \beta$, verificam-se as relações de comutação:

$$\begin{aligned}
[X_\alpha, X_\beta] &= [Y_\alpha, Y_\beta] = [Z_\alpha, Z_\beta] = 0 \\
[X_\alpha, Y_\beta] &= [X_\alpha, Z_\beta] = [Y_\alpha, Z_\beta] = 0
\end{aligned} \tag{101}$$

Verifica-se também que para um dado α as matrizes $2^n \times 2^n$ X_α , Y_α e Z_α satisfazem as relações da equação (100). Considere a identidade:

$$e^{\theta X} = \cosh\theta + X \sinh\theta \tag{102}$$

onde X é qualquer matriz cujo quadrado é a matriz unitária e θ é um número. A prova da equação (102) segue:

$$e^{\theta X} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\theta^n}{n!} X^n = \sum_{n \text{ par}} \frac{\theta^n}{n!} + X \sum_{n \text{ ímpar}} \frac{\theta^n}{n!} = \cosh\theta + X \sinh\theta \tag{103}$$

e a equação (102) é satisfeita. Verificando-se a eq. (93), fica claro que V_1' é um produto tensorial de n matrizes 2×2 idênticas:

$$V_1' = a \times a \times \cdots \times a \tag{104}$$

onde:

$$\langle s|a|s' \rangle = e^{\beta s s'} \tag{105}$$

portanto:

$$a = \begin{bmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{bmatrix} = e^{\beta J} + e^{-\beta J} X \tag{106}$$

Usando a equação (102) obtém-se:

$$a = \sqrt{2\sinh(2\beta J)} e^{\theta X} \quad (107)$$

onde:

$$\operatorname{tg} \theta = e^{-2\beta J} \quad (108)$$

Assim:

$$V_1' = [2\sinh(2\beta J)]^n e^{\theta X} \times e^{\theta X} \times \dots \times e^{\theta X} \quad (109)$$

Combinando as relações do APÊNDICE PRODUTO TENSORIAL com a equação (100) e (106) obtém-se:

$$V_1' = [2\sinh(2\beta J)]^n V_1 \quad (110)$$

$$V_1 = \prod_{\alpha=1}^n e^{\theta X_{\alpha}}, \quad \operatorname{tg} \theta \equiv e^{-2\beta J} \quad (111)$$

Calculando os elementos de matriz obtemos:

$$V_2 = \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta J Z_{\alpha} Z_{\alpha+1}} \quad (112)$$

$$V_3 = \prod_{\alpha=1}^n e^{\beta H Z_{\alpha}}, \quad Z_{n+1} \equiv Z_1 \quad (113)$$

de forma que:

$$P = [\sinh(2\beta J)]^n V_3 V_2 V_1 \quad (114)$$

Para o caso de $H=0$, $V_3 = 1$ e a equação acima fica:

$$P = [\sinh(2\beta J)]^n V_2 V_1 \quad (115)$$

completando a formulação bidimensional do modelo de Ising.

2.8.2 DIGRESSÃO MATEMÁTICA

As matrizes a seguir são de grande importância na solução do modelo de Ising bidimensional na ausência de campo externo. Considere as $2n$ matrizes Γ_μ , ($\mu=1,\dots,2n$) satisfazendo a seguinte regra de anticomutação:

$$\Gamma_\mu \Gamma_\nu + \Gamma_\nu \Gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu} \quad \begin{array}{l} (\mu=1,\dots,2n) \\ (\nu=1,\dots,2n) \end{array} \quad (116)$$

Considere as propriedades a seguir:

- A matriz Γ_μ não pode ser de dimensão menor que 2^n .
- Se $\{\Gamma_\mu\}$ e $\{\Gamma'_\mu\}$ são dois conjuntos de matrizes, existe uma matriz singular S de forma que $\Gamma_\mu = S\Gamma'_\mu S^{-1}$.
- Qualquer matriz $2^n \times 2^n$ é uma combinação linear da matriz unitária, das matrizes Γ_μ , do tipo $2^n \times 2^n$ e de todos os produtos independentes $\Gamma_\mu \Gamma_\nu, \Gamma_\mu \Gamma_\nu \Gamma_\lambda, \dots$

Para $n=1$, a eq. (116) define duas das matrizes de Pauli 2×2 , e para $n=2$, define duas das quatro matrizes de Dirac 4×4 . O conjunto de matrizes $\{\Gamma_\mu\}$, $2^n \times 2^n$ pode ser representado por:

$$\begin{array}{ll} \Gamma_1 = Z_1 & \Gamma_2 = Y_1 \\ \Gamma_3 = X_1 Z_2 & \Gamma_4 = X_1 Y_2 \\ \Gamma_5 = X_1 X_2 Z_3 & \Gamma_6 = X_1 X_2 Y_3 \\ \vdots & \vdots \end{array} \quad (117)$$

$$\begin{array}{ll} \Gamma_{2\alpha-1} = X_1 X_2 \cdots X_{\alpha-1} Z_\alpha & (\alpha=1,\dots,n) \\ \Gamma_{2\alpha} = X_1 X_2 \cdots X_{\alpha-1} Y_\alpha & (\alpha=1,\dots,n) \end{array} \quad (118)$$

Uma representação também satisfatória é obtida permutando-se as funções X_α e Z_α ($\alpha=1,\dots,n$). E uma representação equivalente à eq. (118) é obtida permutando-se a numeração

de $\Gamma_1, \dots, \Gamma_{2n}$. Considere um conjunto definido $\{\Gamma_\mu\}$ e ω sendo uma matriz $2n \times 2n$ descrevendo a transformação linear ortogonal entre os membros de $\{\Gamma_\mu\}$:

$$\Gamma'_\mu = \sum_{\nu=1}^{2n} \omega_{\mu\nu} \Gamma_\nu \quad (119)$$

onde os termos $\omega_{\mu\nu}$ são números complexos satisfazendo:

$$\sum_{\mu=1}^{2n} \omega_{\mu\nu} \omega_{\mu\lambda} = \delta_{\nu\lambda} \quad (120)$$

A equação acima pode ser escrita na forma:

$$\omega^T \omega = 1 \quad (121)$$

onde ω^T é o transposto de ω . Se Γ_μ é o componente de um vetor em um espaço $2n$ -dimensional, ω induz uma rotação neste espaço:

$$\begin{bmatrix} \Gamma'_1 \\ \Gamma'_2 \\ \vdots \\ \Gamma'_{2n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \omega_{11} & \omega_{12} & \cdots & \omega_{1,2n} \\ \omega_{21} & \omega_{22} & \cdots & \omega_{2,2n} \\ \vdots & & & \\ \omega_{2n,1} & \omega_{2n,2} & \cdots & \omega_{2n,2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \vdots \\ \Gamma_{2n} \end{bmatrix} \quad (122)$$

Substituindo a eq. (119) na eq. (116) verifica-se que o conjunto $\{\Gamma'_\mu\}$ também satisfaz (116) por causa da eq. (120). Então:

$$\Gamma'_\mu = S(\omega) \Gamma_\mu S^{-1}(\omega) \quad (123)$$

onde $S(\omega)$ é uma matriz $2^n \times 2^n$ não-singular. $S(\omega)$ é a representação matricial $2^n \times 2^n$ de uma rotação ω num espaço $2n$ -dimensional, devido à correspondência:

$$\omega \leftrightarrow S(\omega) \quad (124)$$

Das duas relações anteriores temos:

$$S(\omega)\Gamma_\mu S^{-1}(\omega) = \sum_{\nu=1}^n \omega_{\mu\nu} \Gamma_\nu \quad (125)$$

É óbvio que se ω_1 e ω_2 são duas rotações, $\omega_1\omega_2$ também é uma rotação. Assim:

$$S(\omega_1\omega_2) = S(\omega_1)S(\omega_2) \quad (126)$$

Seja uma rotação num plano bidimensional do espaço de dimensão $2n$. Uma rotação de ângulo θ no plano $\mu\nu$ é definida pela transformação:

$$\begin{cases} \Gamma'_\lambda = \Gamma_\lambda & (\lambda \neq \mu, \lambda \neq \nu) \\ \Gamma'_\mu = \Gamma_\mu \cos\theta + \Gamma_\nu \text{sen}\theta & (\mu \neq \nu) \\ \Gamma'_\nu = -\Gamma_\mu \text{sen}\theta + \Gamma_\nu \cos\theta & (\mu \neq \nu) \end{cases} \quad (127)$$

onde θ também é um número complexo. A matriz ω é uma rotação $S(\omega)$ é o representativo de spin da rotação ω . A matriz de rotação, dada por $\omega(\mu\nu|\theta)$ é explicitamente dada por:

$$\omega(\mu\nu|\theta) = \begin{matrix} & \begin{matrix} \mu - \text{ésima} \\ \text{coluna} \end{matrix} & & \begin{matrix} \nu - \text{ésima} \\ \text{coluna} \end{matrix} & & \\ \begin{matrix} \vdots \\ \cdots \end{matrix} & \begin{matrix} \cos\theta \\ -\text{sen}\theta \end{matrix} & \begin{matrix} \cdots \\ \cdots \end{matrix} & \begin{matrix} \text{sen}\theta \\ \cos\theta \end{matrix} & \begin{matrix} \cdots \\ \cdots \end{matrix} & \begin{matrix} \mu - \text{ésima linha} \\ \nu - \text{ésima linha} \end{matrix} \\ \begin{matrix} \vdots \\ \cdots \end{matrix} & & & & & \end{matrix} \quad (128)$$

onde os elementos não mostrados são unitários ao longo da diagonal principal e zero nas posições ademais. Então $\omega(\mu\nu|\theta)$ o plano de rotação no plano $\mu\nu$. As identidades

$$\begin{aligned} \omega(\mu\nu|\theta) &= \omega(\mu\nu|-\theta) \\ \omega^T(\mu\nu|\theta)\omega(\mu\nu|\theta) &= 1 \end{aligned} \quad (129)$$

são facilmente verificadas. As propriedades de ω e $S(\omega)$ a seguir são relevantes para a solução do modelo de Ising. A prova da existência de $S(\omega)$ segue por construção:

LEMA 1

Se $\omega(\mu\nu|\theta) \leftrightarrow S_{\mu\nu}(\theta)$, então:

$$S_{\mu\nu}(\theta) = e^{-\frac{1}{2}\theta\Gamma_\mu\Gamma_\nu} \quad (130)$$

Prova: como $\Gamma_\mu\Gamma_\nu = -\Gamma_\nu\Gamma_\mu$ para $\mu \neq \nu$ e $\Gamma_\mu\Gamma_\nu\Gamma_\mu\Gamma_\nu = -1$, uma identidade análoga à eq. (102) é:

$$e^{-\frac{1}{2}\theta\Gamma_\mu\Gamma_\nu} = \cos\frac{\theta}{2} - \Gamma_\mu\Gamma_\nu \operatorname{sen}\frac{\theta}{2} \quad (131)$$

de forma que temos:

$$\begin{aligned} e^{\frac{1}{2}\theta\Gamma_\mu\Gamma_\nu} \cdot e^{-\frac{1}{2}\theta\Gamma_\mu\Gamma_\nu} &= e^{\frac{1}{2}\theta\Gamma_\mu\Gamma_\nu} \cdot e^{\frac{1}{2}\theta\Gamma_\nu\Gamma_\mu} \\ &= e^{\frac{1}{2}\theta(\Gamma_\mu\Gamma_\nu + \Gamma_\nu\Gamma_\mu)} = 1 \end{aligned} \quad (132)$$

logo:

$$S_{\mu\nu}^{-1}(\theta) = e^{\frac{1}{2}\theta\Gamma_\mu\Gamma_\nu} \quad (133)$$

Por meio de um cálculo direto verificam-se as seguintes identidades:

$$S_{\mu\nu}(\theta)\Gamma_\lambda S_{\mu\nu}^{-1}(\theta) = \Gamma_\lambda \quad (\lambda \neq \mu, \lambda \neq \nu) \quad (134)$$

$$S_{\mu\nu}(\theta)\Gamma_\mu S_{\mu\nu}^{-1}(\theta) = \Gamma_\mu \cos\theta + \Gamma_\nu \sin\theta \quad (135)$$

$$S_{\mu\nu}(\theta)\Gamma_\nu S_{\mu\nu}^{-1}(\theta) = -\Gamma_\mu \sin\theta + \Gamma_\nu \cos\theta \quad (136)$$

LEMA 2

Os autovalores de $\omega(\mu\nu|\theta)$ são 1, com degenerescência $2n-2$, e $e^{\pm i\theta}$, que não são degenerados. Os autovalores de $S_{\mu\nu}(\theta)$ são $e^{\pm i\frac{\theta}{2}}$, cada um com degenerescência 2^{n-1} .

