Part VI

Quebra de Simetria, Ordem, Simetria e Modelos

No capítulo anterior revisamos a termodinâmica e a física estatística tendo como paradigma o fluido isotrópico homogêneo. Consideramos a não-homogeneidade quando da aplicação de uma força externa dependente espacialmente mas ainda para um fluido não-interagente. No capítulo 2 discutimos várias estruturas de sistemas ordenados onde o aparecimento de um parâmetro de ordem foi discutido. Aqui vamos correlacionar essas duas características, isto é, discutirmos formalmente a quebra de simetria e o aparecimento do parâmetro de ordem. Para isso, vamos introduzir a nova variável - parâmetro de ordem - na nossa termodinâmica e física estatística. Vamos também discutir os diversos modelos que permitem uma ampla generalização da análise dos sistemas condensados obtidos a partir da quebra de simetria. Vamos nos limitar ao caso das fases condensadas obtidas quando ocorre quebrar de simetria. Para isso, vamos iniciar a nossa discussão com uma apresentação superficial e geral sobre simetrias mas com alguns elementos que nos serão úteis, seguido de uma discussão sobre quebra de simetria e parâmetro de ordem. Voltaremos a discussão sobre simetrias e finalmente uma apresentação básica dos modelos nos quais podemos discutir essas fases.

1 Quebra de Simetria e Parâmetro de Ordem

Um sistema físico, ou, equivalentemente, suas propriedades dinâmicas, é descrito pelo hamiltoniano $\mathcal{H}$, o qual é invariante sob as transformações do seu grupo de simetria $\mathcal{G}$. Consideramos no capítulo anterior o exemplo de um fluido isotrópico homogêneo. O seu grupo de simetria é o grupo $E(3)$ onde 3 refere-se a dimensionalidade do sistema físico e é composto por todas as translações, rotações e reflexões. A transição de um gás para um líquido não apresenta quebra de simetria. Normalmente,

para associarmos com a teoria de Landau, introduzimos um parâmetro de ordem que é a diferença entre as densidades das duas fases: $\rho_{liq} - \rho_{gas}$. A figura 1 apresenta um diagrama de fase $\rho - T$ para o gás-líquido.

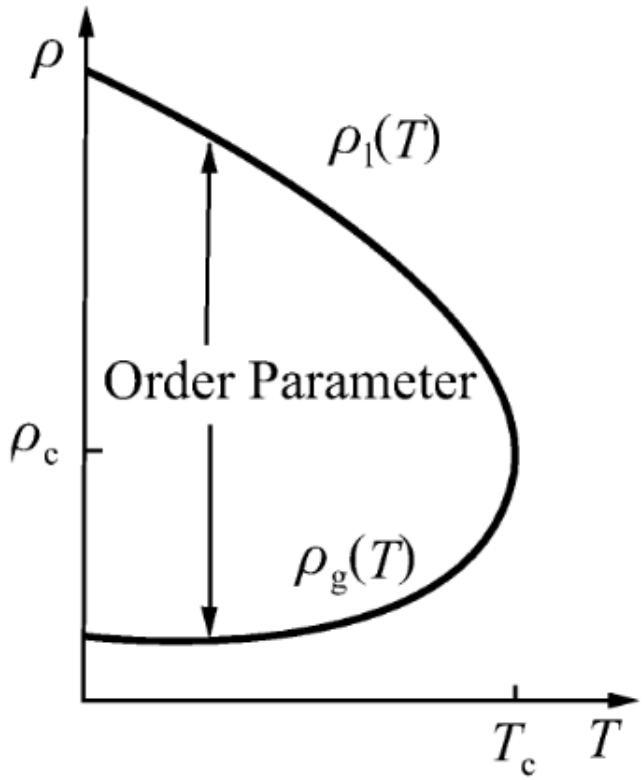

Figure 1: Diagrama de fase $\rho - T$ para a transição gás-líquido. Extraído de DG.

Quando temos uma quebra de simetria e o aparecimento de uma nova ordem que exige um parâmetro de ordem para sua descrição, é necessário introduzirmos uma nova variável que representa a quebra de simetria na termodinâmica e na física estatística. Essa nova variável não existe na fase desordenada. Para facilitarmos a análise, vamos antes discutir um exemplo de sistema físico que apresenta quebra de simetria quando ocorre a transição de fase.

O caso mais simples para discutirmos e é o exemplo do CL é a ordem magnética. Vamos analisar as modificações necessárias em relação ao que discutimos até agora para esse caso, antes de discutirmos os aspectos gerais de parâmetro de ordem e simetrias. Consideremos um gás ideal no qual cada partícula αpossui um spin $\vec{s}_\alpha$ e tem um momento magnético associado $\mu_s \vec{s}_\alpha$. Vamos

considerar inicialmente que não temos nenhuma interação entre os spins. Ou seja, vamos desprezar a interação dipolo-dipolo que, como já discutimos, é muito fraca. Nesse caso, não há nenhuma magnetização na ausência de campos externos. Quando aplicamos um campo magnético H, o gás apresenta um momento magnético proporcional ao número total de partículas,

$$\vec{M} = \left\langle \sum_{\alpha} \mu_s \vec{s}_\alpha \right\rangle \tag{1}$$

O sistema nesse caso é paramagnético. A magnetização $\vec{M}$ é uma variável extensiva. A sua densidade volumétrica é a magnetização intensiva, $\langle \vec{m}(\vec{r}) \rangle$,

$$\langle \vec{m}(\vec{r}) \rangle = \left\langle \sum_{\alpha} \mu_s \vec{s}_\alpha \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha \right\rangle \tag{2}$$

Vemos que $\vec{m}(\vec{r})$ é um operador similar ao operador densidade. A partícula α contribui com a densidade de magnetização apenas na posição do spin (átomo), $\vec{r}_\alpha$. A magnetização total é a integral em $\vec{r}$ sobre a contribuição de todas as partículas, da mesma forma que o número total de partículas era a integral na posição da densidade. No caso em que a magnetização é uniforme, temos

$$\langle \vec{m}(\vec{r}) \rangle = \frac{\vec{M}}{V} \tag{3}$$

Nesse caso, temos que incluir a densidade de magnetização na nossa descrição termodinâmica e estatística, juntamente com o campo externo, que forma o par de variáveis conjugadas. A simetria do gás, com os spins completamente aleatórios, foi quebrada pela presença de um campo magnético externo. Nesse caso, o hamiltoniano foi modificado e teve sua simetria reduzida.

Vamos considerar o caso em que há uma interação entre os spins. O modelo que utilizaremos foi discutido anteriormente e é o modelo de Heisenberg,

$$\mathcal{H}_{Heis} = -2J \sum_{\langle \vec{l}, \vec{l}' \rangle} \vec{s}_{\vec{l}} \cdot \vec{s}_{\vec{l}'} \tag{4}$$

Para melhor descrever essa situação, consideramos que os átomos encontram-se em uma fase cristalina e que cada ponto da rede de Bravais possui um átomo com um spin não-nulo de valor $\vec{s}_\alpha$. Vamos desprezar os efeitos relacionados a fase cristalina e nos concentrarmos apenas nos spins. Como a interação do hamiltoniano de Heisenberg tem origem na interação de troca, essa é de curto alcance e podemos limitar a interação apenas entre os primeiros vizinhos, que é o que indica a somatória da equação 4. Essa aproximação é justificável tendo em vista a diferença de energia por átomo entre a energia da formação do cristal (ligação química) e a energia de interação entre os spins. Nesse caso, o sistema a altas temperaturas (relativamente a interação entre os spins) o sistema de spins encontra-se completamente desordenado e a magnetização aparece apenas na presença de um campo magnético externo, como no caso não-interagente. O sistema encontra-se na fase *paramagnética*. A medida que a temperatura diminui, a interação começa a dominar em relação ao termo entrópico e o sistema busca o equilíbrio minimizando a energia livre de Helmholtz, $F = E - TS$. Quando a interação domina sobre a temperatura, aparece uma fase ordenada, com uma magnetização não nula mesmo na ausência de campo magnético externo. Essa e a fase *ferromagnéticae* (assumindo que $J > 0$). Temos então uma média não nula para o spin em cada sítio cristalino, isto é, $\langle \vec{s} \rangle = \left\langle \vec{s}_{\vec{l}} \right\rangle$, independente do sítio, ou seja,

$$\langle \vec{m} \rangle = \frac{1}{v_0} \mu_s \langle \vec{s} \rangle \tag{5}$$

onde v_0 é o volume da célula unitária. Podemos identificar a magnetização $\langle \vec{m} \rangle$ como o *parâmetro de ordem* da nova fase ferromagnética. A figura 2 ilustra as duas fases, paramagnética e ferromagnética.

