Considerações gerais sobre ordem de longo alcance e quebra espontânea de simetria

Transições de fase são geralmente caracterizadas pela presença de uma nova quantidade física que só é diferente de zero na fase ordenada (que, geralmente, é a fase de baixas temperaturas). Por exemplo, vimos no caso do Modelo de Heisenberg ferromagnético (FM) que:

$$T < T_c \Leftrightarrow \vec{M} = \sum_i \langle \vec{S}_i \rangle \neq 0$$

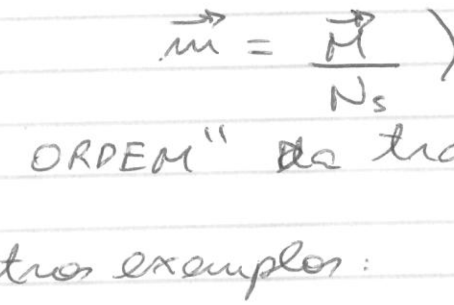
$$T > T_c \Leftrightarrow \vec{M} = 0$$

Nesse caso, a magnetização total (ou, alternativamente, a densidade de magnetização

$\vec{m} = \dfrac{\vec{M}}{N_s}$) é o chamado "PARÂMETRO DE ORDEM" da transição.

Outros exemplos:

- Antiferromagnetismo: O parâmetro de ordem é tomado como sendo, a magnetização de uma sub-rede ou a magnetização alternada ("staggered"), que é a diferença entre as magnetizações das sub-redes.



Numa rede quadrada podemos tomar os pontos marcados com × como sendo da sub-rede $\underline{A}$ e os pontos marcados com ∘ como sendo da sub-rede $\underline{B}$ (S_A e S_B)

Note que uma rede é chamada de bi-partite se ela pode ser dividida em 2 ~~sub~~ sub-redes S_A e S_B tais que os primeiros vizinhos dos pontos de S_A pertencem à sub-rede B. As redes quadrada, cúbica e hiper cúbica são todas bi-partites.

$$\vec{M}_A = \sum_{i \in S_A} \langle \vec{S}_i \rangle \qquad \vec{M}_B = \sum_{i \in S_B} \langle \vec{S}_i \rangle$$

$$\vec{M}_{alt} = \vec{M}_A - \vec{M}_B$$

<u>Outros parâmetros de ordem</u>:

- Supercondutividade:

$$P = \int d^3r \, \langle \psi_\uparrow^\dagger(\vec{r}) \psi_\downarrow^\dagger(\vec{r}) \rangle$$

Note que, como o operador $\psi_\uparrow^\dagger(\vec{r})\psi_\downarrow^\dagger(\vec{r})$ cria 2 partículas, o parâmetro de ordem acima necessita que o cálculo seja feito no ensemble grand-canônico

- Transição de solidificação ou de vaporização

$$\left.\begin{aligned} \Delta\rho_1 &= \rho_{liq} - \rho_{gas} \\ \Delta\rho_2 &= \rho_{sól} - \rho_{liq} \end{aligned}\right\} \text{Diferenças entre as densidades do líquido}$$

Existem outros exemplos, mas vamos nos concentrar ~~nos~~ nos exemplos magnéticos.

Existe uma aparente dificuldade com a possibilidade de se ter

$$\langle \vec{M} \rangle \neq 0$$

se H (Hamiltoniano) for invariante sob rotações globais de spin. Formalmente:

se $\vec{S}_i' = U \vec{S}_i$

onde U é uma transformação que gira o vetor $\vec{S}_i$ de um ângulo θ em torno de um eixo $\hat{n}$, então:

$$H[\{\vec{S}_i\}] = H[\{\vec{S}_i'\}]$$

ou seja, a energia total não muda se girarmos todos os spins da mesma maneira. Isso é evidentemente correto no caso do modelo de Heisenberg, pois os seus termos são todos produtos escalares ($\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$), invariantes sob quaisquer rotações.

A dificuldade mencionada vem do fato de que, se:

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

ao varrermos todas a direções dos spins ao tomarmos o Tr sobre eles, teremos contribuições de <u>mesmo peso</u>, para configurações tais que $\vec{S}_i \to -\vec{S}_i$ para todo <u>i</u>.

Portanto, o Tr dá zero e $\langle \vec{M} \rangle$ não pode ser diferente de zero!