Prova: A primeira parte é trivial. A segunda parte pode ser provada escolhendo-se uma representação especial para $\Gamma_\mu \Gamma_\nu$. Considere Γ_μ e Γ_ν como na equação (118) com X e Z permutados. Escolhemos:

$$\begin{aligned} \Gamma_\mu &= Z_1 X_2 \\ \Gamma_\nu &= Z_1 Y_2 \end{aligned} \quad (137)$$

então:

$$\Gamma_\mu \Gamma_\nu = X_2 Y_2 = i Z_2 = 1 \times \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \times 1 \times \cdots \times 1 \quad (138)$$

portanto:

$$S_{\mu\nu}(\theta) = \cos\frac{\theta}{2} - \Gamma_\mu \Gamma_\nu \sin\frac{\theta}{2} = 1 \times \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix} \times 1 \times \cdots \times 1 \quad (139)$$

e os elementos de matriz de $S_{\mu\nu}(\theta)$ são:

$$\langle s_1, \dots, s_n | S_{\mu\nu}(\theta) | s'_1, \dots, s'_n \rangle = e^{\frac{1}{2}i\theta s_2} \prod_{k=1}^n \delta_{s_k s'_k} \quad (140)$$

Pelo delta de Kronecker, $S_{\mu\nu}(\theta)$ é diagonal com elementos $e^{-i\frac{\theta}{2}}$ ou $e^{i\frac{\theta}{2}}$, cada um aparecendo 2^{n-1} vezes.

LEMA 3

Se ω é o produto de n rotações planas comutantes:

$$\omega = \omega(\alpha\beta|\theta_1)\omega(\gamma\delta|\theta_2)\cdots\omega(\mu\nu|\theta_n) \quad (141)$$

onde $\{\alpha, \beta, \dots, \mu, \nu\}$ é uma permutação do conjunto de inteiros $\{1, 2, \dots, 2n-1, 2n\}$ e $\theta_1, \dots, \theta_n$ são números complexos. Então:

a) $\omega \leftrightarrow S(\omega)$, com

$$S(\omega) = e^{-\frac{1}{2}\theta_1\Gamma_\alpha\Gamma_\beta} e^{-\frac{1}{2}\theta_2\Gamma_\gamma\Gamma_\delta} \cdots e^{-\frac{1}{2}\theta_n\Gamma_\mu\Gamma_\nu} \quad (142)$$

b) Os $2n$ autovalores ω são:

$$e^{\pm i\theta_1}, e^{\pm i\theta_2}, \dots, e^{\pm i\theta_n} \quad (143)$$

c) Os 2^n autovalores de $S(\omega)$ são:

$$e^{\frac{1}{2}i(\pm\theta_1 \pm \theta_2 \pm \dots \pm \theta_n)} \quad (144)$$

com os sinais \pm escolhidos independentemente.

Prova: este lema é consequência direta dos lemas 1 e 2.

Com este lema, os autovalores de $S(\omega)$ são obtidos imediatamente dos de ω , se estes são da forma (143). A utilidade destes lemas está no fato de que V_2V_1 pode ser expresso em termos de $S(\omega)$.

2.8.3 A SOLUÇÃO

Combinando as equações (85), (91) e (115) obtemos:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \ln \frac{1}{N} Z_N(0, T) = \frac{1}{2} \ln [2 \operatorname{senh}(2\beta J)] + \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \Lambda \quad (145)$$

onde Λ é o maior autovalor de V e:

$$V = V_1V_2 \quad (146)$$

Devemos diagonalizar V por meio de manipulação das matrizes representativas de spin, sendo estas e as demais matrizes desta seção dadas por representação definida. Pela definição da eq. (117):

$$\Gamma_{2\alpha}\Gamma_{2\alpha-1} = Y_\alpha Z_\alpha = iX_\alpha \quad (\alpha = 1, \dots, n) \quad (147)$$

então:

$$V_1 = \prod_{\alpha=1}^n e^{\theta X_\alpha} = \prod_{\alpha=1}^n e^{-i\Gamma_{2\alpha}\Gamma_{2\alpha-1}}, \quad \text{tg } \theta = e^{-2\beta J} \quad (148)$$

de forma que V_1 é um representativo de spin de rotações planares comutantes.

Pela equação (112):

$$V_2 = \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{\beta J Z_\alpha Z_{\alpha+1}} \right] e^{\beta J Z_n Z_1} \quad (149)$$

O último termo comuta com o termo dentro dos colchetes:

$$V_2 = e^{\beta J Z_n Z_1} \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{\beta J Z_\alpha Z_{\alpha+1}} \right] = e^{i\beta J U \Gamma_1 \Gamma_{2n}} \prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{-i\beta J \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}} \quad (150)$$

onde:

$$U = X_1 X_2 \cdots X_n \quad (151)$$

Se não fosse pelo termo fora dos colchetes, V_2 também seria um representativo de spin de rotações planares comutantes. O termo fora dos colchetes é devido à condição de contorno do toróide, similar à condição no problema unidimensional de Ernest Ising.

Substituindo as equações (150) e (148) em (146):

$$V = V_2 V_1 = e^{i\phi U \Gamma_1 \Gamma_{2n}} \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{-i\phi \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}} \right] \left[\prod_{\lambda=1}^n e^{-i\phi \Gamma_{2\lambda} \Gamma_{2\lambda-1}} \right] \quad (152)$$

onde $\phi = \beta J$, $J > 0$.

A matriz U tem as seguintes propriedades:

$$(1) U^2 = 1, U(1+U) = 1+U, U(1-U) = U-1 \quad (153)$$

$$(2) U = i^n \Gamma_1 \Gamma_2 \cdots \Gamma_{2n} \quad (154)$$

(3) U comuta com um produto par de matrizes Γ_μ e anticomuta com um produto ímpar de matrizes Γ_μ .

Um cálculo simples mostra que:

$$\begin{aligned} e^{i\phi \Gamma_1 \Gamma_{2n} U} &= \left[\frac{1}{2}(1+U) + \frac{1}{2}(1-U) \right] [\cosh \phi + i \Gamma_1 \Gamma_{2n} U \sinh \phi] \\ &= \frac{1}{2}(1+U) [\cosh \phi + i \Gamma_1 \Gamma_{2n} \sinh \phi] \\ &\quad + \frac{1}{2}(1-U) [\cosh \phi - i \Gamma_1 \Gamma_{2n} \sinh \phi] \\ &= \frac{1}{2}(1+U) e^{i\phi \Gamma_1 \Gamma_{2n}} + \frac{1}{2}(1-U) e^{-i\phi \Gamma_1 \Gamma_{2n}} \end{aligned} \quad (155)$$

resultando em:

$$V = \frac{1}{2}(1+U)V^+ + \frac{1}{2}(1-U)V^- \quad (156)$$

onde V^+ e V^- são representativos de spin dados por:

$$V^\pm = e^{\pm i \Gamma_1 \Gamma_{2n}} \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} e^{-i\phi \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}} \right] \left[\prod_{\lambda=1}^n e^{-i\phi \Gamma_{2\lambda} \Gamma_{2\lambda-1}} \right] \quad (157)$$

Para diagonalizarmos V procede-se da seguinte forma:

$$RVR^{-1} = \tilde{V} = \frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+ + \frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^- \quad (158)$$

onde R é uma matriz que transforma U numa representação diagonal, mas V^+ e V^- numa representação não exatamente diagonal. Os autovalores de U são +1 ou -1 e:

$$U = X \times X \times \dots \times X \quad (159)$$

então:

$$U = Z \times Z \times \dots \times Z \quad (160)$$

é a representação diagonal de U . Devemos escolher R de forma que os autovalores +1 estejam em uma submatriz e -1 na outra, e \tilde{U} seja representado por:

$$\tilde{U} = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (161)$$

onde 1 é uma matriz unitária $2^{n-1} \times 2^{n-1}$. Como as matrizes \tilde{V}^\pm comutam com \tilde{U} , elas devem ser da forma:

$$\tilde{V}^\pm = \begin{pmatrix} C^\pm & 0 \\ 0 & D^\pm \end{pmatrix} \quad (162)$$

onde as submatrizes C^\pm e D^\pm não são necessariamente diagonais. A matriz $1/2(1 + \tilde{U})$ aniquila a submatriz inferior e a matriz $1/2(1 - \tilde{U})$ a submatriz superior, pois as submatrizes C^\pm e D^\pm são do tipo $2^{n-1} \times 2^{n-1}$:

$$\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+ = \begin{pmatrix} C^+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (163)$$

$$\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & D^- \end{pmatrix} \quad (164)$$

e assim:

$$\tilde{V} = \begin{pmatrix} C^+ & 0 \\ 0 & D^- \end{pmatrix} \quad (165)$$

Para diagonalizarmos V devemos diagonalizar V^+ e V^- , que têm os mesmos autovalores de \tilde{V}^+ e \tilde{V}^- . Portanto devemos diagonalizar V^+ e V^- separadamente e independentemente. Utilizando o lema 3, encontraremos os autovalores das rotações Ω^+ e Ω^- , das quais V^+ e V^- são representativos de spin:

$$V^\pm \leftrightarrow \Omega^\pm \quad (166)$$

onde Ω^+ e Ω^- são matrizes $2n \times 2n$. Da equação (157) temos:

$$\Omega^\pm = \omega(1, 2n | 2i\phi) \left[\prod_{\alpha=1}^{n-1} \omega(2\alpha+1, 2\alpha | -2i\phi) \right] \left[\prod_{\lambda=1}^n \omega(2\lambda, 2\lambda-1 | -2i\theta) \right] \quad (167)$$

Os autovalores de Ω^\pm são os mesmos de:

$$\omega^\pm = \Delta \Omega^\pm \Delta^{-1} \quad (168)$$

onde Δ é dado por:

$$\Delta = \sqrt{\prod_{\lambda=1}^n \omega(2\lambda, 2\lambda-1 | -2i\theta)} = \omega(2\lambda, 2\lambda-1 | -i\theta) \quad (169)$$

Assim:

$$\omega^\pm = \Delta \chi^\pm \Delta \quad (170)$$

$$\Delta = \omega(1,2|i\theta)\omega(3,4|i\theta)\cdots\omega(2n-1,2n|i\theta) \quad (171)$$

$$\chi^\pm = \omega(1,2n|\pm 2i\theta)\left[\omega(2,3|2i\phi)\omega(4,5|2i\phi)\cdots\omega(2n-2,2n-1|2i\phi)\right] \quad (172)$$

Explicitamente:

$$\Delta = \begin{bmatrix} J & 0 & 0 & \cdots \\ & J & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & J & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ & & & & J \end{bmatrix}, \quad (173)$$

$$J = \begin{pmatrix} \cosh\theta & i\sinh\theta \\ -i\sinh\theta & \cosh\theta \end{pmatrix}$$

$$\chi^\pm = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & \cdots & \pm b \\ 0 & & & & \\ 0 & K & & & \\ \vdots & & K & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & K & 0 \\ \mp b & & \cdots & 0 & 0 & a \end{bmatrix},$$

$$K = \begin{pmatrix} \cosh 2\phi & i\sinh 2\phi \\ -i\sinh 2\phi & \cosh 2\phi \end{pmatrix}$$

$$a = \cosh 2\phi \quad (174)$$

$$b = \sinh 2\phi$$

Realizando a multiplicação da eq. (170):

$$\omega^\pm = \begin{bmatrix} A & B & 0 & 0 & \cdots & 0 & \mp B^* \\ B^* & A & B & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & B^* & A & B & & & \\ \vdots & & & & & & \\ 0 & 0 & & & & & \vdots \\ \mp B^* & 0 & \cdots & & & B^* & A \end{bmatrix} \quad (175)$$

onde A e B são dados por:

$$A = \begin{pmatrix} \cosh 2\phi \cosh 2\theta & -i \cosh 2\phi \sinh 2\theta \\ i \cosh 2\phi \sinh 2\theta & \cosh 2\phi \cosh 2\theta \end{pmatrix} \quad (176)$$

$$B = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \sinh 2\phi \sinh 2\theta & i \sinh 2\phi \sinh^2 2\theta \\ -i \sinh 2\theta \cosh^2 2\theta & -\frac{1}{2} \sinh 2\phi \sinh 2\theta \end{pmatrix} \quad (177)$$

e B^* é o conjugado Hermitiano de B .

