FI 193 – Teoria Quântica de Sistemas de Muitos Corpos

2º Semestre de 2023

31/08/2023

Aula 9

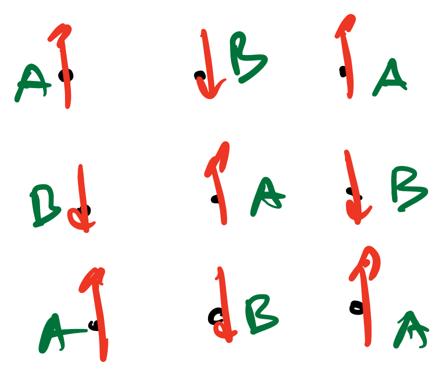
Considerações gerais sobre quebra espontânea de simetria

EM VÁRIOS SISTEMAS FÍSICOS, ABAIXO DE UMA TEMPERATURA CRÍTICA T_c, APARECE UMA NOVA QUANTIDADE TERMODINÂMICA NECESSÁRIA PARA A DESCRIÇÃO MACROSCÓPICA DO SISTEMA. POR EXEMPLO:

a) FM: $\langle \vec{M} \rangle = \langle \sum_i \vec{S}_i \rangle = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \neq 0 & T < T_c \end{cases}$

MAGNETIZAÇÃO

b) AFM:



$\langle \vec{M}_A \rangle = \sum_{i \in A} \langle \vec{S}_i \rangle$

OU

$\langle \vec{M}_B \rangle$

$\langle \vec{M}_A \rangle - \langle \vec{M}_B \rangle = \vec{M}_{ALT} = \vec{M}_{ST}$

c) SUPERFLUIDEZ: $\langle a_0 \rangle$

d) SUPERCONDUTIVIDADE: $\langle \psi_\uparrow(\vec{r})\psi_\downarrow(\vec{r}) \rangle$

SÓ FAZ SENTIDO NO ENSEMBLE GRAND-CANÔNICO

TODAS ESSAS QUANTIDADES SÃO CHAMADAS DE "PARÂMETRO DE ORDEM".

e) $\rho(\vec{k}) = \int d^3r \, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \rho(\vec{r}) \quad \forall \, \vec{k} \in$ REDE RECÍPROCA

ISSO É UM PROBLEMA CONCEITUAL PARA A FÍSICA ESTATÍSTICA QUANTO À MECÂNICA QUÂNTICA.

CASO CLÁSSICO: $H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ $(J>0)$ (FM)

ESSE MODELO TEM UMA SIMETRIA GLOBAL DE ROTAÇÕES: $R \in G$, $\vec{S}_i' = R\vec{S}_i$ ONDE $\vec{S}_i'$ É GIRADO EM RELAÇÃO A $\vec{S}_i$ ATRAVÉS DE $R = R(\theta, \hat{n})$, TAL QUE:

$$H = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J \sum_i \vec{S}_i' \cdot \vec{S}_j'$$

$$E[\text{CONFIGURAÇÃO } \{\vec{S}_i\}] = E[\text{CONF. } \{\vec{S}_i'\}]$$

MAS: $\langle \vec{M} \rangle = \langle \sum_i \vec{S}_i \rangle = Tr\left[\sum_i \vec{S}_i \, e^{-\beta H\{\vec{S}_i\}}\right]$

Tr = SOMA SOBRE TODAS AS CONFIGURAÇÕES.

PARA CADA CONFIGURAÇÃO $\{\vec{S}_i\}$ EXISTE UMA CONFIGURAÇÃO INVERTIDA $\{\vec{S}_i' = R(\pi)\vec{S}_i = -\vec{S}_i\}$ ESSA CONFIGURAÇÃO CONTRIBUI COM $\vec{M}' = -\vec{M}$ E TEM A MESMA ENERGIA E, PORTANTO, O MESMO PESO DE GIBBS-BOLTZMANN. A CONSEQUÊNCIA É QUE:

$$\vec{M} = \mathrm{Tr}\left\{ \sum_i \vec{S}_i \, e^{-\beta H} \right\} = 0$$

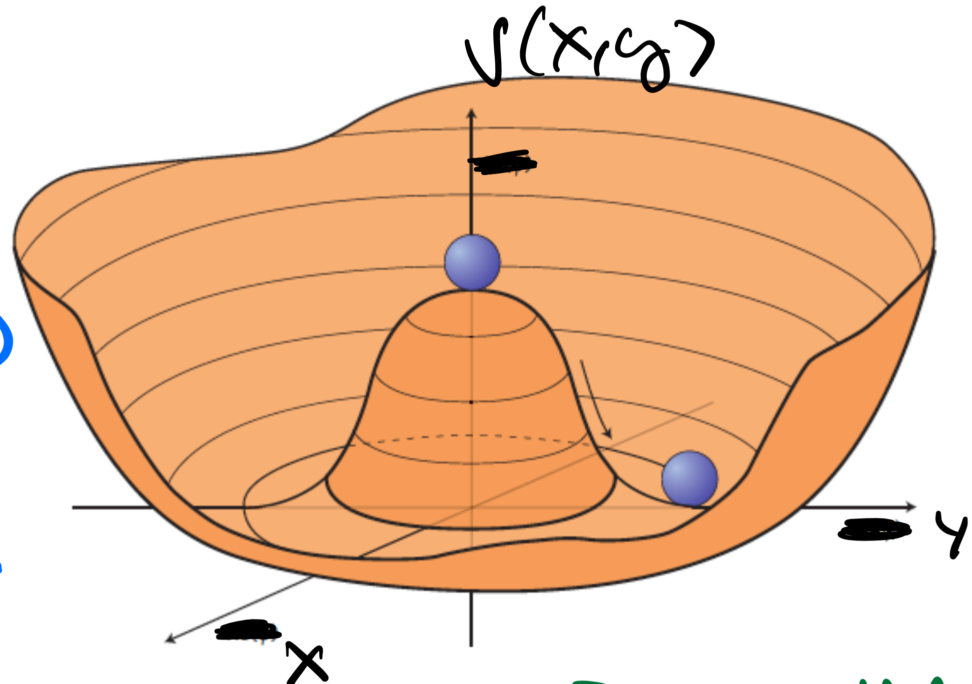
PARA QUALQUER TEMPERATURA.

O APARECIMENTO DO P.O. $T < T_c$, CONHECIDO COMO "QUEBRA ESPONTÂNEA DE SIMETRIA" REQUER UM TRATAMENTO ESPACIAL.

Sistema clássico (1 grau de liberdade)

Estado fundamental não tem a mesma simetria que o potencial:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x,y) \quad (2D)$$



ESTADO FUNDAMENTAL: PARTÍCULA PARADA ($\vec{p}=0$) EM ALGUM PONTO NO MÍNIMO DO POTENCIAL.

O POTENCIAL $V(x,y)$ E, POR EXTENSÃO, O HAMILTONIANO TEM UMA SIMETRIA (ROTAÇÃO NO PLANO xy) QUE NÃO É REALIZADA/OBEDECIDA POR NENHUM ESTADO FUNDAMENTAL: QUEBRA ESPONTÂNEA DE SIMETRIA.

Quebra de ergodicidade

NA PRÁTICA, O SISTEMA "ESCOLHE" UM ESTADO FUNDAMENTAL E FICA "PRESO" NELE.

PRECISAMOS MODIFICAR A "RECEITA" DE GIBBS E SOMAR, NÃO SOBRE TODAS AS CONFIGURAÇÕES, MAS APENAS SOBRE UM SUB-CONJUNTO DELAS, COMPATÍVEL COM O ESTADO DE SIMETRIA ESPONTANEAMENTE QUEBRADA.

⇒ QUEBRA DE ERGODICIDADE

FLUTUAÇÕES QUE RESTAUREM A DESORDEM SÃO ESTATISTICAMENTE SUPRIMIDADE EM $T < T_c$:

- SEJA UMA FLUTUAÇÃO SIMULTÂNEA DE TODOS OS SPINS, REVERTENDO A MAGNETIZAÇÃO.
- SEJA ATRAVÉS DA CRIAÇÃO DE UMA BOLHA DE MAGNETIZAÇÃO INVERTIDA, CUJA PAREDE PAGA UMA ENERGIA FINITA PROIBITIVA.

O LIMITE TERMODINÂMICO É FUNDAMENTAL: POUCAS PARTÍCULAS SEMPRE FLUTUARÃO COM ALTA PROBABILIDADE, RESTAURANDO A DESORDEM E A ERGODICIDADE.