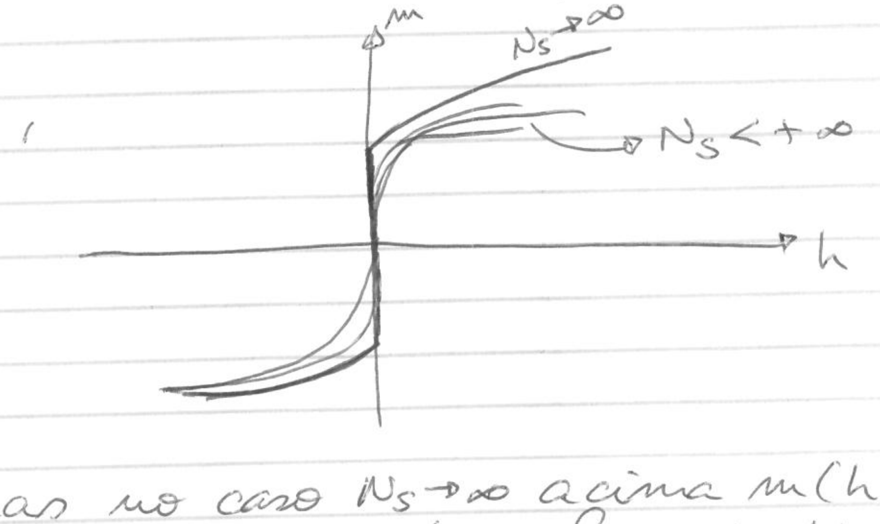
Essa dificuldade é contornada no limite termodinâmico (no caso, $N_s \to \infty$). Isso porque apenas nesse limite, a função partição, ou a energia livre se tornam não analíticas. Assim, definimos:

$$\langle \vec{M} \rangle = \lim_{|\vec{h}| \to 0^+} \lim_{N_s \to \infty} \langle \vec{M} \rangle_h$$

onde $\langle \vec{M} \rangle_h$ é:

$$\mathrm{Tr}_{\vec{S}} \left[e^{-\beta(H - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i)} \sum_i \vec{S}_i \right]$$

Note como adicionamos um campo magnético ao Hamiltoniano, que quebra a simetria explicitamente. Note também a ordem dos limites, que não deve ser trocada. O que se pode mostrar, através de modelos simples é que (ver Seção 4.2 do Negele e Orland)



Apenas no caso $N_s \to \infty$ acima $m(h)$ tem uma descontinuidade em $h=0$. Para $N_s < +\infty$, as curvas são todas contínuas e $m(h \to 0) = 0$.

Generalizando para outros parâmetros de ordem, devemos primeiro adicionar um termo a H que:

(i) Se acopla ao parâmetro de ordem

(ii) E que, portanto, quebra explicitamente a simetria em questão:

Exemplos:

<u>AFM</u>: Adicionar um campo alternado

$$H \to H + \vec{h} \sum_i e^{i\vec{Q}\cdot\vec{R}_i} \vec{S}_i$$

onde $\vec{Q}$ é o vetor de onda do AFM (geralmente (π,π,π) na rede cúbica).

<u>Supercondutividade</u>:

$$H \to H + h \int d^3r \, \psi_\uparrow^\dagger(\vec{r}) \psi_\downarrow^\dagger(\vec{r}) + \text{h.c.}$$

Em todos os casos, devemos calcular:

$$\langle \hat{O} \rangle = \lim_{h \to 0} \lim_{\substack{N_s \to \infty \\ V \to \infty}} \langle \hat{O} \rangle_h$$

para verificar se há ordem de longo alcance (ou quebra espontânea de simetria)

Os campos acima são chamados de campos conjugados ao parâmetro de ordem.

É importante frisar o que acontece fisicamente. Por que devemos modificar a "receita" da Física Estatística, para verificar se há ou não quebra espontânea de simetria?

A resposta é que há uma quebra de ergodicidade quando há quebra espontânea de simetria. Ou seja, o sistema deixa de explorar todo o espaço de fase (ou de configurações) na fase ordenada. Essa é uma violação da hipótese ergódica, que é a base da "receita" habitual da Física Estatística.

Na prática, o sistema fica fora de equilíbrio. Mais precisamente, alguns graus de liberdade adquirem tempos característicos muito longos (da ordem da idade do universo) e por isso o sistema não explora as configurações visitadas quando da evolução temporal desses graus de liberdade "lentos".

No caso do FM, p. ex., após congelar-se ~~...~~ com $\vec{M}$ apontando numa determinada direção (determinada ~~...~~, essencialmente, pelo acaso ~~...~~ ou por pequenos campos externos) o sistema não mais explora outras direções de $\vec{M}$ e, nesse sentido, fica fora do equilíbrio.

A receita anterior, de aplicar um campo conjugado infinitesimal, corresponde a essa situação física.

Deve-se notar que a quebra espontânea de simetria é especialmente não-trivial quando o parâmetro de ordem não comuta com o Hamiltoniano, como no caso do AFM e da SC:

$$\left[\vec{M}_A, H\right] \neq 0$$

$$\int d^3r \left[\psi_\uparrow^\dagger(\vec{r})\psi_\downarrow^\dagger(\vec{r}), H\right] \neq 0$$

Nesses casos, o parâmetro de ordem não é uma constante de movimento e não há razão nenhuma para ele "congelar". Realmente, em qualquer sistema finito, os parâmetros de ordem acima, dependerão do tempo ($\vec{M}_A$ irá "girar" no espaço).