Utilizaremos um autovetor da forma a seguir para encontrarmos os autovalores de ω^\pm :

$$\psi = \begin{bmatrix} zu \\ z^2 u \\ \vdots \\ z^n u \end{bmatrix} \quad (178)$$

sendo z um número e u um vetor de duas componentes:

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} \quad (179)$$

Espera-se que:

$$\omega^\pm \psi = \lambda \psi \quad (180)$$

As equações de autovalor são:

$$\begin{aligned}
 (zA + z^2 B \mp z^n B^*)u &= z\lambda u \\
 (z^2 A + z^3 B + zB^*)u &= z^2 \lambda u \\
 (z^3 + z^4 B + z^2 B^*)u &= z^3 \lambda u \\
 \vdots & \\
 (z^{n-1} A + z^n B + z^{n-2} B^*)u &= z^{n-1} \lambda u \\
 (z^n A \mp zB + z^{n-1} B^*)u &= z^n \lambda u
 \end{aligned} \tag{181}$$

As equações independentes são:

$$\begin{aligned}
 (A + zB \mp z^{n-1} B^*) &= \lambda u \\
 (A + zB + z^{-1} B^*) &= \lambda u \\
 (A \mp z^{1-n} B + z^{-1} B^*) &= \lambda u
 \end{aligned} \tag{182}$$

que são solúveis considerando:

$$z^n = \mp 1 \tag{183}$$

então:

$$(A + zB + z^{-1} B^*) = \lambda u \tag{184}$$

A equação acima é equivalente às três independentes, e o sinal \mp na eq. (182) está associado com ω^\pm . Os n valores de z são:

$$z = e^{i \frac{\pi k}{n}} \quad (k = 0, 1, \dots, 2n - 1) \tag{185}$$

onde:

$$\begin{aligned}
(k = 1, 3, 5, \dots, 2n-1) & \quad \text{para } \omega^+ \\
(k = 0, 2, 4, \dots, 2n-2) & \quad \text{para } \omega^-
\end{aligned} \tag{186}$$

Cada k está associado com dois autovalores λ_k que serão encontrados pela equação:

$$(A + z_k B + z_k^{-1} B^*)u = \lambda_k u \tag{187}$$

logo temos $2n$ autovalores de ω^\pm . Nota-se que:

$$\det |A + z_k B + z_k^{-1} B^*| = 1 \tag{188}$$

portanto os autovalores λ_k tem a forma:

$$\lambda_k = e^{\pm \gamma_k} \quad (k = 0, 1, \dots, 2n-1) \tag{189}$$

e são encontrados pela equação:

$$\begin{aligned}
\cosh \gamma_k &= \cosh 2\phi \cosh 2\theta - \cos \frac{\pi k}{n} \sinh 2\phi \sinh 2\theta \\
& \quad (k = 0, 1, \dots, 2n-1)
\end{aligned} \tag{190}$$

a qual é obtida por meio do traço da matriz determinante na equação (188). Consideramos as soluções positivas de γ_k na eq. (190). Observa-se que:

$$\begin{aligned}
\gamma_k &= \gamma_{2n-k} \\
0 &< \gamma_0 < \gamma_1 < \dots < \gamma_n
\end{aligned} \tag{191}$$

sendo a segunda parte verificada pela equação:

$$\frac{\partial \gamma_k}{\partial k} = \frac{\pi \operatorname{sen}(\pi k / n) \operatorname{senh} 2\phi \operatorname{senh} 2\theta}{n \operatorname{senh} \gamma_k} \quad (192)$$

Os 2^n autovalores de V^\pm , por meio do lema 3, são:

$$\text{autovalores de } V^- : e^{-\frac{1}{2}(\pm\gamma_0 \pm \gamma_2 \pm \gamma_4 \pm \dots \pm \gamma_{2n-2})} \quad (193)$$

$$\text{autovalores de } V^+ : e^{\frac{1}{2}(\pm\gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \gamma_5 \pm \dots \pm \gamma_{2n-1})} \quad (194)$$

Escolheremos duas matrizes F e G do tipo $2^n \times 2^n$ com a condição de que F transforma a eq. (163) na forma diagonal e G transforma a eq. (164) na forma diagonal:

$$F \left[\frac{1}{2} (1 + \tilde{U}) \tilde{V}^+ \right] F^{-1} = V_D^+ \quad (195)$$

$$G \left[\frac{1}{2} (1 - \tilde{U}) \tilde{V}^- \right] G^{-1} = V_D^- \quad (196)$$

Como \tilde{U} é da forma da equação (161), F e G deixam \tilde{U} na forma original ou permutam as submatrizes 1 e -1 na equação (161). Portanto:

$$V_D^+ = \frac{1}{2} (1 \pm \tilde{U}) F \tilde{V}^+ F^{-1} \quad (197)$$

$$V_D^- = \frac{1}{2} (1 \pm \tilde{U}) G \tilde{V}^- G^{-1} \quad (198)$$

e escrevemos:

$$\frac{1}{2} (1 \pm \tilde{U}) = \frac{1}{2} (1 \pm Z_1 Z_2 \dots Z_n) \quad (199)$$

$$F \tilde{V}^+ F^{-1} = \prod_{k=1}^n e^{\frac{1}{2} \gamma_{2k-1} Z_{Pk}} \quad (200)$$

$$G \tilde{V}^- G^{-1} = \prod_{k=1}^n e^{\frac{1}{2} \gamma_{2k-2} Z_{Qk}} \quad (201)$$

onde P e Q são duas permutações, as quais desconhecidas até então, dos inteiros $1, 2, \dots, n$. A permutação P põe k na posição Pk e a permutação Q põe k na posição Qk . Como os autovalores de Z_k são ± 1 :

$$\frac{1}{2}(1 \pm \tilde{U}) = \begin{cases} 1, & \text{se um número par de } Z_k \text{ são } \pm 1 \\ 0, & \text{se um número ímpar de } Z_k \text{ são } \pm 1 \end{cases} \quad (202)$$

Pelo fato de $\det|\tilde{U}| = \pm 1$. A matriz V_D^- é de dupla degenerescência, já que os autovalores $e^{1/2(\pm\gamma_0+\gamma_2+\gamma_4+\dots+\gamma_{2n-2})}$ são muito próximos. O mesmo ocorre para a matriz V_D^+ . Logo, para $n \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \text{o maior autovalor de } V_D^+ &= e^{\frac{1}{2}(\gamma_0+\gamma_2+\gamma_4+\dots+\gamma_{2k-2})} \\ \text{o maior autovalor de } V_D^- &= e^{\frac{1}{2}(\gamma_1+\gamma_3+\gamma_5+\dots+\gamma_{2k-1})} \end{aligned} \quad (203)$$

e o maior autovalor de V é:

$$\Lambda = e^{\frac{1}{2}(\gamma_1+\gamma_3+\gamma_5+\dots+\gamma_{2n-1})} \quad (204)$$

Manipulando a equação acima obtemos:

$$\tau = \frac{1}{n} \ln \Lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2n} (\gamma_1 + \gamma_3 + \gamma_5 + \dots + \gamma_{2n-1}) \quad (205)$$

Considere:

$$\begin{aligned} \gamma(\nu) &= \gamma_{2k-1} \\ \nu &= \frac{\pi}{n} (2k-1) \end{aligned} \quad (206)$$

Quando $n \rightarrow \infty$, ν se torna uma variável contínua e a equação (205) se torna densa:

$$\sum_{k=1}^n \gamma_{2k-1} \rightarrow \frac{n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \gamma(v) dv \quad (207)$$

e portanto:

$$\tau = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \gamma(v) dv = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \gamma(v) dv \quad (208)$$

Agora encontraremos uma expressão para $\gamma(v)$. Reescrevendo a equação (190):

$$\cosh \gamma(v) = \cosh 2\phi \cosh 2\theta - \cos v \sinh 2\phi \sinh 2\theta \quad (209)$$

Uma manipulação resulta em:

$$\begin{aligned} \sinh 2\theta &= \frac{1}{\sinh 2\phi} \\ \cosh 2\theta &= \coth 2\phi \end{aligned} \quad (210)$$

A equação (209) se torna:

$$\cosh \gamma(v) = \cosh 2\phi \coth 2\phi - \cos v \quad (211)$$

Pela identidade a seguir:

$$|z| = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \ln(2 \cosh z - 2 \cos t) dt \quad (212)$$

verificamos que $\gamma(v)$ tem a representação integral:

$$\gamma(v) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \ln(2 \cosh 2\phi \coth 2\theta - 2 \cos v - 2 \cos v') dv' \quad (213)$$

resultando em:

$$\tau = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \ln[2\cosh 2\phi \coth 2\phi - 2(\cos \nu + \cos \nu')] d\nu' d\nu \quad (214)$$

Observando a Figura 7, se mudarmos a região de interação do quadrado sombreado para o retângulo da linha pontilhada, a integral não se altera:

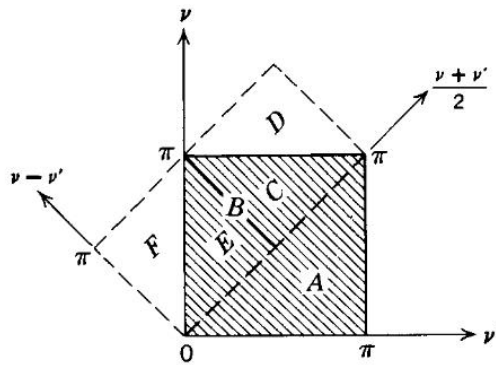


Fig. 7 Região de interação na equação (214)

$$\begin{aligned} 0 \leq \frac{\nu + \nu'}{2} \leq \pi \\ 0 \leq \nu - \nu' \leq \pi \end{aligned} \quad (215)$$

Considere:

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \frac{\nu + \nu'}{2} \\ \delta_2 &= \nu - \nu' \end{aligned} \quad (216)$$

segue:

$$\begin{aligned}
\tau &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \ln \left(2 \cosh 2\phi \coth 2\phi - 4 \cos \delta \cos \frac{\delta_2}{2} \right) d\delta_2 d\delta_1 \\
&= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{\pi/2} \ln \left(2 \cosh 2\phi \coth 2\phi - 4 \cos \delta \cos \delta_2 \right) d\delta_2 d\delta_1 \\
&= \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \ln(2 \cos \delta_2) d\delta_2 + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \cosh^{-1} \left(\frac{D}{2 \cos \delta_2} \right) d\delta_2
\end{aligned} \tag{217}$$

onde:

$$D = \cosh 2\phi \coth 2\phi \tag{218}$$

Como:

$$\cosh^{-1} x = \ln \left[x + \sqrt{x^2 - 1} \right] \tag{219}$$

segue:

$$\tau = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \ln \left[D \left(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \cos^2 \delta} \right) \right] d\delta \tag{220}$$

onde:

$$\kappa = \frac{2}{D} \tag{221}$$

Na equação (220) o termo $\cos^2 \delta$ pode ser substituído por $\sin^2 \delta$ sem alteração.

Logo:

$$\tau = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2 \cosh^2 2\beta J}{\sinh 2\beta J} \right) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi} \right) d\varphi \tag{222}$$

Avaliando a função partição, obtemos a energia livre de Helmholtz por spin:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} g(0, T) &= -\frac{kT}{N} \ln Z_N(0, T) \\
&= -kT \ln [2 \cosh(2\beta J)] - \frac{kT}{2\pi} \int_0^\pi \ln \left[\frac{1 + \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi}}{2} \right] d\varphi
\end{aligned} \tag{223}$$

onde k é a constante de Boltzmann. Obtemos a energia interna por spin :

$$\frac{1}{N} U(0, T) = \frac{d}{d\beta} (\beta g) = -J \coth(2\beta J) \left[1 + \frac{2\kappa'}{\pi} I(\kappa) \right] \tag{224}$$

com:

$$\kappa = \frac{2 \sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} \tag{225}$$

$$\kappa' = 2 \operatorname{tgh}^2(2\beta J) - 1$$

$$\kappa^2 + \kappa'^2 = 1 \tag{226}$$

$$I(\kappa) = \int_0^{\pi/2} (1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi)^{-1/2} d\varphi \tag{227}$$

onde $I(\kappa)$ é a integral elíptica completa do primeiro tipo. E também obtemos o calor específico da rede, que é obtido por meio dos seguintes resultados:

$$\frac{d\kappa}{d\beta} = -\frac{\kappa'}{\kappa} \frac{d\kappa'}{d\beta}, \quad \frac{d\kappa'}{d\beta} = 8J \operatorname{tgh}(2\beta J) [1 - \operatorname{tgh}^2(2\beta J)] \tag{228}$$

$$\frac{dI(\kappa)}{d\beta} = \frac{1}{\kappa'^2 \kappa} [E(\kappa) - \kappa'^2 I(\kappa)] \tag{229}$$

onde $E(\kappa)$ é a integral elíptica completa do segundo tipo:

$$E(\kappa) = \int_0^{\pi/2} (1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi)^{1/2} d\varphi \tag{230}$$

resultando em:

$$\frac{1}{Nk} C(0, T) = \frac{2}{\pi} [\beta J \coth(2\beta J)]^2 \left\{ 2I(\kappa) - 2E(\kappa) - (1 - \kappa') \left[\frac{\pi}{2} + \kappa I(\kappa) \right] \right\} \quad (231)$$