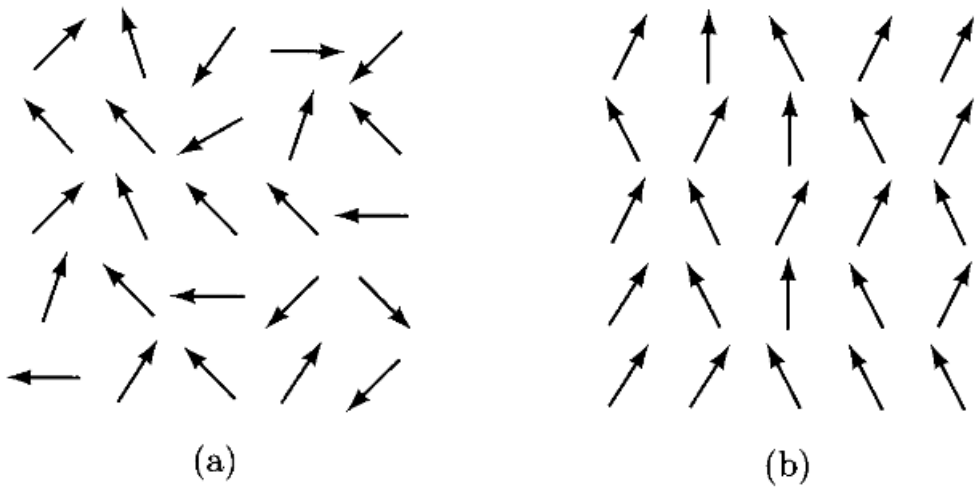

Figure 2: (a) Fase paramagnética do modelo de Heisenberg, com magnetização media nula e (b) fase ferromagnética do mesmo modelo a uma temperatura finita. Extraído de CL.

O hamiltoniano de Heisenberg é invariante para qualquer translação global, isto é, de todos os spins. Logo, não há uma direção de preferência para a magnetização no estado ferromagnético. Note que não há invariância para uma rotação qualquer dos spins individualmente. Para descrevermos a física estatística do sistema, vamos introduzir um campo externo $\vec{H}$, da mesma forma que fizemos para o líquido não-homogêneo. Podemos depois fazer $\vec{H} \to 0$. Nesse caso temos que adicionar ao hamiltoniano de Heisenberg um termo de origem na interação externa que é

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ext} &= -\sum_{\alpha} \mu_s \vec{s}_\alpha \cdot \vec{H}(\vec{r}_\alpha) = -\sum_{\vec{l}} \mu_s \vec{s}_{\vec{l}} \cdot \vec{H}(\vec{r}) \\ &= -\int \mathrm{d}\vec{r} H(\vec{r}) \cdot \vec{m}(\vec{r}) \end{aligned} \tag{6}$$

onde $\mathcal{H}_t = \mathcal{H}_{Heis} + \mathcal{H}_{ext}$ é o hamiltoniano total nesse caso.

Seguindo os mesmo passos, temos para a função de partição,

$$Z(T, N, \vec{H}(\vec{r})) = \mathrm{Tr}\left[\exp\left\{-\beta[\mathcal{H}_{Heis} - \int \mathrm{d}\vec{r} H(\vec{r}) \cdot \vec{m}(\vec{r})\right\}\right] \tag{7}$$

A magnetização em equilíbrio termodinâmico é

$$
\begin{aligned}
\left\langle \vec{m}(T,\vec{H}(\vec{r}))\right\rangle &= \lim_{N\to\infty}\frac{1}{Z(T,N,\vec{H}(\vec{r}))}\mathrm{Tr}\left[\exp\left\{-\beta[\mathcal{H}_{Heis}-\int \mathrm{d}\vec{r}H(\vec{r})\cdot\vec{m}(\vec{r})\right\}\right] \\
&= \lim_{N\to\infty}\left\langle \vec{m}_N(T,\vec{H}(\vec{r})\right\rangle
\end{aligned} \tag{8}
$$

No limite termodinâmico a magnetização vai alinhar-se com o campo externo mesmo que esse seja infinitesimalmente pequeno. Podemos obter então uma magnetização não-nula no limite $\vec{H}\to 0$ se este é tomado após o limite termodinâmico:

$$
\langle\vec{m}(T)\rangle = \lim_{\vec{H}\to 0}\lim_{N\to\infty}\left\langle \vec{m}_N(T,\vec{H}\right\rangle \tag{9}
$$

onde a dependência espacial foi suprimida porque assumimos $\vec{H}$ como sendo espacialmente uniforme.

A figura 3 resume o resultado mostrando o diagrama de fase (a) no plano $|\langle\vec{m}\rangle|-T$ e (b) no plano $\vec{H}-T$ para o modelo de Heisenberg. Consideramos um campo aplicado na direção $\vec{H}=H\hat{e}$. Para uma temperatura abaixo da temperatura crítica T_c aparece uma magnetização expontânea (eq. 9). Essa magnetização estará paralela a $\hat{e}$ para $H\to 0^+$ e antiparalela se $H\to 0^-$. Para $H=0$ temos uma linha de coexistência que é similar a do gás-líquido. Nessa região todas as direções de $\langle\vec{m}\rangle$ são equivalentes energeticamente. A linha de coexistência termina em $T=T_c$ e $\vec{H}=0$. Como não há nenhuma direção de preferência na linha de coexistência, a média sobre todas as direções possíveis nos leva a $\langle\vec{m}\rangle=0$. A magnitude da magnetizção $|\langle\vec{m}\rangle|$ou equivalentemente, $\langle m\rangle^2=\langle\vec{m}\rangle\cdot\langle\vec{m}\rangle$ tem o mesmo valor se fizermos a media sobre todas as direções possíveis. Essa é uma caracterização alternativa (parâmetro de ordem) para a existência de ordem ferromagnética.

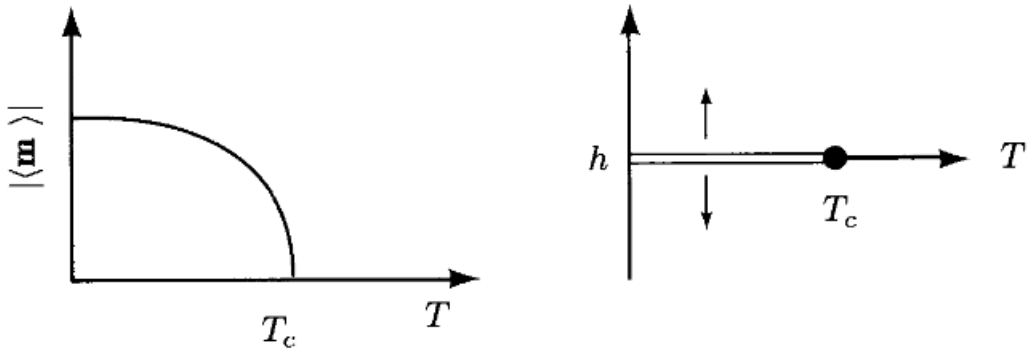

Figure 3: (a) Magnetização em função da temperatura para o modelo de Heisenberg. (b) Diagrama de fase do ferromagneto de Heisenberg no plano $H - T$. A linha $H = 0$, $T \leq T_c$ é a linha de coexistência onde a magnetização $\langle \vec{m} \rangle$ é energeticamente equivalente em qualquer direção. Extraído de CL.

A magnetização na ordem ferromagnética representa uma correlação espacial ou ordem de longo alcance. Já na fase paramagnética, devemos esperar uma correlação de curto alcance, com os spins a uma certa distância não "enxergando" os demais spins. Vamos introduzir a correlação espacial por meio da *função de correlação spin-spin*,

$$C_{mm}(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{m}(\vec{r}) \cdot \vec{m}(\vec{r}') \rangle \tag{10}$$

No caso paramagnético, $C_{mm}(\vec{r}, \vec{r}')$ decai exponencialmente com $|\vec{r} - \vec{r}'|$ enquanto que na fase ferromagnética, no mesmo limite ela tende a $\langle m \rangle^2$da mesma forma que para o líquido tendia a $\langle n \rangle^2$.