Considerações gerais sobre quebra espontânea de simetria

Quebra espontânea de simetria (QES):

- Hamiltoniano é invariante sob um conjunto de transformações globais G.
- Estado fundamental ou térmico **não** é invariante sob G.
- Quebra de ergodicidade: sistema deixa de explorar todas as configurações e fica "preso" em um setor com simetria quebrada.
- Só acontece no limite termodinâmico.

Receita para incorporar QES

ADICIONA UM CAMPO EXTERNO ACOPLADO AO PARÂMETRO DE ORDEM: (CAMPO CONJUGADO AO P.O.)

$$H \longrightarrow H - \vec{h}\cdot\sum_i \vec{S}_i \qquad (\text{FM})$$

$$H \longrightarrow H - \vec{g}\cdot\left(\sum_{i\in A}\vec{S}_i - \sum_{i\in B}\vec{S}_B\right) \qquad (\text{AFM})$$

$$H \longrightarrow H - \lambda\underbrace{\int d^3r\,\psi(\vec{r})}_{Q_0} + h.c. \qquad (\text{SUPERFLUIDO})$$

$$\langle O\rangle = \underbrace{\lim_{|\vec{h}|\to 0}\ \lim_{N\to\infty}}_{\text{OS LIMITES NÃO COMUTAM}} \mathrm{Tr}\left[O\, e^{-\beta\left(H - \vec{h}\cdot\sum_i \vec{S}_i\right)}\right]$$

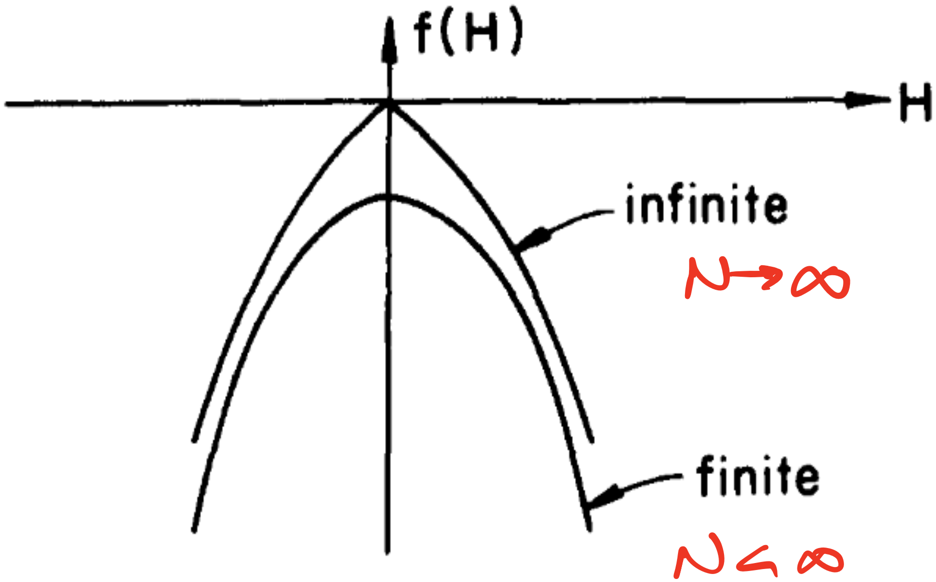
Parâmetros de ordem e seus campos conjugados

Phase Transition	Order Parameter	Conjugate Field Coupling	N
Ferromagnetic	magnetization $\vec{m}_i = \langle \vec{S}_i \rangle$	magnetic field $\vec{H} \cdot \sum_i \vec{S}_i$	1,2,3
Antiferromagnetic	staggered magnetization $\vec{m}_i = \begin{cases} \vec{S}_i & i \in A \\ -\vec{S}_i & i \in B \end{cases}$	staggered field $\vec{H}_S \cdot \left(\sum_{i \in A} \vec{S}_i - \sum_{i \in B} \vec{S}_i \right)$	1,2,3
Ferroelectric (polar crystals)	polarization $\vec{d}_i$	electric field $\vec{E} \cdot \sum_i \vec{d}_i$	1,2,3
Liquid-gas	density difference $\rho_{\text{liquid}} - \rho_{\text{gas}}$	pressure P	1
Binary alloy	sublattice concentration	chemical potential μ	1
Superfluid λ transition in ^{4}He	condensate amplitude $\phi(x) = \langle \hat{\psi}(x) \rangle$	condensate source $J\hat{\psi}^\dagger + \text{h.c.}$	2
Superconducting (metals)	electron pair amplitude $\Delta(x, x') = \langle \hat{\psi}_\uparrow(x) \hat{\psi}_\downarrow x' \rangle$	electron pair source $J\hat{\psi}^\dagger_{k\uparrow} \hat{\psi}^\dagger_{k\downarrow} + \text{h.c.}$	2

Table 4.1 Order parameters, the coupling to conjugate fields, and the number of components N for a variety of physical phase transitions.