A integral elíptica $I(\kappa)$ tem uma singularidade em $\kappa = 1$ (ou $\kappa' = 0$), em cuja vizinhança:

$$I(\kappa) \approx \ln \left[\frac{4}{\kappa'} \right] \text{ e } E(\kappa) \approx 1 \quad (232)$$

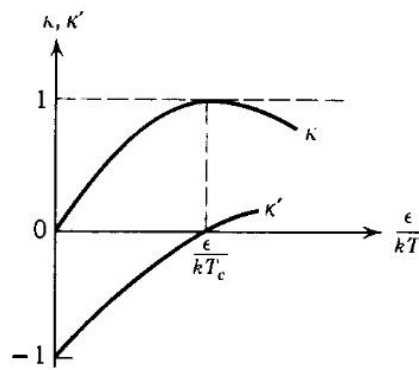


Fig. 8 As funções κ e κ'

Assim, todas as funções termodinâmicas têm singularidades de algum tipo em $T = T_c$, onde:

$$2tgh^2 \left(\frac{2J}{kT_c} \right) = 1 \quad (233)$$

$$\frac{J}{kT_c} = 0,4406868$$

e outras relações satisfeitas por T_c são:

$$\begin{aligned}
e^{-\frac{2J}{kT_c}} &= \sqrt{2} - 1 \\
\cosh\left(\frac{2J}{kT_c}\right) &= \sqrt{2} \\
\sinh\left(\frac{2J}{kT_c}\right) &= 1
\end{aligned} \tag{234}$$

A magnetização espontânea, ou a ordem de longo alcance, não pode ser obtida pelos cálculos realizados até agora, já que estamos tratando do problema na ausência de campo externo, isto é, $H \rightarrow 0$. Yang, em 1952, obteve a expressão para a magnetização espontânea, sendo os cálculos intermediários muito difíceis. Entretanto, o resultado é simples:

$$M(0, T) = \begin{cases} [1 - \sinh^{-4}(2\beta J)]^{\frac{1}{8}}, & \text{para } T < T_c \\ 0 & \text{para } T \geq T_c \end{cases} \tag{235}$$

sendo o gráfico ilustrado na Figura 9. Uma forma equivalente é:

$$M(0, T) = \begin{cases} \left[\frac{(1+l^2)(1-6l^2+l^4)^{\frac{1}{2}}}{(1-l^2)^2} \right]^{1/4}, & \text{para } T < T_c \\ 0 & \text{para } T \geq T_c \end{cases} \tag{236}$$

com:

$$l = e^{-2\beta J}, \quad l_c = \sqrt{2} - 1 \tag{237}$$

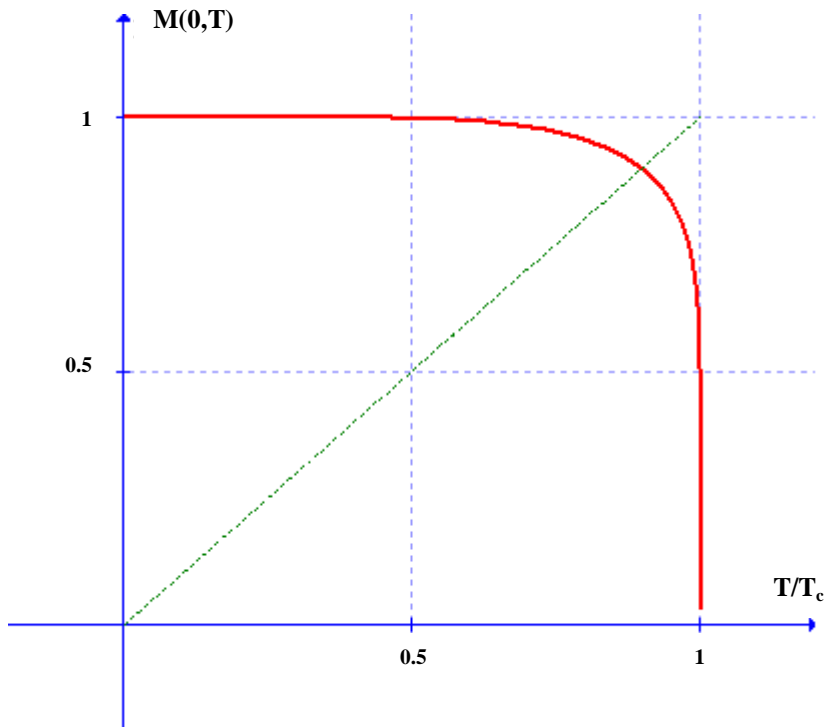


Fig. 9 Magnetização espontânea segundo a solução de Onsager

2.9 A TÉCNICA DE MATRIZ DE TRANSFERENCIA

A idéia básica é considerar a matriz de transferência diagonal a diagonal como função de dois coeficientes de interação K e L . Considere a rede quadrada do modelo de Ising bidimensional em campo nulo, com topologia toroidal, desenhada diagonalmente como na Figura 10. Agruparemos as posições da rede em linhas horizontais, as quais podem ser de dois tipos: linhas com círculos abertos e com círculos fechados.

Considere m sendo o número de linhas na rede, numeradas de baixo para cima. Imporemos condições de contorno de forma que a linha r esteja abaixo da linha $r+1$ e a linha m esteja abaixo da linha 1. Considere n o número de posições em cada linha, numeradas da esquerda para a direita. Imporemos novamente condições de contorno para que a posição n esteja à esquerda da posição 1.

Considere ϕ_r sendo o conjunto de todas as posições na linha r , de forma que ϕ tem 2^n possíveis valores. Sejam duas linhas sucessivas, $\phi = \{\sigma_1, \dots, \sigma_n\}$ sendo os spins na linha inferior e $\phi' = \{\sigma'_1, \dots, \sigma'_n\}$ os spins na linha superior.

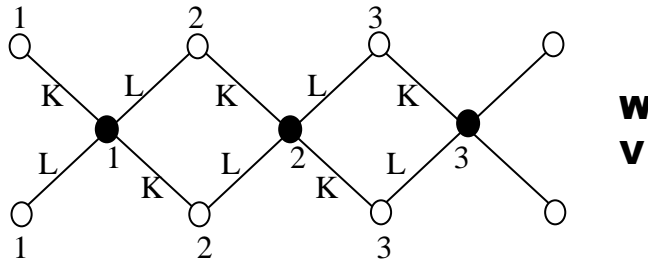


Fig. 10 Três linhas sucessivas da rede quadrada desenhada diagonalmente

Observa-se que:

$$V_{\phi, \phi'} = \exp \left[\sum_{j=1}^n (K \sigma_{j+1} \sigma'_j + L \sigma_j \sigma'_j) \right] \quad (238)$$

$$W_{\phi, \phi'} = \exp \left[\sum_{j=1}^n (K \sigma_j \sigma'_j + L \sigma_j \sigma'_{j+1}) \right]$$

Como os spins interagem apenas com os vizinhos mais próximos nas linhas adjacentes, a função partição pode ser escrita como:

$$Z_N = \sum_{\phi_1} \sum_{\phi_2} \cdots \sum_{\phi_n} V_{\phi_1, \phi_2} W_{\phi_2, \phi_3} V_{\phi_3, \phi_4} W_{\phi_4, \phi_5} \cdots W_{\phi_n, \phi_1} \quad (239)$$

Pela equação (238), $V(\phi, \phi')$ é o elemento ϕ, ϕ' da matriz V . O mesmo se diz da matriz W . A equação (239) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} Z_N &= \text{Tr} V W V W \dots W \\ &= \text{Tr} (V W)^{m/2} \end{aligned} \quad (240)$$

ϕ e ϕ' têm 2^n valores e V e W são matrizes $2^n \times 2^n$. A equação anterior pode ser escrita como:

$$Z_N = \Lambda_1^m + \Lambda_2^m + \dots + \Lambda_{2^n}^m \quad (241)$$

onde $\Lambda_1^m, \Lambda_2^m, \dots$ são os autovalores de VW . As matrizes V e W são conhecidas como as matrizes de transferência. Devemos encontrar os autovalores de VW . Estamos interessados no limite termodinâmico $m, n \rightarrow \infty$. Seja $m \rightarrow \infty$ e mantendo n fixo, segue:

$$Z_N \sim (\Lambda_{\max})^n \quad (242)$$

sendo Λ_{\max} o maior autovalor de VW .

A seguir mostraremos duas importantes propriedades e algumas relações de simetria de V e W que serão muito importantes no cálculo de Λ_{\max} . Como as matrizes V e W são funções dos coeficientes K e L , escreveremos explicitamente $V(K, L)$ e $W(K, L)$. Generalizando esta notação considere o produto:

$$V(K, L)W(K', L') \quad (243)$$

O produto acima é a matriz de transferência para irmos da linha abaixo de círculos abertos para a linha acima de círculos abertos. Cada elemento do produto de matrizes é o produto dos fatores de Boltzmann das quatro extremidades na Figura 10 somados em todos os spins $\sigma_1'', \dots, \sigma_n''$ das linhas intermediárias de círculos fechados, sendo agora os coeficientes K e L das extremidades acima dos círculos fechados substituídos por K' e L' , respectivamente. Sejam $\phi = \{\sigma_1, \dots, \sigma_n\}$ os spins da linha inferior de círculos abertos e $\phi' = \{\sigma_1', \dots, \sigma_n'\}$ os spins da linha superior de círculos abertos. O elemento ϕ, ϕ' do produto matricial da equação (243) é:

$$\sum_{\sigma_1'} \cdots \sum_{\sigma_n'} \prod_{j=1}^n \exp[\sigma_j'' (K\sigma_{j+1} + L\sigma_j + K'\sigma_j' + L'\sigma_{j+1}')] \quad (244)$$

Como σ_j'' aparece somente a cada fator de Boltzmann das quatro extremidades, a soma é configurada em σ_j'' . A equação acima é reescrita:

$$\prod_{j=1}^n X(\sigma_j, \sigma_{j+1}; \sigma_j', \sigma_{j+1}') \quad (245)$$

onde para $a, b, c, d = \pm 1$:

$$X(a, b, c, d) = \sum_{f=\pm 1} \exp[f(La + Kb + K'c + L'd)] \quad (246)$$

Se permutássemos os coeficientes K e K' e os coeficientes L e L' de forma que o produto matricial em (243) não se alterasse, isto é:

$$V(K, L)W(K', L') = V(K', L')W(K, L) \quad (247)$$

verificar-se-ia assim uma relação de comutação generalizada. Pela transformação triângulo para estrela, que é uma relação entre as funções partição dos modelos de Ising triangular e favo de mel, segue que K, L, K' e L' devem satisfazer:

$$\sinh(2K)\sinh(2L) = \sinh(2K')\sinh(2L') \quad (248)$$

A verificação da equação acima não será desenvolvida neste trabalho, pois envolve modelos de Ising bidimensionais em outros arranjos. A equação acima é a condição para a relação de comutação (247).

Outra propriedade importante é a relação para a inversa de V ou W , ou seja, a possibilidade de transformar o produto em (243) em uma matriz diagonal ou quase diagonal. Tal propriedade seria satisfeita se $X(a, b; c, d)$ se anulasse para $a \neq c$ (ou $b \neq d$), que é uma condição muito forte. Entretanto uma condição mais fraca pode ser satisfeita: $X(a, b; c, d)$ se anula para $a \neq c$ e $b = d$. Em outras palavras:

$$\begin{aligned} \cosh(L + K - K' + L') &= 0 \\ \cosh(L - K - K' - L') &= 0 \end{aligned} \quad (249)$$

As equações acima possuem apenas soluções complexas:

$$K' = L + i\pi/2, \quad L' = -K \quad (250)$$

O efeito do requerimento acima é o fato de se σ_j e σ'_j são diferentes, então σ_{j+1} e σ'_{j+1} também são diferentes. Ou seja, todos os (σ_j, σ'_j) são iguais ou são diferentes.

Se são iguais, isto é, para $a = c$ e $b = d$, temos:

$$X_{igual} = 2i \operatorname{senh}(2L) \quad (251)$$

Se são diferentes, isto é, para $a \neq c$ e $b \neq d$, temos:

$$X_{diferente} = -2i \operatorname{absenh}(2K) \quad (252)$$

A expressão final para a equação (245) é:

$$\begin{aligned} & (2i \operatorname{senh} 2L)^n \delta(\sigma_1, \sigma'_1) \delta(\sigma_2, \sigma'_2) \dots \delta(\sigma_n, \sigma'_n) \\ & + (-2i \operatorname{absenh} 2K)^n \delta(\sigma_1, -\sigma'_1) \delta(\sigma_2, -\sigma'_2) \dots \delta(\sigma_n, -\sigma'_n) \end{aligned} \quad (253)$$

que é a expressão para os elementos da matriz $V(K, L)W(K', L')$. Seja I a matriz identidade de dimensão 2^n e R a matriz de inversão de spins com elementos:

$$R(\phi, \phi') = \delta(\sigma_1, -\sigma'_1) \dots \delta(\sigma_n, -\sigma'_n) \quad (254)$$

obtemos assim a identidade:

$$V(K, L)W(L + i\pi/2, -K) = (2i \operatorname{senh} 2L)^n I + (-2i \operatorname{absenh} 2K)^n R \quad (255)$$

Como $R^2 = I$, o lado direito da equação anterior é facilmente inversível. As propriedades mostradas acima são características simples da rede de spins, o que é uma vantagem do modelo como um todo.