Apenas quando $N_s \to \infty$ ($V \to \infty$) é que essa dependência se tornará cada vez mais lenta, se houver quebra espontânea de simetria (ver P. W. Anderson, Phys. Rev. 86, 694 (1952)) desaparecendo completamente quando $N_s \to \infty$.

Contraste isso com o caso do FM em que

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

Nesse caso, se o sistema é preparado no estado $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$, ele permanecerá nele para sempre pois esse é um auto-estado de H. A quebra espontânea de simetria é "trivial" nesse sentido. (P.W. Anderson insiste que se deve usar o termo "quebra espontânea de simetria" apenas nos casos em que o parâmetro de ordem <u>não</u> comuta com H).

Existe também uma outra maneira de se determinar se há quebra espontânea de simetria. Isso é feito através do cálculo da função de correlação do parâmetro de ordem SEM ADIÇÃO DE UM CAMPO CONJUGADO!

Assim, por exemplo, no caso do FM toma-se a magnetização local ($\vec{S}_i$) e calcula-se:

$$\lim_{|\vec{R}_i-\vec{R}_j|\to\infty} \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$$

Se o limite acima tende a uma constante, há quebra espontânea de simetria e ordem de longo alcance. Note que, devemos ter:

$$\lim_{|\vec{R}_i-\vec{R}_j|\to\infty} \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \longrightarrow \langle \vec{S}_i \rangle' \cdot \langle \vec{S}_j \rangle'$$

onde $\langle\ \rangle'$ significa o valor esperado segundo o método anterior do campo conjugado infinitesimal. Essa é a chamada "propriedade de aglomeramento" ("clustering property"). Veja também que o cálculo da função de correlação assintótica dá uma quantidade "sem direção definida" e por isso pode ser calculada sem o campo conjugado. O valor limite é o "módulo" do parâmetro de ordem e não tem "informação sobre sua direção". O método acima é facilmente generalizado para os outros parâmetros de ordem

Ausência ou presença de ordem de longo alcance em sistemas magnéticos

Vamos resumir um pouco do que se sabe sobre a ausência ou presença de ordem de longo alcance em sistemas magnéticos. Vamos nos ater a sistemas descritos por modelos de Heisenberg ou de Ising. O modelo de Ising é aquele que se obtém quando o acoplamento entre spins envolve apenas a direção $\hat{z}$ (ou $\hat{x}$ ou $\hat{y}$):

$$H_{ISING} = +J \sum_{ij} S_i^z S_j^z$$

Ele é um ~~o~~ modelo essencialmente ~~quântico~~ clássico (os operadores S_i^z são todos "números", comutam entre si).

Vamos nos restringir a sistemas tais que:

- Rede não frustrada: Para ser mais específico, uma rede hiper-cúbica
- Interações entre primeiros vizinhos apenas
- O spin pode, em princípio, ser qualquer ($S = 1/2, 1, 3/2, \ldots$)

Simetria Heisenberg:

FM ($J<0$):

- $T = 0$ (Estado fundamental):
  Sempre há ordem de longo alcance (O.L.A.) pois $[\vec{M}, H] = 0$

- $T \neq 0$: Só há O.L.A. se $d > 2 \equiv d_c$
  Esse é o resultado do Teorema de Mermin-Wagner-Hohenberg. A ordem em $d \leq d_c = 2$ é destruída por flutuações térmicas

d_c^-, a dimensão na qual e abaixo da qual não há O.L.A. a temperatura finita é chamada de dimensão crítica inferior

. Ver teoria de ondas de spin

AFM $(J>0)$:

$T=0$: . Só há O.L.A. se $d>1$
. Note que $[\vec{M}_{alt}, H] \neq 0$
. Em $d=1$, a O.L.A. é destruída pelas flutuações quânticas
. Esses resultados são estabelecidos rigorosamente em alguns casos:
. $d=1$, $S=1/2$ solução exata (Bethe)
. $d=2$, $S\geq 1$, (Jordão, Perez e Lieb)
. Ver teoria de ondas de spin

$T\neq 0$: . Só há O.L.A. se $d>2=d_c^-$
. (Teorema de M.-W.-H.)
. Destruída pelas flutuações térmicas em $d\leq d_c^-$
. Ver teoria de ondas de spin

Simetria Ising: (não importa se FM ou AFM)

$T=0$: Sempre há O.L.A. ($[H, M_z]=0$, trivialmente)

$T\neq 0$: Só há O.L.A se $d>1=d_c^-$
(Soluções exatas em $d=1$ (Ising) e $d=2$ (Onsager))