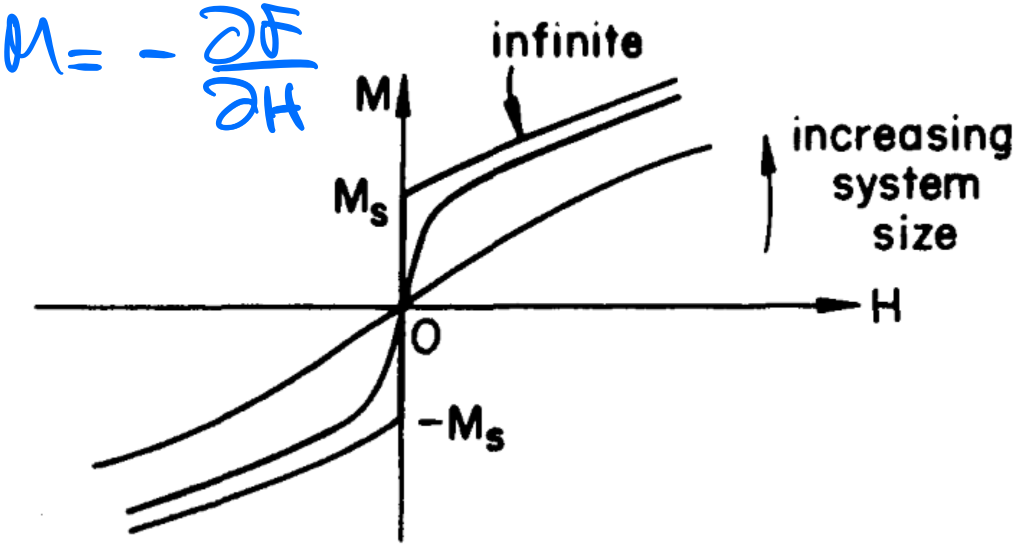
O papel do limite termodinâmico

Densidade de energia livre como função do campo conjugado



Parâmetro de ordem como função do campo conjugado

$M = -\frac{\partial F}{\partial H}$

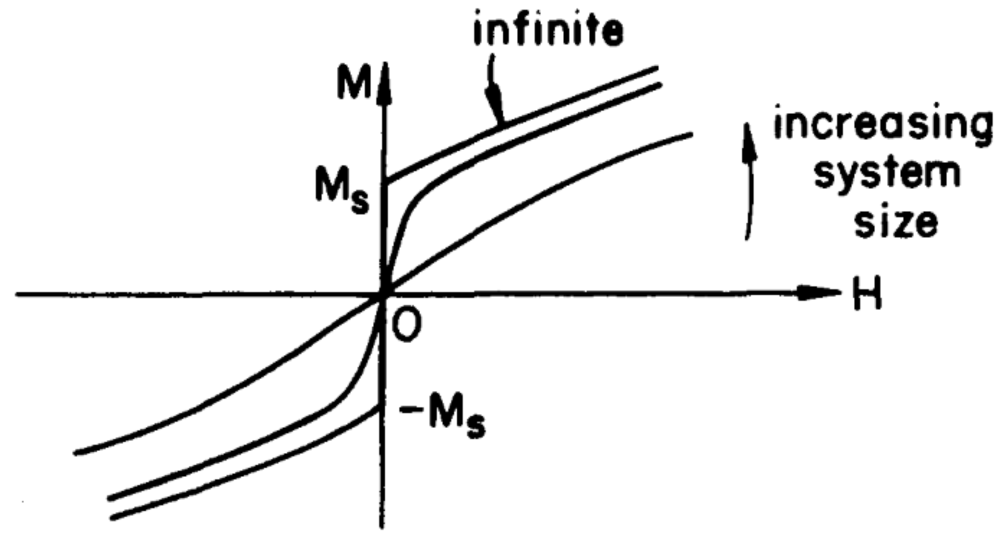


Considerações gerais sobre quebra espontânea de simetria

"Receita" para investigar QES:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{h\to 0} \lim_{N\to\infty} \mathrm{Tr}\left[\frac{e^{-\beta H_h}}{Z}\mathcal{O}\right]$$