Antes da avaliação dos autovalores, seguem algumas relações bastante úteis para as matrizes de transferência. Considere as identidades de simetria:

$$W(K, L) = V^T(L, K) \quad (256)$$

$$V(K, L)W(K, L) = [V(L, K)W(L, K)]^T \quad (257)$$

A equação (256) resulta da permuta entre K e L e cada σ_j com cada σ'_j . Tem-se:

$$V(-K, -L) = RV(K, L) = V(K, L)R \quad (258)$$

O mesmo se aplica a W . Seja r o número de pares diferentes $(\sigma_{j+1}, \sigma'_j)$ e s o número de pares diferentes (σ_j, σ'_j) . Então $r+s$ é o número de mudanças de sinal na sequência $\sigma_1, \sigma'_1, \sigma_2, \sigma'_2, \dots, \sigma_n$, de forma que $r+s$ é par. Temos:

$$V_{\phi, \phi'} = \exp[(n-2r)K + (n-2s)L] \quad (259)$$

com:

$$n = 2p \quad (260)$$

onde p é um número inteiro. Finalmente:

$$V_{\phi, \phi'} = \exp[\pm 2r'K \pm 2s'L] \quad (261)$$

onde r' e s' são inteiros não negativos entre 0 e p , sendo ambos pares ou ímpares, de forma que a equação anterior não se altera se ambos $\exp(2K)$ e $\exp(2L)$ forem negativos.

Da afirmação anterior segue:

$$V(K \pm i\pi/2, L \pm i\pi/2) = V(K, L) \quad (262)$$

As equações (258) e (262) também se aplicam a W . Seja C a matriz $2^n \times 2^n$ com elementos:

$$\delta(\sigma_1, \sigma'_2) \delta(\sigma_2, \sigma'_3) \dots \delta(\sigma_n, \sigma'_1) \quad (263)$$

Este operador desloca as colunas da rede da esquerda para a direita. A transformação $A \rightarrow C^{-1}AC$ tem o efeito de trocar as identificações das posições $1, \dots, n$ da matriz A , por $2, \dots, n, 1$. Da equação (238) segue:

$$V(K, L) = C^{-1}V(K, L)C \quad (264)$$

$$W(K, L) = C^{-1}W(K, L)C \quad (265)$$

$$W(K, L) = V(K, L)C \quad (266)$$

de forma que $V(K, L)$, $W(K, L)$ e C comutam entre si. Substituindo (266) em (247):

$$V(K, L)V(K', L') = V(K', L')V(K, L) \quad (267)$$

Desde que a equação (248) seja satisfeita. Assim $V(K, L)$, $V(K', L')$, $W(K, L)$ e $W(K', L')$ comutam entre si. Podemos então eliminar a matriz W pela equação (266) e a identidade (255) resulta em:

$$V(K, L)V(L + i\pi/2, -K)C = (2i\sinh 2L)^n I + (-2i\sinh 2K)^n R \quad (268)$$

Finalmente, temos da eq. (254):

$$V(K, L) = R^{-1}V(K, L)R \quad (269)$$

Já que a transformação $A \rightarrow C^{-1}AC$ neste caso é equivalente a negatizar todos os spins $\sigma_1, \dots, \sigma_n, \sigma'_1, \dots, \sigma'_n$. Portanto $V(K, L)$ também comuta com R e mesmo ocorre para $W(K, L)$.

Como as matrizes V, C e R comutam entre si, elas têm o mesmo conjunto de autovetores. Considere a relação:

$$k = (2\sinh 2K \sinh 2L)^{-1} \quad (270)$$

onde k é um determinado número real, e K e L são variáveis complexas sujeitas à relação (270). Há um infinito conjunto de matrizes V , que podem ser geradas apenas variando K e L . Seja v um autovetor das matrizes V, R e C . Ele não pode depender de K ou L , pois a equação (270) deve ser satisfeita. Ele pode depender e depende de k , de modo que $v=v(k)$.

Sejam $v(K, L), c, r$ os autovalores de $V(K, L), C, R$. Para qualquer K, L satisfazendo (270):

$$\begin{aligned} V(K, L)v(k) &= v(K, L)v(k) \\ Cv(k) &= cv(k) \\ Rv(k) &= rv(k) \end{aligned} \tag{271}$$

Como $C^n = R^2 = I$, c e r são constantes de módulo 1 satisfazendo:

$$c^n = r^2 = 1 \tag{272}$$

Se K, L satisfazem (270), o mesmo ocorre para K', L' . Segue:

$$\begin{aligned} v(K, L)v(L + i\pi/2, -K)c \\ = (2i\sinh 2L)^n + (-2i\sinh 2K)^n r \end{aligned} \tag{273}$$

Os autovalores do produto VW então são dados por:

$$\Lambda^2(K, L) = v^2(K, L)c \tag{274}$$

e $\Lambda(K, L)$ é definido por:

$$\Lambda(K, L) = v(K, L)c^{\frac{1}{2}} \tag{275}$$

onde $\Lambda(K, L)$ é o correspondente Λ_j . A equação (273) pode ser escrita:

$$\begin{aligned} & \Lambda(K, L)\Lambda(L + i\pi/2, -K) \\ & = (2i\sinh 2L)^n + (-2i\sinh 2K)^n \end{aligned} \quad (276)$$

A equação acima é uma relação funcional de $\Lambda(K, L)$ e junto com algumas propriedades analíticas simples de $\Lambda(K, L)$ determina $\Lambda(K, L)$ completamente.

Pelo argumento de Kramers e Wannier (1941) para encontrar a temperatura crítica numa rede quadrada:

$$\sinh(2K)\sinh(2L) = 1 \quad (277)$$

A relação acima é a para a temperatura crítica numa rede quadrada, de que para $T=T_c$, $k=1$. Segue então que se $T < T_c$, $k < 1$ e se $T > T_c$, $k > 1$. Restringiremo-nos a encontrar os autovalores Λ para $k=1$ e $k < 1$. Não detalharemos o argumento de Kramers e Wannier neste trabalho.

Agora encontraremos os autovalores de Λ para $T=T_c$. Fazendo uma parametrização de K e L , é conveniente definir:

$$\begin{aligned} \sinh 2K &= \operatorname{tg} u \\ \sinh 2L &= \operatorname{cot} u \end{aligned} \quad (278)$$

A condição (270) é automaticamente satisfeita. $\Lambda(K, L)$ se torna $\Lambda(u)$ de modo que a eq. (276) se torna:

$$\Lambda(u)\Lambda(u + \pi/2) = (2i \operatorname{cot} u)^n + (-2i \operatorname{tg} u)^n \quad (279)$$

Da equação (278) segue que $\exp(\pm 2K)$ e $\exp(\pm 2L)$ são funções simples de u :

$$\begin{aligned} \exp(2K) &= (1 + \operatorname{sen} u) / \cos u \\ \exp(-2K) &= (1 - \operatorname{sen} u) / \cos u \\ \exp(2L) &= (1 + \cos u) / \operatorname{sen} u \\ \exp(-2L) &= (1 - \cos u) / \operatorname{sen} u \end{aligned} \quad (280)$$

As funções acima, considerando u uma variável complexa, são monovaloradas, meromorfas, isto é, suas singularidades são polos, de fato polos simples, e são periódicas.

Substituindo a forma de (280) em (261), os elementos da matriz $V_{\phi, \phi'}$ se tornam:

$$V_{\phi, \phi'} = t(u) / (\operatorname{sen} u \cos u)^p \quad (281)$$

onde $t(u)$ é um polinômio em $\operatorname{sen} u$ e $\cos u$, podendo ser escrito como:

$$t(u) = e^{-2ipu} (c_0 + c_1 e^{iu} + \dots + c_{2n} e^{4ipu}) \quad (282)$$

Os autovalores $\nu(K, L)$ da eq. (271) são combinações lineares dos elementos da matriz $V(K, L)$, sendo os coeficientes combinações dos elementos dos vetores $v(k)$. como estas combinações dependem apenas de k e não de u , $\nu(K, L)$ é uma combinação linear da forma de (281) com coeficientes constantes.

$\Lambda(K, L)$ agora será $\Lambda(u)$ na nova forma. Se u fosse substituído por $u + \pi$, uma forma equivalente seria obtida trocando K e L por $-K \pm i\pi/2$ e $-L \pm i\pi/2$, que seria o mesmo que multiplicar $V(K, L)$ por R :

$$V(K, L)Rv(k) = \nu(u + \pi)v(k) \quad (283)$$

$$\nu(u + \pi) = r\nu(u) \quad (284)$$

$$\Lambda(u + \pi) = \Lambda(u) \quad (285)$$

O polinômio em (282), pelas relações de periodicidade acima, tem coeficientes não nulos para $r = +1$, e coeficientes não nulos ímpares se $r = -1$. Segue a relação:

$$\Lambda(u) = \rho (\operatorname{sen} u \cos u)^{-p} \prod_{j=1}^l \operatorname{sen}(u - u_j) \quad (286)$$

onde ρ, u_1, \dots, u_l são constantes e:

$$\begin{aligned} l &= 2p & \text{se } r &= +1 \\ l &= 2p - 1 & \text{se } r &= -1 \end{aligned} \quad (287)$$

Para encontrarmos os zeros de $\Lambda(u)$ vamos substituir a equação (286) em (279):

$$\rho^2 \prod_{j=1}^l \text{sen}(u - u_j) \cos(u - u_j) = 2^{2p} [\cos^{4p} u + \text{sen}^{4p} u] \quad (288)$$

reescrevendo a equação acima em termos das variáveis:

$$z = \exp(2iu), \quad z_j = \exp(2iu_j) \quad (289)$$

temos:

$$\rho^2 (-i/4)^l \prod_{j=1}^l [(z^2 - z_j^2)/z_j] = 2^{-2p} z^{l-2p} [(z+1)^{4p} + r(z-1)^{4p}] \quad (290)$$

Ambos os lados da equação acima são polinômios de grau l em z^2 . Obviamente z_1^2, \dots, z_n^2 são os l zeros distintos sendo dados por:

$$z_j^2 = -tg^2(\theta_j/2) \quad (291)$$

onde:

$$\begin{aligned} \theta_j &= \pi(j-1/2)/2p & \text{se } r &= +1 \\ \theta_j &= \pi j/2p & \text{se } r &= -1 \end{aligned} \quad (292)$$

com todos os θ_j entre 0 e π .

Defina:

$$\phi_j = \frac{1}{2} \ln tg(\theta_j/2), \quad j = 1, \dots, l \quad (293)$$

segue das equações (289) e (291):

$$u_j = (\mp \pi/4 - i\phi_j), \quad j = 1, \dots, l \quad (294)$$

Da equação acima conclui-se que existem 2^l soluções distintas para a equação (286). Existem outras, mas estas correspondem a u_j somado a um múltiplo de π , o que no máximo altera irrelevantemente o sinal de $\Lambda(u)$. Nem todas estas soluções, entretanto, são possíveis. Suponha $u \rightarrow \pm\infty$. Isso significa que $\exp(2K)$ e $\exp(2L) \rightarrow \pm i$. Mas pela equação (262), negativar ambos $\exp(2K)$ e $\exp(2L)$ não altera os elementos da matriz de transferência. Então:

$$\Lambda(i\infty) = \Lambda(-i\infty) \quad (295)$$

A condição acima é automaticamente satisfeita para $r = -1$, pois:

$$\Lambda(i\infty) = \Lambda(-i\infty) = 0 \quad (296)$$

Se $r = +1$:

$$(u_1 + \dots + u_{2p})/\pi = \text{inteiro} + p/2 \quad (297)$$

e portanto:

$$\Lambda(i\infty) = -\Lambda(-i\infty) \quad (298)$$

e apenas $2p - 1$ sinais podem ser escolhidos em (294), resultando em 2^{2p-1} autovalores para $r = +1$, e também para $r = -1$. Segue que a equação (296) também ocorre para $r = +1$. Assim todos os autovalores Λ são nulos para $T=T_c$, e não há magnetização espontânea como esperado.