A função de partição tem uma dependência explícita com o número de partículas mas não em relação ao volume. Como assumimos que as ligações cristalinas não se alteram, o volume permanece constante e não faz parte das variáveis termodinâmicas nesse caso. Eventuais dilatações do cristal, no entanto, alteram o valor de J e não podem ser ignoradas. Não consideramos essa situação aqui. Vamos generalizar a função de partição para o ensemble gran-canônico, dependente de $T, V, \mu(\vec{r}), \vec{H}(\vec{r})$. Vamos assumir agora que N é fixo e vamos trabalhar na extensão da função de partição gran-canônica, com o potencial químico variável com a posição sendo substituído por $\vec{H}(\vec{r})$. Generalizando a discussão anterior, temos então um *potencial termodinâmico magnético*,

$$\phi\left[T,\vec{H}(\vec{r})\right] = -k_B T \ln \mathcal{Z}\left[T,\vec{H}(\vec{r})\right] \tag{11}$$

e a magnetização

$$\langle m_i(\vec{r})\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}}\frac{\delta\mathcal{Z}}{\beta\delta H_i(\vec{r})} = -\frac{\delta\phi}{\delta H_i(\vec{r})} \tag{12}$$

onde i refere-se a componente cartesiana dos vetores. A energia livre ϕ tem a relação termodinâmica diferencial

$$\mathrm{d}\phi = -S\mathrm{d}T - \int \mathrm{d}\vec{r}\,\langle\vec{m}(\vec{r})\rangle\cdot\delta\vec{H}(\vec{r}) \tag{13}$$

Podemos também generalizar a resposta do sistema equivalente a compressibilidade, isto é, a susceptibilidade generalizada, medindo $\langle m_i\rangle$ como resposta a um campo externo em $\vec{r}'$:

$$\chi_{ij}(\vec{r},\vec{r}') = \frac{\delta\langle m_i(\vec{r})\rangle}{\delta H_j(\vec{r}')} \tag{14}$$

Ainda, para sistemas clássicos, a função de correlação do parâmetro de ordem é a derivada de $\langle m_i\rangle$ em relação a $\beta H_j(\vec{r}')$,

$$\begin{aligned} G_{ij}(\vec{r},\vec{r}') &= \langle[m_i(\vec{r})-\langle m_i(\vec{r})\rangle]\,[m_j(\vec{r}')-\langle m_j(\vec{r}')\rangle]\rangle \\ &= \langle\delta m_i(\vec{r})\delta m_i(\vec{r}')\rangle \\ &= \frac{\delta\langle m_i(\vec{r})\rangle}{\beta\delta H_j(\vec{r}')} = k_B T\chi_{ij}(\vec{r},\vec{r}') \end{aligned} \tag{15}$$

que é equivalente a função de Ursell para o fluido. De forma análoga, temos,

$$\chi_{ij} = \frac{\partial\langle m_i\rangle}{\partial H_j} = \lim_{\vec{q}\to 0}\beta G_{ij}(\vec{q}) \tag{16}$$

A equação 15 é válida somente classicamente enquanto que a equação 16 é válida também

quanticamente. Esse resultado, novamente, é de grande importância, e estabelece a resposta de um sistema a um potencial externo em termos apenas de suas flutuações em equilíbrio. Essa é uma versão do *teorema flutuação-dissipação*, que discutiremos mais adiante.

Muitas vezes preferimos expressar as grandezas termodinâmicas em função do parâmetro de ordem e não do campo externo. Nesse caso, temos que fazer uma transformada de Legendre em $\phi(T, \vec{H}(\vec{r}))$,

$$F[T, \langle \vec{m}(\vec{r}) \rangle = \phi[T, \vec{H}(\vec{r})] + \int \mathrm{d}\vec{r} \vec{H}(\vec{r}) \cdot \langle \vec{m}(\vec{r}) \rangle \tag{17}$$

A equação de estado para o sistema magnético é

$$\frac{\delta F}{\delta \langle m_i(\vec{r}) \rangle} = H_i(\vec{r}) \tag{18}$$

Se $\langle \vec{m}(\vec{r}) \rangle$ é uniforme e igual a $\langle \vec{m} \rangle$, a energia livre pode ser escrita como uma integral de volume da densidade de energia livre,

$$F = \int \mathrm{d}\vec{r} f[T, \langle \vec{m} \rangle] \tag{19}$$

e a equação de estado toma a forma

$$\frac{\partial f}{\partial \langle m_i \rangle} = H_i \tag{20}$$

Finalmente temos uma expressão matemática para o aparecimento do parâmetro de ordem. Se o campo externo é nulo, o estado de equilíbrio é aquele que minimiza f. Se há soluções para a equação 20 para $\vec{H} = 0$ com valor não nulo para $\langle \vec{m} \rangle$, há uma quebra expontânea de simetria e o aparecimento do parâmetro de ordem se o estado de energia livre com valor não nulo de $\langle \vec{m} \rangle$ for menor do que para $\langle \vec{m} \rangle = 0$.

Finalmente podemos obter a função de correlação da magnetização a partir da diferenciação de ϕ em relação a $\beta H_i(\vec{r})$. O seu inverso pode ser obtido diferenciando F em relação a $\langle m_i(\vec{r}) \rangle$.

Para isso, vamos calcular

$$\begin{aligned}\frac{\delta \langle m_i(\vec{r})\rangle}{\delta \langle m_j(\vec{r}')\rangle} &= \delta_{ij}\delta(\vec{r}-\vec{r}') \\ &= \int \mathrm{d}\vec{r}''\frac{\delta \langle m_i(\vec{r})\rangle}{\delta H_k(\vec{r}'')}\frac{\delta H_k(\vec{r}'')}{\delta \langle m_j(\vec{r}')\rangle}\end{aligned} \tag{21}$$

onde a soma sobre índices repetidos está implícita.

Definindo o inverso da susceptibilidade pela expressão

$$\int \mathrm{d}\vec{r}\chi_{ik}(\vec{r},\vec{r}')\chi^{-1}_{kj}(\vec{r},\vec{r}') = \delta_{ij}\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{22}$$

e então,

$$\chi^{-1}_{ij}(\vec{r},\vec{r}') = \frac{\delta H_i(\vec{r})}{\delta \langle m_j(\vec{r}'\rangle} = \frac{\delta^2 F}{\delta \langle m_i(\vec{r})\rangle\, \delta \langle m_j(\vec{r}')\rangle} \tag{23}$$

Finalmente, na Tabela 1 comparamos as relações entre os fluidos e os sistemas com parâmetro de ordem, no caso, a ordem magnética.

Grand partition	$\longleftrightarrow$	Magnetic partition
$\left.\begin{array}{c}\Xi[T,V,\mu(\mathbf{x})]= \\ \mathrm{Tr}e^{-\beta[\mathscr{H}-\int d^dx\mu(\mathbf{x})n(\mathbf{x})]}\end{array}\right\}$	$\longleftrightarrow$	$\left\{\begin{array}{c}Z_N[T,\mathbf{h}(\mathbf{x})]= \\ \mathrm{Tr}e^{-\beta[\mathscr{H}-\int d^dx\mathbf{h}(\mathbf{x})\cdot\mathbf{m}(\mathbf{x})]}\end{array}\right.$
μ	$\longleftrightarrow$	$\mathbf{h}$
n	$\longleftrightarrow$	$\mathbf{m}$
$\mathscr{A}[T,\mathbf{h}(\mathbf{x})]=-T\ln\Xi[T,V,\mu(\mathbf{x})]$	$\longleftrightarrow$	$\mathscr{A}[T,\mathbf{h}(\mathbf{x})]=-T\ln Z_N[T,\mathbf{h}(\mathbf{x})]$
$\langle n(\mathbf{x})\rangle=-\delta\mathscr{A}[\mu(\mathbf{x})]/\delta\mu(\mathbf{x})$	$\longleftrightarrow$	$\langle m_i(\mathbf{x})\rangle=-\delta\mathscr{A}/\delta h_i(\mathbf{x})$
$S_{nn}(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\langle\delta n(\mathbf{x})\delta n(\mathbf{x}')\rangle$	$\longleftrightarrow$	$G_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\langle\delta m_i(\mathbf{x})\delta m_j(\mathbf{x}')\rangle$
$\beta S_{nn}(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\delta\langle n(\mathbf{x})\rangle/\delta\mu(\mathbf{x}')$	$\longleftrightarrow$	$\beta G_{ij}(\mathbf{x},\mathbf{x}')=\delta\langle m_i(\mathbf{x})\rangle/\delta h_j(\mathbf{x}')$
$\left.\begin{array}{c}\partial\langle n\rangle/\partial\mu=\langle n\rangle^2\kappa_T \\ =\beta S_{nn}(\mathbf{q}=0)\end{array}\right\}$	$\longleftrightarrow$	$\left\{\begin{array}{c}\chi_{ij}=\partial\langle m_i\rangle/\partial h_j \\ =\lim_{\mathbf{q}\to 0}\beta G_{ij}(\mathbf{q})\end{array}\right.$
$\left.\begin{array}{c}F[T,V,\langle n(\mathbf{x})\rangle]=\mathscr{A}[T,V,\mu(\mathbf{x})] \\ +\int d^dx\mu(\mathbf{x})\langle n(\mathbf{x})\rangle\end{array}\right\}$	$\longleftrightarrow$	$\left\{\begin{array}{c}F[T,\langle\mathbf{m}(\mathbf{x})\rangle]=\mathscr{A}[T,\mathbf{h}(\mathbf{x})] \\ +\int d^dx\mathbf{h}(\mathbf{x})\cdot\langle\mathbf{m}(\mathbf{x})\rangle\end{array}\right.$
$\delta F/\delta\langle n(\mathbf{x})\rangle=\mu(\mathbf{x})$	$\longleftrightarrow$	$\delta F/\delta\langle m_i(\mathbf{x})\rangle=h_i(\mathbf{x})$

Table 1: Comparação entre as grandezas estatísticas dos fluidos e dos sistemas magnéticos. Extraído de CL.