$$H_h = H + h\mathcal{O}$$



Complicações no caso quântico: antiferromagnetismo

O P.O. FM, $\vec{M} = \sum_i \vec{S}_i$, COMUTA COM H:

$$[H, \vec{M}] = 0$$

NO CASO AFM, O P.O. $\vec{M}_S = \sum_{i \in A} \vec{S}_i - \sum_{i \in B} \vec{S}_i$ NÃO COMUTA COM H:

$$[H, \vec{M}_S] \neq 0$$

SE CONSIDERAR UM ESTADO INICIAL COM $\vec{M}_S \neq 0$, COMO $\vec{M}_S$ NÃO É CONSTANTE DO MOVIMENTO:

$\vec{M}_S = \vec{M}_S(t) \Rightarrow \vec{M}_S$ VAI GIRAR

PORÉM, O TEMPO CARACTERÍSTICO $\tau \to \infty$ QUANDO $N \to \infty$

Considerações gerais sobre quebra espontânea de simetria

Caso quântico:

- Muitas vezes, o parâmetro de ordem não comuta com H.
- Não é uma constante do movimento, varia com o tempo.
- Tempo característico de rotação τ diverge no limite termodinâmico.

Receita alternativa
(sem aplicação do campo infinitesimal)

MEÇA A FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DO PAR. DE ORDEM:

$\mathrm{Tr}\left[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j e^{-\beta H}\right]$

$$\lim_{|\vec{R}_i - \vec{R}_j| \to \infty} \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle = \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ |\langle \vec{S}_i \rangle|^2 & T < T_c \end{cases}$$

ONDE $|\langle \vec{S}_i \rangle|^2 = \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_i \rangle$ É O MÓDULO QUADRADO DO P.O. OBTIDO PELA RECEITA

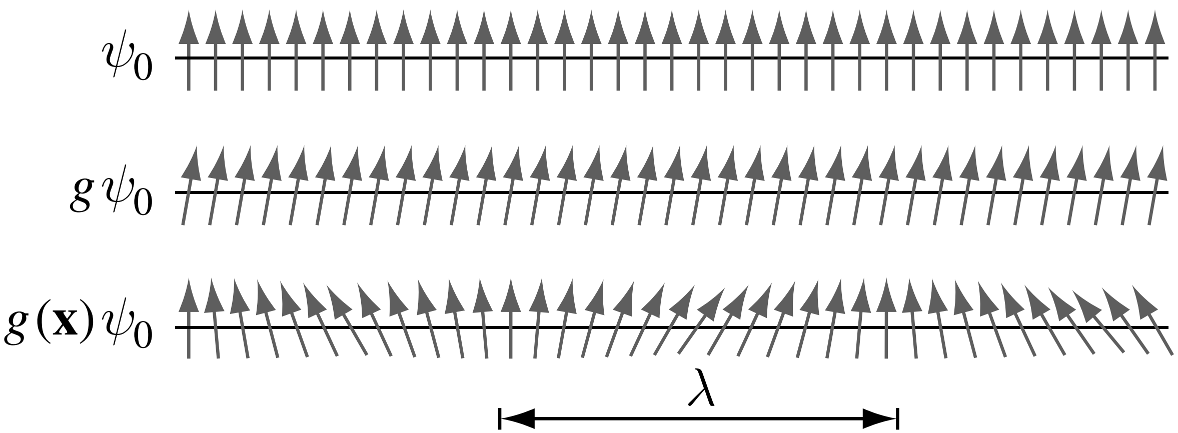
$\underline{\Delta}$.