A expressão final dos autovalores para $k=1$ é:

$$\Lambda(u) = \rho(\operatorname{sen} u \cos u)^{-p} \prod_{j=1}^l \operatorname{sen}\left(u + i\phi_j + \frac{1}{4}\gamma_j\pi\right) \quad (299)$$

com:

$$\gamma_1, \dots, \gamma_n = \pm 1 \quad (300)$$

e os autovalores das matrizes de transferência para $T=T_c$ são obtidos através de álgebra ordinária.

Agora encontraremos os autovalores para $T < T_c$. Fazendo uma nova parametrização de K e L :

$$\begin{aligned} \operatorname{senh} 2K &= x \\ \operatorname{senh} 2L &= (kx)^{-1} \end{aligned} \quad (301)$$

resultando em:

$$\begin{aligned} \exp(2K) &= x + (1 + x^2)^{1/2} \\ \exp(2L) &= (kx)^{-1} \left[1 + (1 + k^2 x^2)^{1/2} \right] \end{aligned} \quad (302)$$

A parametrização acima não pode ser feita por funções elementares que façam $1 + x^2$ e $1 + k^2 x^2$ quadrados perfeitos. Contudo, pode ser feita por meio de funções elípticas. Segue agora uma breve descrição das funções elípticas $\operatorname{sn} u$, $\operatorname{cn} u$ e $\operatorname{dn} u$. Tais funções são meromorfas e obedecem às relações:

$$\begin{aligned} \operatorname{cn}^2 u &= 1 - \operatorname{sn}^2 u \\ \operatorname{dn}^2 u &= 1 - k^2 \operatorname{sn}^2 u \end{aligned} \quad (303)$$

As funções elípticas usuais são funções de duas variáveis: o nome q e o argumento u , sendo q uma constante real entre 0 e 1, e u uma variável complexa. Sejam I e I' as magnitudes de meio período dadas por:

$$I = \frac{1}{2} \pi \prod_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1+q^{2n-1}}{1-q^{2n-1}} \cdot \frac{1-q^{2n}}{1+q^{2n}} \right)^2 \quad (304)$$

$$I' = \pi^{-1} I \ln(q^{-1}) \quad (305)$$

$$q = \exp(-\pi I' / I) \quad (306)$$

sendo I no eixo real e I' no eixo complexo. E seja k o módulo e k' o módulo conjugado.

As funções teta são:

$$\begin{aligned} H(u) &= 2q^{1/4} \operatorname{sen} \frac{\pi u}{2I} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - 2q^{2n} \cos \frac{\pi u}{I} + q^{4n} \right) (1 - q^{2n}) \\ H_1(u) &= 2q^{1/4} \cos \frac{\pi u}{2I} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + 2q^{2n} \cos \frac{\pi u}{I} + q^{4n} \right) (1 - q^{2n}) \\ \Theta(u) &= \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 - 2q^{2n-1} \cos \frac{\pi u}{I} + q^{4n-2} \right) (1 - q^{2n}) \\ \Theta_1(u) &= \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + 2q^{2n-1} \cos \frac{\pi u}{I} + q^{4n-2} \right) (1 - q^{2n}) \end{aligned} \quad (307)$$

As funções elípticas jacobianas são obtidas por meio das funções acima:

$$\begin{aligned} \operatorname{sn} u &= k^{-1/2} H(u) / \Theta(u) \\ \operatorname{cn} u &= (k' / k)^{1/2} H_1(u) / \Theta(u) \\ \operatorname{dn} u &= k'^{1/2} \Theta_1(u) / \Theta(u) \end{aligned} \quad (308)$$

As funções teta são inteiras, ou seja, são analíticas em todo o plano complexo, e seus zeros são todos zeros simples. Os zeros de $H(u)$ e $\Theta(u)$ em particular são:

$$H(u) = 0, \quad \text{se } u = 2mI + 2inI' \quad (309)$$

$$\Theta(u) = 0, \quad \text{se } u = 2mI + i(2n-1)I' \quad (310)$$

com m e n inteiros. Das equações (307) segue que as funções sn , cn e dn são meromorfas, ou seja, suas singularidades são polos. Considere as relações de quasiperiodicidade:

$$H(u + 2I) = -H(u) \quad (311)$$

$$H(u + 2iI') = -q^{-1} \exp(-\pi i u / I) H(u) \quad (312)$$

e as relações:

$$\begin{aligned} H_1(u) &= H(u + I), \quad \Theta_1(u) = \Theta(u + I), \\ \Theta(u) &= -iq^{1/4} \exp\left(\frac{1}{2} \pi i u / I\right) H(u + iI') \\ \Theta_1(u) &= q^{1/4} \exp\left(\frac{1}{2} \pi i u / I\right) H(u + I + iI') \end{aligned} \quad (313)$$

de fato, as funções sn , cn e dn são ditas duplamente periódicas, pois satisfazem as relações:

$$f(u + 2I) = \pm f(u), \quad f(u + 2iI') = \pm f(u) \quad (314)$$

Se uma função é conhecida dentro e no contorno de um retângulo de período, sendo este um retângulo no plano complexo de comprimento $2I$ e altura $2iI'$, então seu valor em qualquer ponto do plano complexo pode ser repetido por meio da equação (314).

Considere os seguintes teoremas, que serão úteis:

(2.9a) Teorema de Liouville: se uma função é duplamente periódica e analítica dentro e sobre um retângulo de período, então ela é constante.

(2.9b) Se uma função é duplamente periódica e meromorfa, e tem n polos por retângulo de período, então ela também tem n zeros por retângulo de período.

(2.9c) Se uma função é meromorfa e satisfaz as condições de periodicidade:

$$\begin{aligned} f(u + 2I) &= (-1)^s f(u) \\ f(u + 2iI') &= (-1)^r f(u) \end{aligned} \quad (315)$$

com r e s inteiros, e se $f(u)$ tem n polos por retângulo de período em u_1, \dots, u_n (contando um polo de ordem r como r polos simples coincidindo) então:

$$f(u) = Ce^{i\lambda u} \prod_{j=1}^n \left[\frac{H(u - u_j)}{H(u - v_j)} \right] \quad (316)$$

sendo C, λ e u_1, \dots, u_n constantes satisfazendo:

$$u_1 + \dots + u_n = v_1 + \dots + v_n + (r + 2m)I - i(s + 2n)I' \quad (317)$$

$$\lambda = \frac{1}{2} \pi (s + 2n) I' \quad (318)$$

com m e n também inteiros. Pelo teorema acima, qualquer função duplamente periódica e meromorfa pode ser expressa em termos da equação (316). Considere:

$$u = \int_0^\phi \frac{d\alpha}{(1 - k^2 \operatorname{sen}^2 \alpha)^{1/2}} \quad (319)$$

esta é a integral que relaciona u e $sn u$, com $sn u$ definido por:

$$sn u = \operatorname{sen} \alpha \quad (320)$$

sendo ϕ a amplitude. Segue:

$$cn u = \cos \alpha \quad (321)$$

$$Am(u) = \phi \quad (322)$$

Uma função útil é a função amplitude:

$$Am(u) = -i \ln \left[ik^{1/2} sn(u - iI'/2) \right] \quad (323)$$

Seja:

$$I = \int_0^{\pi/2} \frac{d\alpha}{(1 - k^2 \operatorname{sen}^2 \alpha)^{1/2}} \quad (324)$$

a expressão para I conhecida como integral elíptica completa do primeiro tipo de módulo k . Se u é um imaginário puro positivo, $sn u$ também o é, sendo $cn u$ e $dn u$ números reais de mesmo sinal. Pelas equações (307) e (308) $sn u$ tende ao infinito no limite $u \rightarrow iI'$. Fazendo $\alpha = i\beta$, (319) resulta em:

$$I' = \int_0^{\infty} \frac{d\beta}{(1 + k^2 \operatorname{senh}^2 \beta)^{1/2}} \quad (325)$$

Por meio da relação:

$$\operatorname{tg} \gamma = \operatorname{senh} \beta \quad (326)$$

a equação (319) resulta em:

$$I' = \int_0^{\pi/2} \frac{d\gamma}{(1 - k'^2 \operatorname{sen}^2 \gamma)^{1/2}} \quad (327)$$

sendo que k e k' obedecem à relação:

$$k^2 + k'^2 = 1 \quad (328)$$

Agora retornaremos à avaliação dos autovalores. Fazendo:

$$x = -i \operatorname{sn} u \quad (329)$$

então:

$$\begin{aligned}\exp(\pm 2K) &= cn\,iu \mp sn\,iu \\ \exp(\pm 2L) &= ik^{-1}(dn\,iu \pm 1)/sn\,iu\end{aligned}\quad (330)$$

Em termos das funções teta, a equação acima se torna:

$$\begin{aligned}\exp(\pm 2K) &= [k^{1/2}H_1(iu) \mp iH(iu)]/[k^{1/2}\Theta(iu)] \\ \exp(\pm 2L) &= i[k^{1/2}\Theta_1(iu) \pm \Theta(iu)]/[k^{1/2}H(iu)]\end{aligned}\quad (331)$$

Se iu é um imaginário puro, então $-i\,sn\,iu$ aumenta monotonicamente com $\text{Im}(iu)$. Das equações (301) e (329) podemos relacionar o coeficiente de interação K e o parâmetro u :

$$sn\,iu = \text{sen}\,2iK \quad (332)$$

Das equações (319) e (320), fazendo $\alpha = i\beta$, temos:

$$u = \int_0^{2K} \frac{d\beta}{(1 + k^2 \text{senh}^2 \beta)^{1/2}} \quad (333)$$

E se K e L são reais e positivos, então u é real e $0 < u < I'$. Se $k=1$, comparando com o caso $T=T_c$, então $I = \infty$, $I' = \pi/2$ e $sn\,iu = i\,tg\,u$. Assim as equações (331) de fato se reduzem a (280). As funções elípticas mostradas neste trabalho são definidas apenas para $0 < k < 1$. Contudo, mais adiante esta restrição será removida.

A partir de agora a forma de $\Lambda(u)$ se dará em torno das funções elípticas e similarmente ao caso em que $T=T_c$. Pela equação (331) os elementos de V na equação (261) são da forma:

$$V_{\phi,\phi'} = \frac{\dots}{[h(iu)]^p} \quad (334)$$

onde:

$$h(iu) = H(iu)\Theta(iu) \quad (335)$$

e o ... na equação (334) é uma função inteira de u . Resultando numa nova expressão de Λ :

$$\Lambda(u) = \frac{\dots}{[h(iu)]^p} \quad (336)$$

Novamente ... é uma função inteira de u . Considere o efeito de somar u a $2I'$ e $-2iI$. Somar u a $2I'$ em (330) é equivalente a substituir K e L por $-K \pm i\pi/2$ e $-L \pm i\pi/2$. Isso substitui Λ por $r\Lambda$, onde $r = \pm 1$ é o autovalor da matriz de reversão de spin R :

$$\Lambda(u + 2I') = r\Lambda(u) \quad (337)$$

Somar u a $-2iI$ em (330) é equivalente a substituir K e L por $K \pm i\pi/2$ e $L \pm i\pi/2$. Como $r's'$ é par, isso não muda os elementos de V :

$$\Lambda(u - 2iI) = \Lambda(u) \quad (338)$$

Com o auxílio do teorema 2.9c podemos escrever uma expressão para $\Lambda(u)$, que pelas equações (337) e (338) é duplamente periódico e pela eq. (334) tem $2p$ polos por retângulo de período:

$$\Lambda(u) = \rho e^{\lambda u} [h(iu)]^{-p} \prod_{j=1}^{2p} H(iu - iu_j) \quad (339)$$

onde u_1, \dots, u_{2p} são os zeros de $\Lambda(u)$ dentro do retângulo de período, ρ e λ são constantes e λ deve ser escolhido de forma a assegurar (337) e (338). O próximo passo é determinar os zeros de $\Lambda(u)$ pela identidade (276), que se torna:

$$\Lambda(u)\Lambda(u + I') = \left(\frac{-2}{k sniu} \right)^n + (-2 sniu)^n r \quad (340)$$