2 Simetrias

Vamos discutir aqui alguns elementos básicos de simetria que precisamos para o curso. As propriedades dinâmicas e de spin do sistema são determinadas pelo hamiltoniano. A simetria dessas propriedades está associada as transformações de simetria que mantém invariante o hamiltoniano. Essas transformações podem formar um conjunto fechado constituindo um grupo de simetria. O

caso mais simples que já discutimos foi o grupo de simetria Euclidiano, o qual se aplica no caso dos fluidos. O outro exemplo que consideramos, o hamiltoniano de Heisenberg, é invariante paa translações no tempo, reversão temporal e para rotações simultâneas de todos os spins para qualquer eixo e qualquer ângulo. Formalmente, o que significa a invariância do Hamiltonianno? Vamos chamar de $\mathcal{G}$ o grupo de simetria do Hamiltoniano. Se g é um elemento do grupo, a invariância pela transformação g nos diz que

$$g^{-1}\mathcal{H}g = \mathcal{H} \tag{24}$$

Para altas temperaturas, quando a entropia domina, a fase de equilíbrio, ou seja, o estado do sistema em equilíbrio, é em geral invariante para as operações de simetria do mesmo grupo do Hamitoniano. Isso significa que as médias termodinâmicas e das funçõe de correlação que não são nulas são aquelas que estão relacionadas com operadores que não são afetados pelas operações do grupo $\mathcal{G}$. No caso do hamiltoniano de Heisenberg, a altas temperaturas, quando o sistema encontra-se na fase paramagnética, temos

$$\begin{aligned} \langle \vec{m} \rangle &= 0 \\ C_{m_i m_j}(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{3}\delta_{ij} C_{mm}(|\vec{r} - \vec{r}'|) \end{aligned} \tag{25}$$

Podemos dizer que o sistema está em uma fase onde todos os microestados são igualmente acessíveis e a fase do sistema é determinada pela sua energia livre.

Podemos alterar essa situação modificando as condições macroscópicas do sistema, como por exemplo aumentando a pressão, diminuindo a temperatura ou aplicando um campo externo. Nesse último caso, como analisamos no caso do gás paramagnético, a simetria do Hamiltoniano é quebrada, e o novo Hamiltoniano possui uma simetria reduzida. O estado de equilíbrio vai necessariamente refletir o novo Hamiltoniano e apresentar uma ordem induzida pela quebra de simetria ou pelo campo externo. Esse foi o caso do campo magnético no gás paramagnético que fez aparecer

a magneticação, o parâmetro de ordem da nova fase. A simetria pode ser quebrada também de forma mais fundamental nos outros dois casos citados, diminuindo a temperatura ou aumentando a pressão. Nesse caso, a simetria do Hamiltoniano permance a mesma. Para temperaturas abaixo da temperatura de Curie, no ferromagneto, o sistema - no caso, em geral e no exemplo que discutimos, um sólido cristalino - o sistema apresenta uma magnetização mesmo a campo magnético externo nulo, apresentando uma direção preferencial e quebrando a simetria da fase anterior, paramagnética. Essencialmente, as fases ordenadas, como nesse caso, são caracterizadas pelo aparecimento de médias termodinâmicas $\langle \phi_a \rangle$ de operadores $\hat{\phi}_a$ que *não são invariantes sob transformações de* $\mathcal{G}$. Os valores médios ou os operadores (as duas opções podem aparecer) são os *parâmetros de ordem.* No nosso exemplo, o parâmetro de ordem é a magnetização $\langle \vec{m} \rangle$ a qual mantém a invariância para rotações quaisquer em torno do eixo paralelo a ela mesma mas não é invariante para rotações em torno de qualquer eixo perpendicular a si mesmo. *A fase ordenada, portanto, possui médias de operador e suas funções de correlação que são invariantes apenas para um subgrupo* H *de* $\mathcal{G}$*, embora o hamiltoniano permaneça invariante para o grupo completo* $\mathcal{G}$*.* A fase ordenada quebra a simetria do Hamiltoiano, sendo denominada *fase com quebra de simetria.* Em linguagem simbólica, dizemos que se $|G>$ é o estado fundamental do sistema na fase ordenada, h um elemento de H (subgrupo de $\mathcal{G}$, ou seja $H \subset \mathcal{G}$), então $h|G>=|G>$. Mas se g é um elemento de $\mathcal{G}$ mas $g \notin H$, então $g|G> \neq |G>$.

Uma descrição completa da fase ordenada necessita conhecer como os parâmetros de ordem $\langle \phi_a \rangle$ transformam-se sob o grupo $\mathcal{G}$. Novamente, considerando o nosso exemplo do ferromagneto o grupo $\mathcal{G}$ é o grupo de rotações. Podemos associar a cada rotação $g \in \mathcal{G}$ uma matriz 3x3 $U_{ij}(g)$ tal que $\langle m_i \rangle \rightarrow U_{ij}(g) \langle m_j \rangle$. O parâmetro de ordem $\langle \vec{m} \rangle$ transforma-se sob uma representação tridimensional do grupo de rotação. No caso geral, os parâmetros de ordem $\langle \phi_a \rangle$, $a = 1, ..., n$ transforma-se sob a representação de dimensão-n do grupo $\mathcal{G}$, ou seja, para cada $g \in \mathcal{G}$ há uma matriz $T_{ab}(g)$ tal que $\langle \phi_a \rangle \rightarrow T_{ab}(g) \langle \phi_b \rangle$. Qualquer conjunto de parâmetros de ordem que se transformam sob uma representação de $\mathcal{G}$ pode ser decomposto em subconjuntos disjuntos (sem intersecção) que não se misturam sob operações de $\mathcal{G}$. Cada um desses conjuntos consiste de k_I

elementos de $\left\langle \phi_a^I \right\rangle$ que se transforma entre si sob uma representação *irredutível* de $\mathcal{G}$ de dimensão k_I.

Vamos examinar sob outro ângulo as operações do grupo $\mathcal{G}$ na fase ordenada. Como a fase ordenada quebra a simetria, temos dois ou mais mínimos equivalentes da energia livre representando fases que podem coexistir em equilíbrio. Ou seja, o estado fundamental do sistema é degenerado. Cada fase caracteriza-se por um valor particular do parâmetro de ordem. As transformações do parâmetro de ordem pelos elementos de $\mathcal{G}$ representam uma transformação entre as diferentes fases de equilíbrio equivalentes. Ou, elas levam um estado degenerado a outro. Consideremos o caso do ferromagneto. A ordem ferromagnética pode ser realizada com $\vec{M}$ (ou o valor médio do parâmetro de ordem, $\langle \vec{m} \rangle$) apontando em qualquer direção. Devido a simetria rotacional do hamiltoniano, qualquer uma dessas direções (mas não em módulo) de $\vec{M}$ possui a mesma energia livre e portanto é degenerada. Uma rotação do sistema leva uma direção de magnetização a uma outra. No entanto, o verdadeiro estado fundamental é *apenas* um desses estados, quebrando a simetria original. Dizemos então que o sistema teve *uma quebra expontânea de simetria.*

O esquema para nosso estudo está praticamente pronto. Considerando um estado (fase) condensado, temos que identificar os parâmetros de ordem ϕ_a. A termodinâmica e a física estatística pode ser desenvolvida de forma análoga ao exemplo que consideramos (ferromagneto). Para isso, introduzimos os campos $h_a(\vec{r})$ que são conjugados a $\phi_a(\vec{r})$ introduzindo um hamiltoniano externo

$$\mathcal{H}_{ext} = -\int \mathrm{d}\vec{r} h_a(\vec{r})\phi_a(\vec{r})$$

e definir a função de partição $\mathcal{Z}[T, h_a(\vec{r})]$ e o potencial associado $\Phi = -k_B T \ln \mathcal{Z}[T, h_a(\vec{r})]$. A transformada de Legendre permite obter a energia livre $F[T, \langle \phi_a(\vec{r}) \rangle]$.