PRO AFM $\displaystyle\lim_{|\vec{R}_i - \vec{R}_j| \to \infty} \langle \vec{S}_{i \in A} \cdot \vec{S}_{j \in A} \rangle$

PARA O SUPERFLUIDO:

$$\lim_{|\vec{r}-\vec{r}'|\to\infty} \langle \psi(\vec{r})\,\psi^{+}(\vec{r}')\rangle$$

Quebra espontânea de simetria contínua: modos de Goldstone

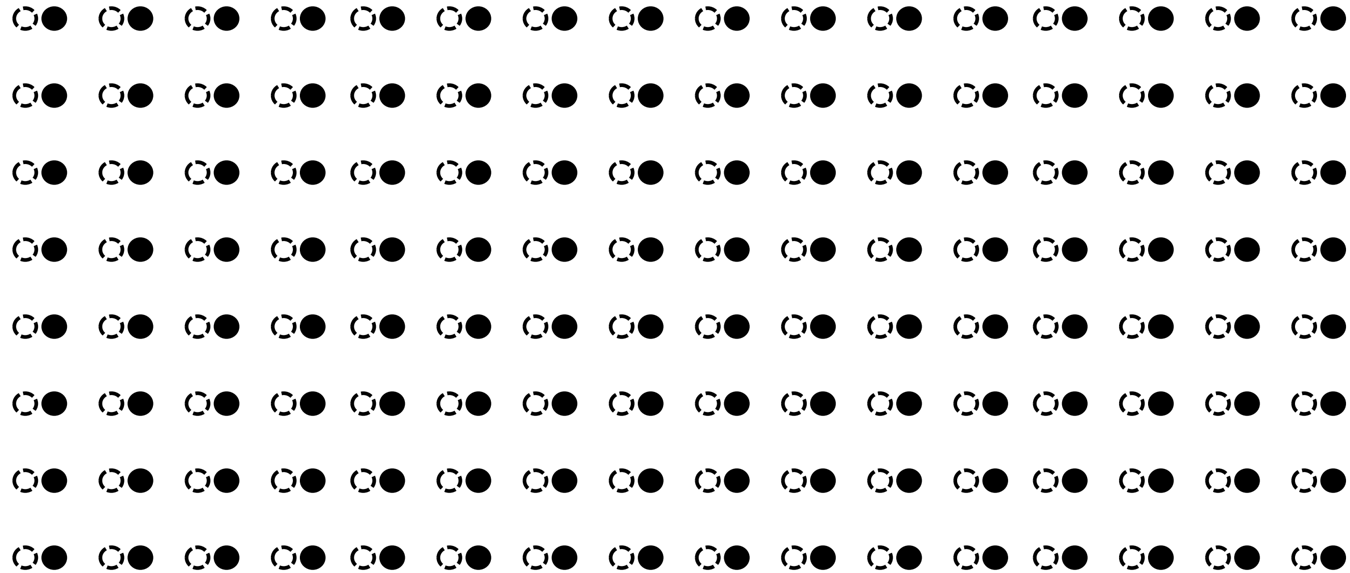


QUANDO HÁ QES CONTÍNUA E O SISTEMA SÓ TEM INTERAÇÕES DE CURTO ALCANCE, SEMPRE HÁ, NA FASE ORDENADA, PELO MENOS UMA EXCITAÇÃO BOSÔNICA, CUJA DISPERSÃO:

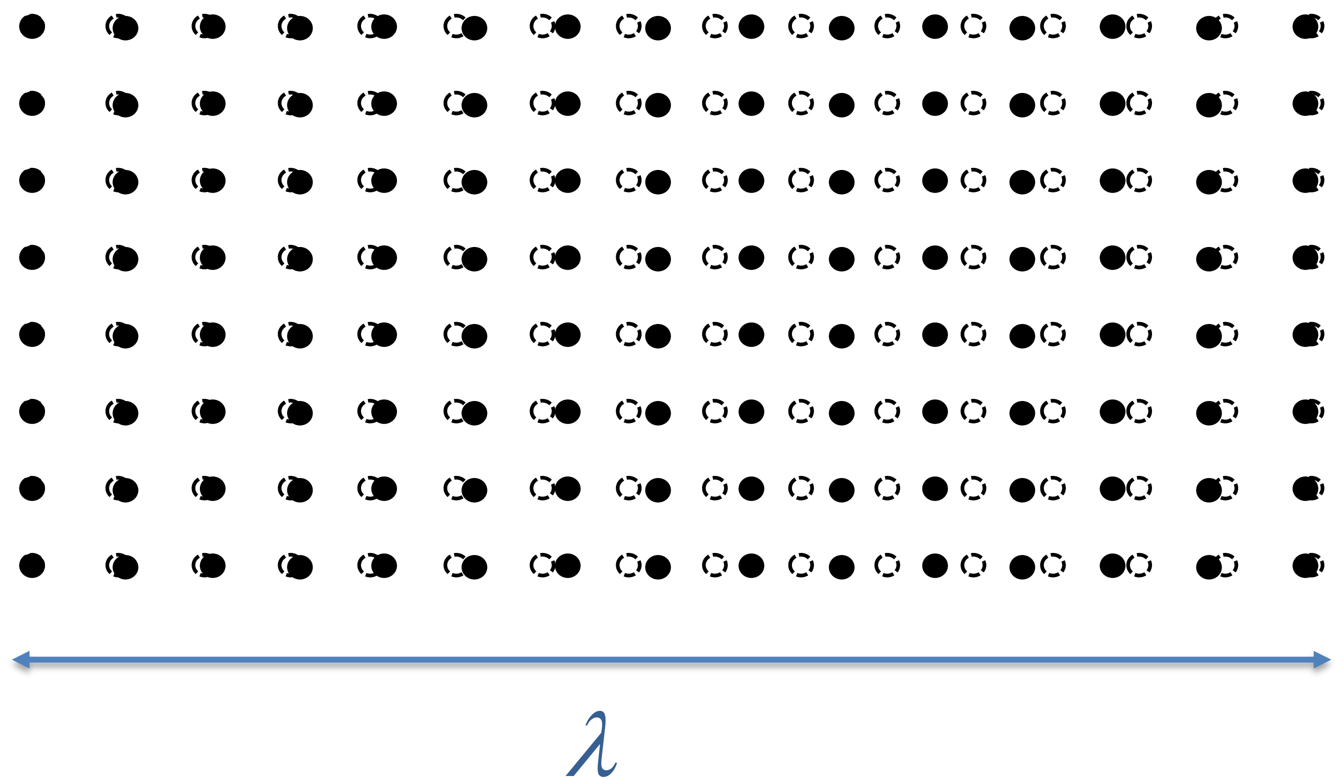
$$\epsilon(\vec{k}) \xrightarrow[|\vec{k}| \to \infty]{} 0$$

"MODOS DE GOLDSTONE"

Deslocamento uniforme



Deslocamento com longo comprimento de onda



Resultados gerais para várias simetrias do parâmetro de ordem e dimensões

SIMETRIA CONTÍNUA:

$$H = J \sum_{i} (S_{ix} S_{jx} + S_{iy} S_{jy} + S_{iz} S_{jz})$$ (HEISENBERG)

$$H_{XX} = J \sum_{i} (S_{ix} S_{jx} + S_{iy} S_{jy})$$ (XX, SUPER-FLUIDEZ, SUPER-CONDUTIVIDADE)

SIMETRIA DISCRETA:

$$H_{ISING} = J \sum_{i} S_{iz} S_{jz}$$ (ISING)

- REDE NÃO FRUSTRADA (HIPERCÚBICA)
- INTERAÇÕES DE 1ºs VIZINHOS

CONTÍNUA:

(J<0) FM:

- T=0: SEMPRE HÁ ORDEM (DE LONGO ALCANCE)

- T≠0: SÓ HÁ ORDEM SE $D > D_c^- = 2$

(D_c^- É A DIMENSÃO CRÍTICA INFERIOR)

A ORDEM É DESTRUÍDA POR FLUTUAÇÕES TÉRMICAS (TEOREMA DE MERMIN-WAGNER-HOHENBERG)

(J>0) AFM:

- T=0: SÓ HÁ ORDEM SE $D > 1$

EM $D=1$, A ORDEM É DESTRUÍDA POR FLUTUAÇÕES QUÂNTICA (ONDAS DE SPIN)

RESULTADOS RIGOROSOS:

$\begin{cases} D=1, \ S=1/2, \text{ SOLUÇÃO DE BETHE} \\ D=2, \ S \geq 1, \text{ (JORDÃO E PEREZ, AKLT)} \end{cases}$

$S=1/2$ (EVIDÊNCIA NUMÉRICA APENAS)

$\underline{T \neq 0}$: SÓ HÁ ORDEM SE $D > D_c^- = 2$

FLUTUAÇÕES TÉRMICAS

ISING (DISCRETO):

$T=0$: SEMPRE ORDENA (SISTEMA CLÁSSICO)

$T \neq 0$: SÓ HÁ ORDEM SE $D > D_c^- = 1$

$D=2$: SOLUÇÃO EXATA ONSAGER

$D=1$: " " DE ISING