Por meio da combinação das relações (301) e (329). Substituir u por $u+I'$ em (330) é equivalente a substituir K, L por $L+i\pi/2, -K$. Isso é possível por meio de:

$$\begin{aligned} sn(u+iI') &= (k sn u)^{-1} \\ cn(u+iI') &= -i dnu / (k sn u) \end{aligned} \quad (341)$$

segue que a equação (340) se torna:

$$\begin{aligned} \rho^2 \exp[\lambda(2u+I')] \prod_{j=1}^{2p} H(iu-iu_j) H(iu-iu_j+iI') \\ = (4/k) [\Theta^{4p}(iu) + rH^{4p}(iu)] \end{aligned} \quad (342)$$

que é a generalização da equação (334). Pela equação anterior, $u+I'$ também é solução, logo os zeros do lado direito ocorrem quando:

$$(k sn^2 iu)^{2p} + r = 0 \quad (343)$$

e o lado esquerdo da equação acima é uma função duplamente periódica de iu , com períodos $2I$ e $2I'$. Ela tem um polo de ordem $4p$ por retângulo de período e portanto, pelo teorema 2.9b tem $4p$ zeros por retângulo de período. Para encontrar os zeros defina:

$$u = -I'/2 - i\phi \quad (344)$$

Pela relação (323), (343) se torna:

$$\exp[4ip Am(\phi)] + r = 0 \quad (345)$$

Definindo θ_j como em (293), a equação (345) é satisfeita com $\phi = \phi_j$, onde:

$$Am(\phi_j) = \theta_j - \pi/2 \quad (346)$$

A função amplitude definida em (323) aumenta monotonicamente de $-\pi/2$ a $\pi/2$ quando ϕ aumenta de $-I$ a I . Como $0 < \theta_j \leq I$, a eq. (346) tem uma única solução real para cada ϕ_j , com $-I < \phi_j \leq I$. Da equação (341), u e $u+I'$ são soluções da equação (343), logo a mesma tem $4p$ soluções:

$$u = \mp I'/2 - i\phi_j, \quad j = 1, \dots, 2p \quad (347)$$

A solução geral é:

$$u_j = -\gamma_j I'/2 - i\phi_j \quad (348)$$

$$\gamma_j = \pm 1, \quad j = 1, \dots, 2p \quad (349)$$

esta é a generalização da equação (294): o valor $j=2p$ quando $r = -1$ é excluído, pois quando $k \rightarrow 1$, I e ϕ_{2p} tendem ao infinito. Nem todas as soluções de (348) são possíveis. O teorema 2.9c impõe a restrição (317), que associada às equações (336), (337) (338) e (339) se torna:

$$u_1 + \dots + u_{2p} = (p + 2l')I' + i[(1-r)/2 + 2l]I \quad (350)$$

com l e l' inteiros. Se $r = +1$, todos os ϕ_j ocorrem em pares $(\phi, -\phi)$. Se $r = -1$ ocorre o mesmo, exceto para $\phi_p = 0$ e $\phi_{2p} = I$. Pela equação (348) a parte imaginária da equação anterior é satisfeita. Já as partes reais, para $r = \pm 1$, resultam:

$$\gamma_1 + \dots + \gamma_{2p} = 2p - 4 \times \text{inteiro} \quad (351)$$

de forma que, combinados, os casos $r = +1$ e $r = -1$ possuem $2^n = 2^{2p}$ autovalores. O número é o esperado, já que V e W são matrizes $2^n \times 2^n$. A equação (339) se torna:

$$\Lambda(u) = \rho[h(iu)]^{-p} \prod_{j=1}^{2p} e^{-\pi \gamma_j u / 4I} H(iu - \phi_j + i\gamma_j I'/2) \quad (352)$$

com a devida substituição de λ . Usando a relação entre $H(u + iI')$ e $\Theta(u)$:

$$\Lambda^2(u) = \rho' \prod_{j=1}^{2p} \frac{H(iu - \phi_j + i\gamma_j I'/2) \Theta(iu - \phi_j - i\gamma_j I'/2)}{H(iu) \Theta(iu)} \quad (353)$$

com ρ' sendo outra constante. Usando agora a equação (308):

$$\Lambda^2(u) = D \prod_{j=1}^{2p} k^{1/2} sn(iu - \phi_j + i\gamma_j I'/2) \quad (354)$$

onde D , que é independente de $\gamma_1, \dots, \gamma_{2p}$, é dado por:

$$D = \rho' \prod_{j=1}^{2p} \frac{\Theta(iu - \phi_j + iI'/2) \Theta(iu - \phi_j - iI'/2)}{H(iu) \Theta(iu)} \quad (355)$$

D é uma função duplamente periódica de iu , com polos, de ordem $2p$ em $iu = 0$ e $iu = iI'$, pelas equações (309) e (310), e $2p$ zeros simples em $iu = \phi_j \pm I'/2$, com $j = 1, \dots, 2p$. Das relações (343) a (347), tal função é:

$$\frac{(k sn^2 iu)^{2p} + r}{(k^{1/2} sn iu)^{2p}} \quad (356)$$

Como D é uma função inteira e duplamente periódica de iu , pelo teorema 2.9a é constante. O termo D pode ser substituído em (356) com o acréscimo de uma constante de normalização, resultando em:

$$\begin{aligned} & \Lambda^2(u) \\ &= \tau \left[\left(\frac{2}{k sn iu} \right)^{2p} + r (2 sn iu)^{2p} \right] \prod_{j=1}^{2p} k^{1/2} sn(iu - \phi_j + i\gamma_j I') \end{aligned} \quad (357)$$

onde:

$$\begin{aligned}\tau &= +1, \text{ se } r = +1 \\ \tau &= -i, \text{ se } r = -1\end{aligned}\tag{358}$$

Agora eliminaremos as funções elípticas, encontrando expressões gerais para os autovalores Λ . Considere:

$$k^{1/2} \operatorname{sn}(\phi_j - iI'/2) = -\exp(i\theta_j)\tag{359}$$

$$\operatorname{cn}(\phi_j - iI'/2) \operatorname{dn}(\phi_j - iI'/2) = -ik^{1/2} \exp(i\theta_j) c_j\tag{360}$$

com:

$$c_j = k^{-1} (1 + k^2 - 2k \cos 2\theta_j)^{1/2}\tag{361}$$

Usando a fórmula:

$$\operatorname{sn}(u \pm v) = \frac{\operatorname{sn} u \operatorname{cn} v \operatorname{dn} v \pm \operatorname{cn} u \operatorname{sn} v \operatorname{dn} u}{1 - k^2 \operatorname{sn}^2 u \operatorname{sn}^2 v}\tag{362}$$

segue:

$$k^{1/2} \operatorname{sn}(iu - \phi_j + iI'/2) = \frac{\operatorname{cni} u \operatorname{dni} u - ik c_j \operatorname{sn} iu}{\exp(-i\theta_j) - k \exp(i\theta_j) \operatorname{sn}^2(iu)}\tag{363}$$

Considere também:

$$\begin{aligned}\operatorname{senh} 2K &= -i \operatorname{sn} iu \\ \operatorname{cosh} 2K &= \operatorname{cni} u \\ \operatorname{senh} 2L &= i / (k \operatorname{sn} iu) \\ \operatorname{cosh} 2L &= i \operatorname{dni} u / (k \operatorname{sn} iu)\end{aligned}\tag{364}$$

com:

$$k^{1/2} \operatorname{sn}(iu - \phi_j - iI'/2) = \left[k^{1/2} \operatorname{sn}(iu - \phi_j + iI'/2) \right]^{1/2} \quad (365)$$

Usando estas relações, Λ pode ser escrito na forma independente de u :

$$\Lambda^2 = \tau(-4)^p \left[(\operatorname{senh}2L)^{2p} + r(\operatorname{senh}2K)^{2p} \prod_{j=1}^{2p} (\mu_j)^{\gamma_j} \right] \quad (366)$$

onde:

$$\mu_j = \frac{\cosh2K \cosh2L + c_j}{\exp(i\theta_j) \operatorname{senh}2K + \exp(-i\theta_j) \operatorname{senh}2L} \quad (367)$$

O resultado acima foi obtido para $k < 1$, o único caso em que as funções elípticas podem ser usadas. Porém, cada autovalor pode ser expresso como uma função algébrica de $\exp(2K)$ e $\exp(2L)$, e a equação acima é continuada analiticamente para $k \geq 1$: sendo c_j positivo para $k < 1$, o mesmo tende a um mínimo valor positivo para $k \rightarrow 1$, sendo a continuação analítica de c_j uma raiz quadrada positiva:

$$\frac{1}{k} - 1 \leq c_j \leq \frac{1}{k} + 1 \quad (368)$$

Se $r = -1$ e $j = 2p$, entretanto, teremos:

$$c_{2p} = (1-k)/k \quad (369)$$

Sendo a continuação analítica da última equação negativa para $k > 1$. Portanto as equações (366) e (367) também se aplicam a $k \geq 1$, pois possuem continuação analítica, exceto para $r = -1$ e $j = 2p$.

Como este modelo não possui uma representação explícita dos autovalores de VW , ele não mostra quantos autovalores há para uma escolha apropriada de γ_j , $j = 1, \dots, 2p$.

Para resolver este problema, consideramos uma temperatura máxima limite (T_c) para a qual o maior dos autovalores pode ser encontrado.

Retornando à equação (242), considerando $N = 2mp$ o número de posições da rede de m linhas, cada uma com $2p$ posições, a energia livre por spin é:

$$-g/k_B T = (2p)^{-1} \ln \Lambda_{\max} \quad (370)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann. Considere a identidade:

$$\mu_j \mu_j^* = \frac{\cosh 2K \cosh 2L + c_j}{\cosh 2K \cosh 2L - c_j} \quad (371)$$

com K e L positivos e:

$$0 \leq c_j \leq \cosh 2K \cosh L \quad (372)$$

O produto dos denominadores de μ_1, \dots, μ_{2p} , se cancelam exatamente com os fatores precedentes na equação (366), exceto para 4^p , resultando em:

$$\Lambda_{\max}^2 = \prod_{j=1}^{2p} 2(\cosh 2K \cosh 2L + c_j) \quad (373)$$

A identidade acima é verdadeira para ambos $r = +1$ e $r = -1$. Entretanto, pelo teorema de Perron-Frobenius, o máximo autovalor de uma matriz com todas as entradas positivas corresponde a um autovetor com todas as entradas também positivas, o que ocorre apenas em $r = +1$. Defina:

$$F(\theta) = \ln \left\{ 2 \left[\cosh 2K \cosh 2L + k^{-1} (1 + k^2 - 2k \cos 2\theta_j)^{1/2} \right] \right\} \quad (374)$$

especificando $r = +1$ segue:

$$\ln \Lambda_{\max} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{2p} F[\pi(j-1/2)/2p] \quad (375)$$

esta soma é dividida uniformemente no intervalo $(0, \pi)$. No limite p grande, ela se torna uma integral dividida no subintervalo $\pi/2p$:

$$-g/k_B T = (2\pi)^{-1} \int_0^{\pi} F(\theta) d\theta \quad (376)$$

este é o principal resultado deste capítulo.

3. METODOLOGIA

O objetivo do trabalho é comparar os resultados das funções termodinâmicas obtidas pela solução de Onsager com as da técnica de matriz de transferência, fazendo uma extensão ao resultado para magnetização espontânea obtido por Yang. Para fazê-lo, buscaremos uma equivalência entre os dois modelos em seus diferentes arranjos. Analisaremos então os resultados obtidos baseado em tudo o que foi pesquisado.

4. RESULTADOS

A ordem de longo alcance é equivalente à existência de magnetização espontânea, como foi obtido por Yang, pois a função correlação entre dois spins é, fazendo o limite para grandes distâncias, numericamente igual ao quadrado do valor médio termodinâmico da magnetização por spin, pois o comprimento de correlação tende a zero:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \rangle^2, \quad \text{para } i - j \text{ grande} \quad (377)$$

A energia livre de Helmholtz por spin obtida pela técnica de matriz de transferência, para o caso isotrópico, isto é:

$$K = L = 2\beta J \quad (378)$$

é exatamente igual ao resultado obtido por Onsager.

Para o caso isotrópico, o resultado de Yang se torna:

$$M_0 = (1 - k^2)^{1/8} \quad (379)$$

onde k é o mesmo do capítulo 2.9, sendo no caso isotrópico definido por:

$$k = (\sinh 2\beta J)^{-2} \quad (380)$$

Portanto a técnica de matriz de transferência reproduz os resultados obtidos pela solução de Onsager.

5. CONCLUSÃO

O modelo de Ising, com sua solução exata para ferromagnetismo, tem se mostrado uma ferramenta bastante útil no estudo do comportamento de materiais magnéticos em transição de fase. Portanto é um excelente laboratório para estudos sobre modelos clássicos de sistemas físicos em transição de fase com solução analítica exata.