A teoria de Landau para as transições de fase enfatiza a existência de um parâmetro de ordem macroscópico Φ_a o qual mede a fase ordenada abaixo de uma temperatura T_c. Essa variável termodinâmica é uma média no ensemble de variáveis microscópicas ϕ_a. Essas são funções das coordenadas do espaço-tempo de tal maneira que sua distribuição no espaço e variação no tempo

é fundamental para a média das variáveis. Na fase desordenada, acima de T_c, essas variáveis encontram-se em movimento aleatório e a média $\langle \phi_{a,i} \rangle_t$ desaparece em cada ponto da rede e é independente do sítio i. Abaixo de T_c elas são correlacionadas e em movimento lento e a fase ordenada domina sua distribuição espacial. A simetria do sistema só é quebrada quando Φ_a for não nulo mas, tão pequena quanto ela seja, ela reduz a simetria do sistema. A quebra de simetria sempre é abrupta. A simetria (ou sua quebra) está lá ou não está.

Há, no entanto, diferentes maneiras como a simetria é quebrada e isso define a ordem da transição. Em geral, classificamos em dois tipos de transição de fase:

1) *A transição de fase de primeira ordem ou transição de fase abrupta* é quando o parâmetro de ordem aparece de forma descontinua abaixo da temperatura de transição T_c. Os dois grupos de simetria, na fase mais simétrica e na fase mais ordenada, podem ou não ter uma relação grupo-subgrupo.

2) *A transição de segunda ordem* ou *transição de fase contínua* é quando o parâmetro de ordem aparece gradualmente. As simetrias das duas fases são relacionadas e o grupo de simetria da fase mais ordenada deve ser um subgrupo da fase mais simétrica.

Vamos exemplificar isso com o caso de sistemas ferroelétricos, o $BaTiO_3$. A figura mostra a transição de primeira ordem desse material, com a polarização indo de zero a um valor finito descontinuamente na temperatura de transição. O $BaTiO_3$ tem uma rede cúbica com uma célula unitária composta por átomos de bário nos vértices, átoms de titânio no centro e átomos de oxigênio no centro das faces. Quando a temperatura diminui abaixo de T_c os átomos de titânio e oxigênio movimentam-se em relação aos átomos de bário, paralelos aos lados do cubo. A simetria muda, tornando-se tetragonal em vez de cúbica. Com isso, a polarização elétrica - o parâmetro de ordem - salta de zero para um valor finito a $T_c = 120°C$. A figura mostra uma transição de fase de segunda ordem para o $SrTiO_3$ a $T_c = 110°C$. A mudança de simetria estrutural muda de cúbica para tetragonal por uma inclinação do oxigênio vizinho octaédrico. O ângulo de inclinação é o parâmetro de ordem o qual cresce gradualmente a partir de zero.

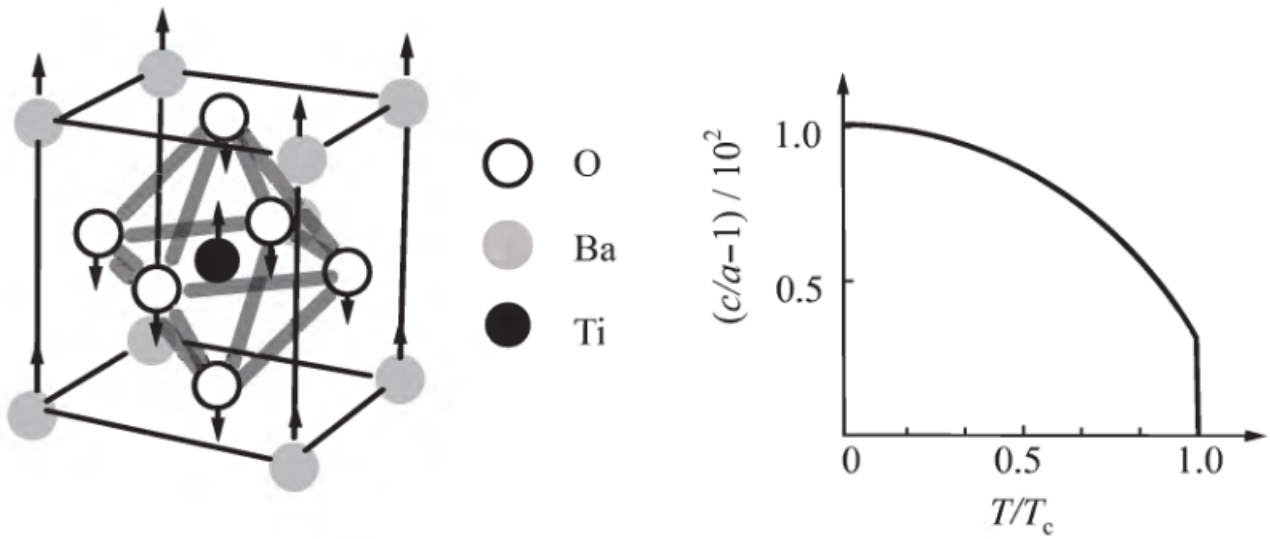

Figure 4: Transição de primeira ordem para o $BaTiO_3$. c/a é a razão entre os parâmetros de rede. Extraído de DG.

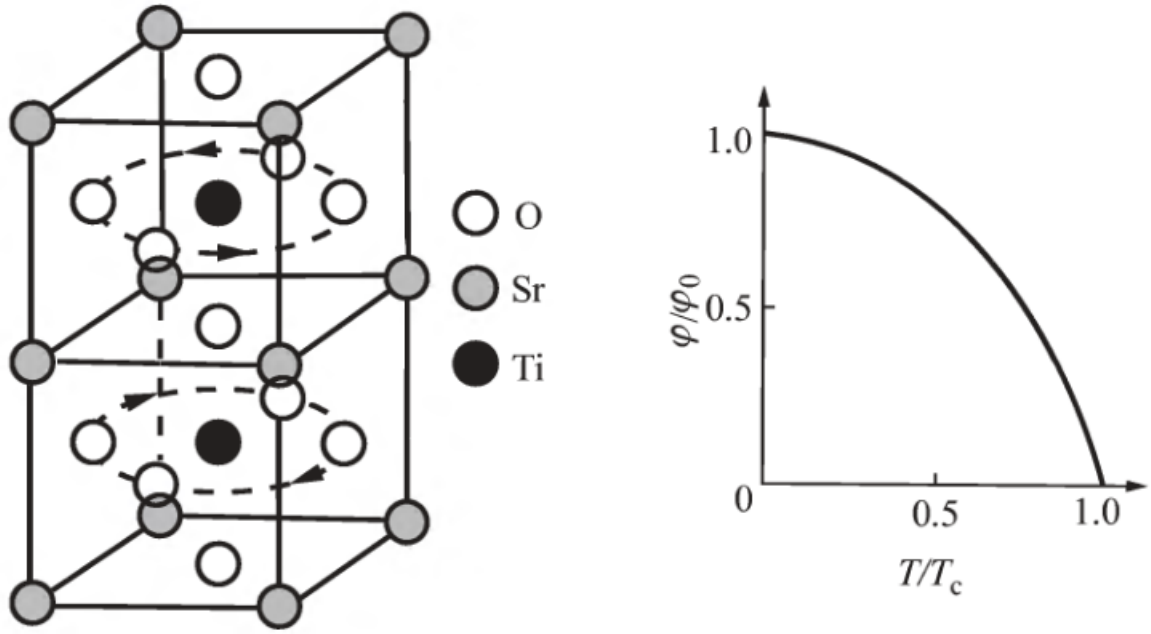

Figure 5: Transição de fase de segunda ordem para o $SrTiO_3$. φ é o ângulo do oxigênio octaédrico. $\varphi_0 = 1,3°$ é o valor máximo para o ângulo de inclinação. Extraído de DG.

As fases condensadas são obtidas, em geral, pela redução de simetria do estado, começando a partir da fase desordenada, a altas temperaturas. Está claro que o grupo de simetria associado

a nova fase ordenada desempenha um papel de grande importância na compreensão do sistema. Há, no entanto, um grande número de simetrias. Por exemplo, os grupos espaciais (translação + grupo pontual) das redes cristalinas somam 230 grupos diferentes. Se incluirmos o grau de liberdade de spin chegamos até 1651 grupos diferentes. Todas essas simetrias diferem nos seus detalhes mas podemos agrupá-las em alguns poucos grupos, relativamente simples, que preservam muitas propriedades que são comuns a diversas simetrias. Vamos discutir os casos que mais nos interessam. Para isso, vamos fazer duas distinções, em termos de grupos contínuos ou discretos e simetrias globais ou locais:

1) *Grupos discretos*: grupos de simetria que possuem um número finito, enumerável, de elementos. Por exemplo, os grupos de simetria pontuais que formam as redes espaciais de Bravais.

2) *Grupos contínuos*: grupos que possuem um contínuo não enumerável de simetrias. Por exemplo, o grupo Euclidiano.

As propriedades dos sistemas condensados, tanto estáticas quanto dinâmicas, bem como a natureza de seus defeitos, dependerão muito se a fase ordenada quebrou uma simetria discreta ou ordenada.

a) *Simetria global*: o Hamiltoniano possui simetria global se for invariante em relação a um grupo de operações espacialmente invariantes, isto é, que se aplicam na mesma forma em todo o espaço de representação do sistema físico.

b) *Simetria local*: o Hamiltoniano tem simetria local se ele também for invariante para operações aplicadas independentemente em diferentes pontos do espaço. Por exemplo, o hamiltoniano de Heisenberg possui simetria local uma vez que é invariante para uma rotação qualquer aplicada em todo o sistema igualmente mas não possui simetria local uma vez que uma rotação qualquer de um de seus componentes, isto é, uma rotação individual de um dos spins, altera o sistema físico.

Simetrias locais em geral estão associadas a simetrias de calibre como a que conhecemos do eletromagnetismo. Em geral, as simetrias que consideraremos são simetrias globais. Um exemplo de quebra de simetria local é a fase supercondutora que tem a simetria de calibre local quebrada.

2.1 Elementos de teoria de grupo (glossário)

Alguns elementos básicos de teoria de grupo:

Grupo: $G \equiv \{g, *\}$ conjunto de operações fechadas sob a operação binária * . Deve incluir a identidade a inversa e ser associativo.

Grupo abeliano: comutativo

A tabela abaixo reúne alguns dos grupos contínuos mais conhecidos.

Grupo	**Elementos**	**Operação**
U(n)	Grupo unitário de grau n: $n \times n$ matrizes unitárias: $U^*U = I$ onde $U^* \equiv$ *transposta* conjugada de U	Multiplicação
SU(n)	Grupo unitário especial: $n \times n$ matrizes unitárias com determinante igual a 1	Multiplicação
O(n)	Grupo ortogonal: $n \times n$ matrizes ortogonais: $U^T = U^{-1}$ ou $U^TU = UU^T = I$	Multiplicação
SO(n)	Grupo ortogonal especial: $n \times n$ matrizes ortogonais com determinante igual a 1	Multiplicação

Homomorfismo: sejam dois grupos $G = \{g, *\}$ e $H = \{h, \cdot\}$. G e H são homomórficos se há um mapeamento $f : G \to H$, onde $h = f(g)$, tal que preserve a estrutura imposta pela operação

$$f(g_1 * g_2) = f(g_1) \cdot f(g_2)$$

Isomorfismo: homomorfismo onde a correspondência é um-a-um.

Exemplo: o grupo O(2) é isomórfico ao grupo U(1).

$$\begin{aligned} U(1) &\to e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \\ O(2) &\to \text{rotações ortogonais } 2 \times 2 \end{aligned}$$

Aritimética modular: estabelece uma relação de *congruência* entre dois inteiros, compatível com operação em círculo dos inteiros: adição, subtração e multiplicação. Por exemplo, para um inteiro positivo n, dois inteiros a e b são *congruentes módulo n*

$$a \equiv b \,(\text{mod } n)$$

quando a diferença $a - b$ for um inteiro múltiplo de n. Ou, se a e b uma vez divididos por n produzem o mesmo resto r. O número n é o *modulus* de congruência. Por exemplo,

$$38 \equiv 14 \,(\text{modulus } 12)$$

Se

$$\begin{aligned} a_1 &\equiv b_1 \,(\text{mod } n) \\ a_2 &\equiv b_2 \,(\text{mod } n) \end{aligned}$$

então

$$a_1 \pm b_1 \equiv b_1 \pm b_2 \,(\text{mod } n)$$

e, se a_1, a_2, b_1, b_2 são todos inteiros, então temos também

$$a_1 a_2 \equiv b_1 b_2 \,(\text{mod } n)$$

Coset: se G é um grupo, H um subgrupo de G, g um elemento de G, h um elemento de H, então

$$gH = \{gh : h \,\text{é um elemento de H}\}$$

Se

$$gH = Hg$$

então H é um subgrupo normal.

Grupo Quociente (G/N): se G é um grupo, N um subgrupo normal, então

$$G/N \equiv \text{conjunto de cosets de } N \text{ em } G$$

Exemplo:

Considere o grupo adição módulo 6

$$G = \{0, 1, 2.3, 4, 5\}$$

Seja

$$N = \{0, 3\}$$

Então o grupo quotiente é

$$\begin{aligned}
G/N &= \{aN : a \in G\} = \{a\{0,3\}a :\in \{0,1,2,3,4,5\}\} \\
&= \{0\{0,3\}, 1\{0,3\}, 2\{0,3\}, ...\} \\
&= \{\{(0+0)\text{mod } 6, (0+3)\text{mod } 6\}, \{\{1+0)\text{mod } 6, ...\} \\
&= \{\{0,3\}, \{1,4\}, \{2,5\}, \{3,0\}, \{4,1\}, \{5,2\}\} \\
&= \{\{0,3\}, \{1,4\}, \{2,5\}, \{0,3\}, \{1,4\}, \{2,5\}\} \\
&= \{\{0,3\}, \{1,4\}, \{2,5\}\}
\end{aligned}$$

2.2 Simetrias contínuas,

O grupo contínuo mais simples é o grupo $O(2)$, das rotações em um plano. Uma realização física para esse grupo é o *ferromagneto com um plano-fácil (easy-plane).* Nesse caso, os spins estão confinados a um plano, devido a alguma anisotropia de origem nos campos cristalinos. Normalmente designamos esse plano por *plano-xy.* Na prática, essa simetria tem pouca aplicação mas é um modelo importante na compreensão das propriedades de quebra de simetria contínua. Esse grupo é isomorfo ao grupo $U(1)$ que representa as transformações de fase de um número complexo. A realização física desse grupo é o helio superfluido, os sistemas supercondutores. Esses sistemas caracterizam-se por uma fase condensada representada por uma função de onda do estado coletivo com uma amplitude e uma fase. A discussão anterior pode ser estendida para esse caso com um parâmetro de ordem identificado com o valor médio do operador de aniquilação de um bóson: $\hat{\psi}(\vec{r}) \to \langle\psi\rangle = |\langle\psi\rangle| e^{i\phi}$. O campo conjugado a $\psi(\vec{r})$ cria uma partícula em $\vec{r}$. Outras fases condensadas descritas pelo grupo $\underline{U(1)}$ podem ser encontradas nos cristais líquidos como a fase esmética-C, onde o parâmetro de ordem é o diretor-c, isto é, a projeção do diretor $\hat{n}$ no plano das camadas esméticas e a fase hexática, onde o parâmetro de ordem é $\left\langle e^{6i\theta}\right\rangle$.

Outro grupo contínuo importante é o grupo $O(3)$. A realização física já vem sendo discutida com o hamiltoniano de Heisenberg que permite analisar tanto sistemas ferromagnéticos como antiferromagnéticos onde os campos cristalinos que tendem a alinhar os spins ao longo de eixos cristalinos não são importantes. Caso oposto, por exemplo, de uma possível realização de um material magnético com plano-fácil ou eixo-fácil. A fase nemática dos cristais líquidos também quebra a simetria $O(3)$. Devemos, no entanto, distinguir os dois casos, cristais líquidos e magnetismo), uma vez que o subgrupo de simetria das fases ordenadas são diferentes.

De forma geral, o estudo de modelos invariantes para rotações ortogonais no espaço de dimensão n, grupo $O(n)$, são importantes e merecem ser analisados.

2.3 Simetrias discretas

O exemplo mais simples de grupo discreto é o Z_2 que consiste de apenas dois elementos: identidade e um elemento cujo quadrado é a identidade. Embora simples, ele aparece em inúmeras situações como por exemplo o grupo de reflecções sobre um plano, reversão temporal e inteiros sob soma módulo 2. Para nós, sua identificação é imediata com o model de Ising. A simetria de Ising relaciona-se com um sistema físico onde só é possível dois estados equivalentes os quais podem ser escritos como diferenciando-se apenas pelo sinal. Por ser um modelo magnético, a primeira realização física do modelo de Ising é um sistema cristalino com forte anisotropia devido aos campos cristalinos que força o spin alinhar-se em uma única direção. O parâmetro de ordem é $\langle m_z \rangle$ o qual pode ser positivo ou negativo. O seu valor absoluto depende das condições de equilíbrio termodinâmico as quais são determinadas pela equação de estado. O valor positivo ou negativo nos dá uma degenerescência do estado fundamental e a escolha de um desses estados pelo sistema leva a uma quebra de simetria expontânea. O campo conjugado é a componente na direção da magnetização de um campo magnético externo.