REFERÊNCIAS

- MA, Shang-keng. **Statistical mechanics**. Singapore: World Scientific, 1985. 576p.
- HUANG, Kerson. **Statistical mechanics**. 2. ed. Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology, 1987. 493p.
- BAXTER, R. J. **Exactly solved models in statistical mechanics**. London: Academic Press, 2008. 512p.
- GREINER, Walter; NEISE, Ludwig; STÖCKER, Horst. **Thermodynamics and statistical mechanics**. New York: Springer, 1935. 464p.
- VALLADARES, Renato J. C. **Algebra linear**. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos-LTC, 1990. 354p.
- REITZ, John R.; MILFORD, Frederick J.; CHRISTY, Robert W. **Fundamentos da teoria eletromagnética**. Rio de Janeiro: Campus, 1982. 516p.
- GRIFFITHS, David J. **Introduction to quantum mechanics**. 2. ed. New Jersey: Prentice Hall, 1995.
- FAYER, Michael D. **Elements of quantum mechanics**. New York: Oxford University Press, 2001. 356p.
- LAGE, E. J. S. **Física estatística**. Lisboa: Fundação Calouste Gulbenkian, 1995. 652p.
- ARFKEN, George B.; WEBER, Hans J. **Mathematical methods for physicists**. 5. ed. San Diego, California: Academic Press, 1966. 1112p.
- LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. **Statistical physics**. 3. ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1980. 544p. pt. 1, v. 5.

PATHRIA, R. K. **Statistical mechanics**. 2. ed. Oxford, Boston: Butterworth-Heinemann, 1996. 529p.

DWIGHT, Herbert Bristol. **Tables of integrals and other mathematical data**. 4. ed. Lexington, Ma: The MacMillan, 1961. 336p.

COHEN-TANNOUJDI, Claude; DIU, Bernard; LALOE, Frank. **Quantum mechanics**. New Jersey: Wiley, 1991. 914p. v. 1.

Líbero, V. L. De Ising a Metropolis. **Revista Brasileira de Ensino de Física**. v.22, n.3, p. 346-352, set. 2000.

ONSAGER, Lars. Cristal statistics. I. a two-dimensional model with order-disorder transition. **Physical Review**. v.65, n.3-4, p. 117-149, fev. 1944.

KAUFMAN, Bruria; ONSAGER, Lars. Cristal statistics. III. short-range order in a binary Ising lattice. **Physical Review**. v.76, n.8, p. 1244-1252, out. 1949.

KRAMERS, H. A.; WANNIER, G. H. Statistics of a two-dimensional ferromagnet. part I. **Physical Review**. v.60, p. 252- 262, ago. 1941.

YANG, C. N. The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model. **Physical Review**. v. 85, n. 5, p. 808-816, mar. 1952.

SENA, Isaac 'Stevão; LOPES, Vivaldo. **O modelo de Ising**. [S.l.: s.n.], [200-]. 10p.

APÊNDICE A – AS FASES MAGNÉTICAS

Descreveremos neste apêndice as características gerais das fases magnéticas dos materiais.

- FERROMAGNETISMO E ANTIFERROMAGNETISMO

A principal característica de um material ferromagnético é ele apresentar magnetização espontânea, isto é, apresentar um momento dipolo magnético total mesmo na ausência de campo externo. Tal situação existe somente quando a temperatura do sistema está abaixo da temperatura Curie ($T < T_c$). Acima desta, caracteriza-se a fase antiferromagnética, em que não há magnetização espontânea.

Esta propriedade é devida à tendência natural de os spins se alinharem a baixas temperaturas.

Uma situação oposta ocorre nos materiais antiferromagnéticos, onde a tendência é de os spins atômicos ou moleculares não se alinharem a baixas temperaturas, mas sim a altas temperaturas. Portanto nos materiais antiferromagnéticos há magnetização espontânea a temperaturas elevadas, diferentemente dos materiais ferromagnéticos.

Materiais como o ferro, o cobalto e o níquel apresentam ferromagnetismo abaixo da temperatura Curie T_c .

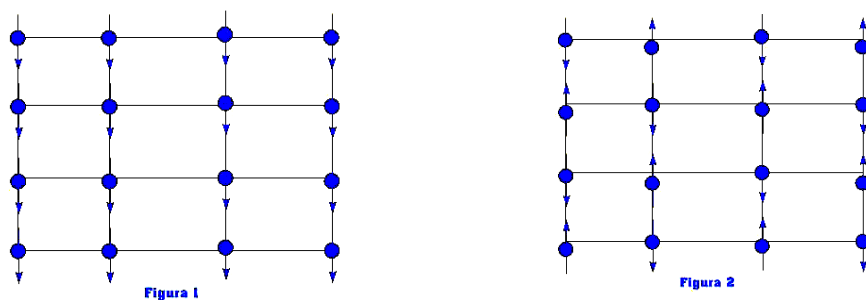


Fig.1 Fase ferromagnética no modelo de Ising.

Fig. 2 Fase antiferromagnética no modelo de Ising.

- PARAMAGNETISMO

Esta propriedade é a tendência dos spins do material se alinharem paralelamente com o campo magnético externo, isto é, nas mesmas direção e sentido. Para apresentar comportamento paramagnético, os átomos ou moléculas de um sistema devem ter momentos magnéticos permanentes que devem tender a se orientar no campo aplicado. Materiais paramagnéticos não apresentam magnetização espontânea. Materiais ferromagnéticos apresentam comportamento paramagnético acima da temperatura Curie.

- DIAMAGNETISMO

Nos materiais diamagnéticos, os spins tendem a se alinharem antiparalelamente com o campo magnético externo (na mesma direção, em sentidos opostos). O diamagnetismo é o resultado da Lei de Lenz operando numa escala atômica. Está presente em todos os tipos de matéria, sendo não perceptível por um comportamento paramagnético ou ferromagnético mais intenso. O diamagnetismo é particularmente intenso em materiais que se constituem inteiramente de átomos ou íons com camadas eletrônicas completas, pois nesses casos todas as contribuições paramagnéticas se cancelam. Da mesma forma que no paramagnetismo, as substâncias diamagnéticas não apresentam magnetização espontânea.

APÊNDICE B – MODELO DE ISING ANTIFERROMAGNÉTICO

Na seção em que é feita a descrição preliminar do modelo de Ising, consideramos o termo de troca J no Hamiltoniano como positivo. Se ele for negativo, os spins tendem a se alinhar antiparalelamente a baixas temperaturas. Este é o modelo de Ising antiferromagnético.

Tomemos a demonstração de Peierls para ausência de ferromagnetismo em uma dimensão. Considere um arranjo linear de N spins em que parte dos spins estejam desalinhados com os demais. O sistema está a uma temperatura T . Elevemos agora em ΔT a temperatura para que todos os spins se alinhem na mesma direção.

A energia do sistema à temperatura T é $E_i = -(N - 1)J + 2J$ e, à temperatura $T + \Delta T$, $E_f = -(N - 1)J$. Temos:

$$\Delta E = 2J < 0 \tag{1}$$

A entropia à temperatura T é $k \cdot \ln(N - 1)$ e a entropia final é zero. A variação na energia de Helmholtz é:

$$\Delta g = 2J + kT \ln(N - 1) \tag{2}$$

No limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$, temos $\Delta g > 0$. Assim fica provado que o modelo de Ising antiferromagnético é inconsistente em uma dimensão.

Na demonstração deste trabalho para duas dimensões, para uma rede quadrada, a probabilidade de haver regiões negativas (spin igual a -1) é:

$$e^{-\frac{2JL}{kT}} \tag{3}$$

Sabemos que L é no mínimo igual a 4 e $J < 0$. Portanto para altas temperaturas a probabilidade de haver regiões negativas é baixa, de modo que o modelo de Ising antiferromagnético em duas dimensões é consistente.

APÊNDICE C – FUNÇÃO PARTIÇÃO

As funções termodinâmicas tais como a magnetização ou a energia total de um sistema são obtidas através da função partição. Considere um sistema com possíveis estados S e seus respectivos Hamiltonianos $E(S)$. Definimos:

$$Z_N = \sum_S \exp\left[\frac{-E(S)}{kT}\right] \quad (1)$$

como a função partição, onde k é a constante de Boltzmann, com o somatório se estendendo sobre todos os estados permitidos. A energia livre de Helmholtz é dada por:

$$g = -kT \cdot \ln Z_N \quad (2)$$

e a probabilidade de o sistema estar em um dado estado S é:

$$Z_N^{-1} \cdot \exp\left[\frac{-E(S)}{kT}\right] \quad (3)$$

então se um dado observável X de um sistema tem valor $X(S)$ para um estado S , então o valor médio termodinâmico observado é:

$$\langle X \rangle = Z_N^{-1} \cdot \sum_S X(S) \exp\left[\frac{-E(S)}{kT}\right] \quad (4)$$

A energia interna de um sistema é:

$$\begin{aligned} U &= \langle E \rangle \\ &= Z_N^{-1} \cdot \sum_S E(S) \exp\left[\frac{-E(S)}{kT}\right] \end{aligned} \quad (5)$$

Usando as equações (1) e (2) verifica-se que:

$$\begin{aligned} U &= kT^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z_N \\ &= -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{g}{T} \right) \end{aligned} \quad (6)$$

O problema básico de um sistema em equilíbrio termodinâmico é calcular sua função partição, ou seja, a soma sobre todos os possíveis estados, podendo esta ser uma integral para sistemas contínuos, ou o traço do espaço de estados em se tratando de Mecânica Quântica. As propriedades termodinâmicas são obtidas por diferenciação.

Contudo, para um sistema macroscópico real, nem sempre é possível avaliar suas interações internas, sendo a obtenção de Z_N uma tarefa difícil. Neste caso, uma das alternativas, ou ambas, a serem seguidas é:

- A. Substituir o sistema real por uma idealização do mesmo, conhecida como modelo, que matematicamente consiste em especificar os estados S e suas funções Hamiltonianas $E(S)$.
- B. Utilizar de métodos aproximativos para se avaliarem as somas sobre os estados.

Alguns dos métodos de aproximação mais conhecidos são

- (i) Células de aproximação
- (ii) Integrais aproximadas para as funções correlação
- (iii) Cálculos computacionais em sistemas macroscópicos em escala microscópica (por exemplo, considerando algumas centenas de átomos).
- (iv) Expansão em séries de potências para alguma variável apropriada, como o inverso da temperatura ou a densidade.

Os métodos de aproximação têm um bom grau de precisão, exceto para temperaturas próximas do ponto crítico T_c .

APÊNDICE D – PRODUTO TENSORIAL

Um processo conhecido para multiplicação de matrizes é o produto direto tensorial, ou produto de Kronecker. Sejam A e B matrizes quadradas $m \times m$ e $n \times n$, respectivamente. O produto direto das duas é:

$$A \times B = C \quad (1)$$

sendo C uma matriz $mn \times mn$ com elementos:

$$C_{\alpha\beta} = A_{ij} B_{kl} \quad (2)$$

com $\alpha = n(i-1) + k$, $\beta = n(j-1) + l$

Por exemplo, sejam A e B ambas matrizes 2×2 :

$$A \times B = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{pmatrix} \quad (3)$$

o produto direto de matrizes é associativo, mas não comutativo. De forma que:

$$A \times B \neq B \times A \quad (4)$$

$$(A \times B) \cdot (C \times D) = (A \cdot C) \times (B \cdot D) \quad (5)$$

A equação (5) pode ser generalizada:

$$\begin{aligned} & (A \times B \times \cdots \times C) \cdot (D \times E \times \cdots \times F) \\ & = (A \cdot D) \times (B \cdot E) \times \cdots \times (C \cdot F) \end{aligned} \quad (6)$$

Na representação matricial da Mecânica Quântica, os elementos de matriz para um produto tensorial são:

$$\langle ii' | A \times B | jj' \rangle = \langle i | A | j \rangle \langle i' | B | j' \rangle \quad (7)$$

A equação (7) pode ser generalizada:

$$\langle ii' \cdots i'' | A \times B \times \cdots \times C | jj' \cdots j'' \rangle = \langle i | A | j \rangle \langle i' | B | j' \rangle \cdots \langle i'' | C | j'' \rangle \quad (8)$$

e a equação (5) fica:

$$\begin{aligned} & \langle ii' | (A \times B)(C \times D) | jj' \rangle \\ & = \sum_{kk'} \langle ii' | A \times B | kk' \rangle \langle kk' | C \times D | jj' \rangle \\ & = \sum_k \langle i | A | k \rangle \langle k | C | j \rangle \cdot \sum_{k'} \langle i' | B | k' \rangle \langle k' | D | j' \rangle \\ & = \langle i | AC | j \rangle \langle i' | BD | j' \rangle \\ & = \langle ii' | (AC) \times (BD) | jj' \rangle \end{aligned} \quad (9)$$

A generalização da equação (6) pode ser provada da mesma forma:

$$\begin{aligned} & \langle ii' \cdots i'' | (A \times B \times \cdots \times C)(D \times E \times \cdots \times F) | jj' \cdots j'' \rangle \\ & = \langle i | (AD) | j \rangle \langle i' | (BE) | j' \rangle \cdots \langle i'' | (CF) | j'' \rangle \\ & = \langle ii' \cdots i'' | (AD) \times (BE) \times \cdots \times (CF) | jj' \cdots j'' \rangle \end{aligned} \quad (10)$$