Um material antiferromagnético na fase ordenada apresenta uma alternância na orientação dos spins. Em geral, separamos a rede estrutural em duas sub-redes, com cada rede apresentando um ordenamento *ferromagnético*, opostas uma a outra (ver fig. 6). O parâmetro de ordem nesse caso é a diferença entre a magnetização das duas sub-redes, $\langle \phi \rangle = \langle m_A - m_B \rangle$ e o campo conjugado é o campo magnético externo apontando para cima na subrede A e para baixo na subrede B: $h = H_A - H_B$, onde sub-entendemos que as direções são as mesmas, por exemplo, orientado no eixo-z. Esses sistemas, necessariamente, apresentam uma rede estrutural que pode ser separada em duas (bipartida).

Um outro exemplo que se aplica o modelo de Ising é o caso de ligas. O mais conhecido é o caso do bronze-β, composto por uma mistura meio a meio de Cu e Zn em uma rede BCC. A rede BCC é uma rede bipartida. A altas temperaturas, os átomos de Cu e Zn ocupam as duas subredes com igual probabilidade e temos uma fase desordenada. A medida que a temperatura diminui ($T_c = 733$K) uma fase ordenada aparece com os átomos de Cu ocupando o centro do cubo e os átomos de Zn os

vértices (ou vice-versa) (ver fig. 7). O parâmetro de ordem é $\langle\phi\rangle = \langle n_{Cu,A} - n_{Cu,B}\rangle$, onde $n_{Cu,A}$ é o operador de número para os átomos de Cu na subrede A. O campo conjugado é a diferença de potencial químico para os átomos de Cu nas duas subredes: $h = \mu_{Cu,A} - \mu_{Cu,B}$. Observe que, como no caso do antiferromagnetismo de Ising, tal campo não existe na prática mas é uma construção teórica útil.

Já discutimos o caso da transição gás-líquido onde o parâmetro de ordem é a diferença entre as densidades: $\langle\phi\rangle = \langle n_L - n_G\rangle$. O campo conjugado é o potencial químico. Uma mistura de dois componentes tem parâmetro de ordem similar. Esses casos também podem ser tratados como um sistema de dois níveis, portanto, pelo modelo de Ising.

Simetrias do tipo Z_N dos inteiros sob adição modulo N desempenham também um papel importante. Um dos exemplos, que já discutimos, é a adsorção do kriptônio no grafite. Nesse caso a simetria é Z_3. A rede do graphite é uma rede hexagonal com os átomos de Kr localizando-se nas células unitárias mas apenas um em cada três, devido ao seu tamanho. Temos então três estados equivalentes (degenerados) e a simetria Z_3 é quebrada quando ocorre a transição do "fluido" para uma rede (comensurável).

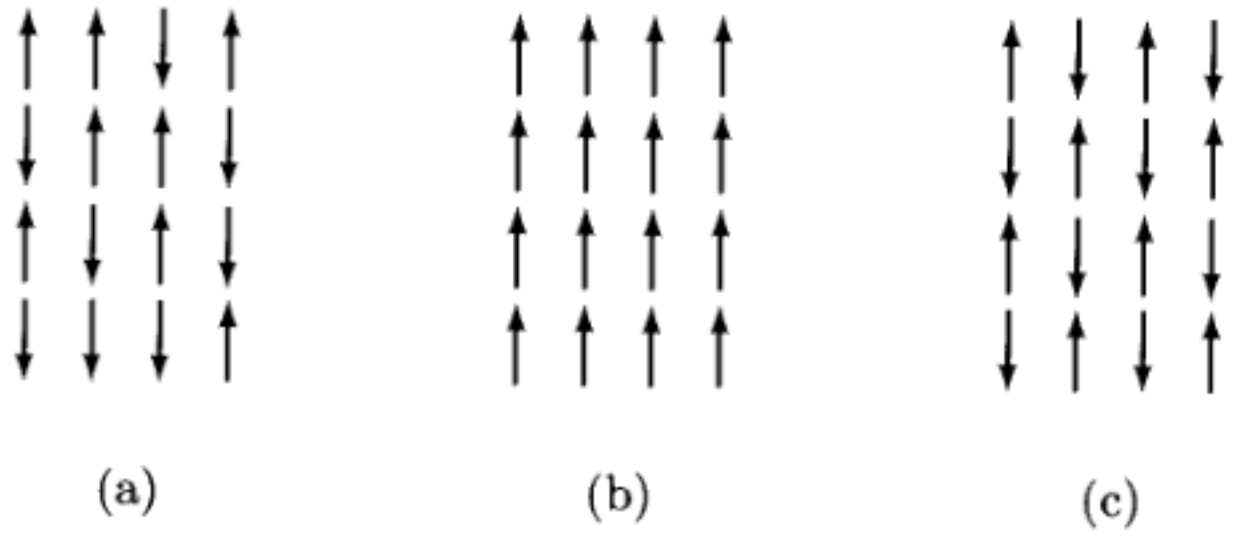

Figure 6: Fases para o magnéto de Ising com simetria Z_2. (a) Paramagneto desordenado, (b) ordem ferromagnética e (c) ordem antiferromagnética. Extraído de CL.

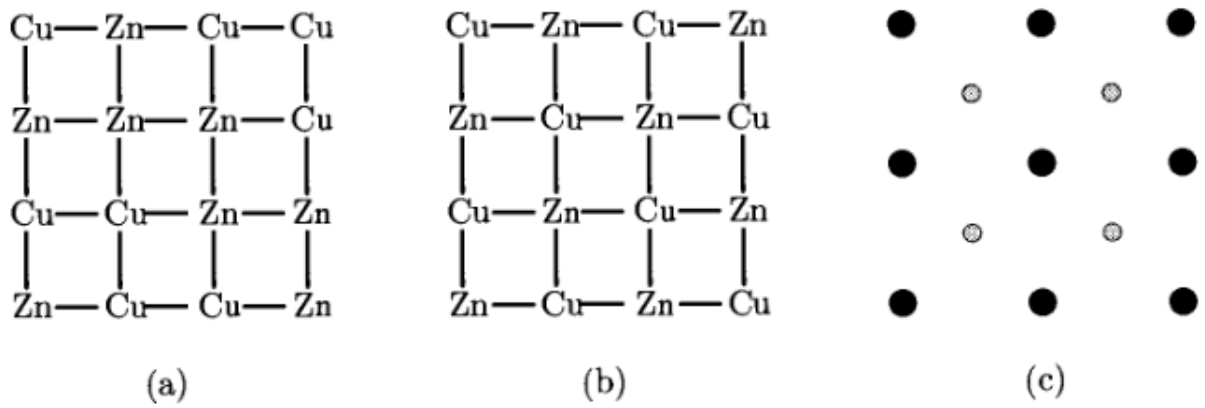

Figure 7: (a) Fase desordenada do bronze-β em uma rede quadrada. A rede tem parâmetro a. (b) Fase ordenada. A célula unitária agora é um quadrado de lado $\sqrt{2}a$. (c) Picos de Bragg com os pontos escuros representando os picos na fase desordenada e os pontos cinzas os picos que aparecem na fase ordenada com a modificação da rede. Extraído de CL.

A tabela 2resume algumas das simetrias e seus parâmetros de ordem.

3 Modelos

Em uma grande variedade de situações as fases condensadas são consequência das interações entre as partículas e são fenômenos coletivos. A nova ordem na fase condensada leva a observação de variáveis macroscópicas que podem ser usadas na descrição termodinâmica. Modelos microscópicos a nível atômico permitem um tratamento estatístico.

Ao longo dos anos, alguns modelos que descrevem a interação entre as partículas ganharam grande notoriedade por permitirem não só compreender diversos sistemas físicos reais mas também elucidar muitas das propriedades das fases condensadas bem como das transições de fases.

Um dos modelos que temos discutido aqui é o modelo de Heisenberg. Esse modelo tem simetria $O(3)$ e permite analisar os materiais magnéticos que tem sua ordem magnética determinada por spins localizados. Na presença de um campo magnético, o seu hamiltoniano se escreve

$$\mathcal{H}_{Heis} = -\sum_{ij} J_{ij}\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \vec{H} \cdot \sum_i \vec{\sigma}_i \tag{26}$$

Symmetry	System	Order parameter	Conjugate field	Physical example
Z_2/Ising	uniaxial FM	$\langle m_z \rangle$	h_z	
	uniaxial AF	$\langle m_{z,A} - m_{z,B} \rangle$	$h_{z,A} - h_{z,B}$	Rb_2NiF_4, K_2MnF_4
	order-disorder	$\langle n_A - n_B \rangle$	$\mu_A - \mu_B$	β-brass
	displacive	$\langle u_z \rangle$	f_z	$BaTiO_3$
	liquid-gas	$\langle n_L - n_G \rangle$	μ	many
$O_2/U(1)$	easy-plane FM	$\langle \mathbf{m} \rangle$	$\mathbf{h}$	
	easy-plane AF	$\langle \mathbf{m}_A - \mathbf{m}_B \rangle$	$\mathbf{h}_A - \mathbf{h}_B$	
	superfluid	$\langle \psi \rangle$	h_ψ	He_4
	smectic-C			Fig. 2.7.1
	hexatic-B	$\langle e^{6i\theta} \rangle$		Fig. 2.7.7
O_3	Heisenberg FM	$\langle \mathbf{m} \rangle$	$\mathbf{h}$	EuS, EuO, Fe, Ni
O_0	Heisenberg AF	$\langle \mathbf{m}_A - \mathbf{m}_B \rangle$	$\mathbf{h}_A - \mathbf{h}_B$	$RbMnF_3$
	SAW			polymer

Table 2: Simetrias, parâmetros de ordem, campos conjugados e exemplos físicos. Extraído de CL e DG.

onde fizemos $\mu_s \vec{s}_i = \vec{\sigma}_i$ para simplificar as expressões e generalizá-las. Essa expressão é uma forma um pouco mais geral do que a que escrevemos anteriormente. Não é necessário, mas em geral limitamos a interação aos primeiros vizinhos.

Podemos desenvolver esse Hamiltoniano e reescrevê-lo na forma

$$\mathcal{H}_{\mathcal{H}} = - J_z \sum_{ij} \sigma_{zi}\sigma_{zj} - J_\perp \sum_{ij} (\sigma_{xi}\sigma_{xj} + \sigma_{yi}\sigma_{yj}) - H \sum_i \sigma_{zi} \tag{27}$$

Se pensarmos em um sistema cristalino levando em conta o campo cristalino local, podemos imaginar uma situação fortemente anisotrópica onde o campo magnético alinha-se ao longo de uma direção. Basicamente isso significa que $|J_z| \gg |J_\perp|$ e podemos desprezar o hamiltoniano em (x, y) e escrevermos

$$\mathcal{H}_{Ising} = -J \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \tag{28}$$

onde eliminamos o subíndice z por simplicidade. Esse é o Hamiltoniano de Ising (1925) que possui simetria Z_2 e tem grande apelo pela sua simplicidade. No caso do spin $s = \pm 1/2$ (ou $\sigma = \pm 1$) temos o modelo com simetria discreta mais simples possível. Ele representa o caso de um spin clássico uma vez que os spins comutam, contrário do Hamiltoniano de Heisenberg. A sua solução em uma dimensão é fácil de ser obtida mas não apresenta nenhuma ordem magnética (exceto para $T = 0\,K$). Já em duas dimensões ou mais temos uma solução completamente desordenada, paramagnética, acima de uma certa temperatura crítica, quando o estado fundamental possui a simetria Z_2. Abaixo dessa temperatura temos uma ordem ferromagnética (para $J > 0$). Nesse caso, o estado fundamental quebra a simetria Z_2. Na verdade, existem duas soluções degeneradas no estado fundamental e a *"escolha"* de uma delas pelo sistema leva a quebra expontânea de simetria (Z_2). Em 1944 Lars Onsager demonstrou a existência de uma solução exata - mas bem elaborada - em duas dimensões. Até hoje, não há solução exata conhecida em três ou mais dimensões. Como já discutido anteriormente, esse modelo permite discutir o caso de ligas, misturas e fluidos. Em geral, qualquer sistema binário. Alguns sistemas físicos, como o MnF_2 apresentam ordem magnética que

pode ser bem descrita pelo modelo de Ising.

Vamos considerar o outro "extremo" da influência de um campo cristalino e assumir que o spin só pode alinhar-se em um plano (x, y). nesse caso, o spin é um vetor bidimensional e se escreve

$$\vec{\sigma}_i = \hat{x}\sigma_{xi} + \hat{y}\sigma_{yi} = \sigma(\hat{x}\cos\theta_i + \hat{y}\cos\theta_j) \tag{29}$$

O parâmetro de ordem pode ser o valor médio de $\vec{\sigma}_i \to \langle\vec{\sigma}_i\rangle = \vec{\eta}$. Acima da temperatura crítica, os spins encontram-se aleatóriamente distribuídos e $\vec{\eta} = 0$. O sistema tem simetria $O(2)$ e o estado fundamental também. Abaixo da temperatura crítica (e se $J_\perp > 0$) os spins alinham-se preferencialmente ao longo de uma direção no plano xy e a simetria $O(2)$ é quebrada para o estado fundamental. O parâmetro de ordem assume um valor finito,

$$\vec{\eta} = \langle\sigma\rangle\,(\hat{x}\cos\theta + \hat{y}\cos\theta) \tag{30}$$

As interações entre os spins em sítios diferentes está na origem da quebra de simetria e podemos escrever

$$\vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j = \sigma^2\cos\theta_{ij} \tag{31}$$

e $\langle\theta_{ij}\rangle \to 0$ quando a simetria é quebrada.

Esse é o *modelo XY*. Quando isotrópico, os estados ordenados apresentam uma degenerescência infinita. A escolha pelo sistema de uma das soluções quebra a simetria. Esse é o modelo de simetria contínua mais simples de ser tratado.

A simetria $O(2)$ é isomorfa a $U(1)$. Essa representa um parâmetro de ordem como um número complexo, ou a fase de um sistema:

$$\psi = |\psi|e^{i\theta} \tag{32}$$

que, como já discutimos, representa o caso dos superfluidos e supercondutores, com a quebra

da simetria de calibre.

Vamos examinar agora uma outra classe de siemtrias, as Z_N, chamados de *modelos relógios* ("clock models"). Definimos eles associando em cada sítio de uma rede um spin com variável $\vec{s}_{\vec{l}}$ de comprimento unitário, ou seja, apontando em uma das N direções igualmente espaçadas de um círculo unitário, isto é,

$$\vec{s}_{\vec{l}} = \hat{x}\cos\frac{2\pi n_{\vec{l}}}{N} + \hat{y}\sin\frac{2\pi n_{\vec{l}}}{N} \tag{33}$$

onde $n_{\vec{l}} = 0, ..., N-1$.

De forma similar, modelos com simetria $O(n)$, chamados de *modelos de vetor-n,* podem ser definidos associando com cada sítio da rede um vetor spin $\vec{s}_{\vec{l}}$ com módulo unitário e dimensão$-n$. Nesse caso o spin tem os valores $\vec{s}_i \equiv (s_{i1}, s_{i2}, ..., s_{in})$ e é um vetor unitário de dimensão-n e $\sum_{\alpha=1}^{n} s_{i\alpha}^2 = 1$. $\vec{s}_i$ interage isotropicamente com o spin $\vec{s}_j$ localizado no sítio j Os parâmetros do modelo são a dimensionalidade do sistema d e a dimensionalidade do spin n, a qual também é identificada como *parâmetro de ordem do número de simetria.* O hamiltoniano para ambos os casos, Z_N e $O(n)$ tem a mesma forma funcional do modelo de Heisenberg:

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle\vec{l}\vec{l}'\rangle} \vec{s}_{\vec{l}} \cdot \vec{s}_{\vec{l}'} \tag{34}$$

Os modelos relógio podem ser reescritos expressando explicitamente $n_{\vec{l}}$:

$$\mathcal{H}_{rel} = -J\sum_{\langle\vec{l}\vec{l}'\rangle} \cos\left[2\pi(n_{\vec{l}} - n_{\vec{l}'})/N\right] \tag{35}$$

Podemos expressar o modelo XY (ou $O(2)$) da mesma forma:

$$\mathcal{H}_{XY} = -J\sum_{\langle\vec{l}\vec{l}'\rangle} \cos(\mathcal{O}_{\vec{l}} - \mathcal{O}_{\vec{l}'}) \tag{36}$$

O modelo de Ising identifica-se com o modelo relógio Z_2. Ele também pode ser identificado com o modelo $O(1)$ embora não possamos falar estritamente de uma rotação unidimensional. O

modelo $O(3)$ é o modelo de Heisenberg. O modelo $n = \infty$ pode ser resolvido exatamente. O modelo $n = 0$ representa o caso da estatística de sistemas de caminho aleatório que se evitam (*self-avoiding random walks*) ou de polímeros em solução.

Um outro modelo de grande utilidade é o *modelo de Potts* (refs. 3, 4). Nesse caso consideramos cada spin i como podendo estar em um dos $q$estados possíveis de orientações discretas $\zeta_i(\zeta_i = 1, 2, ..., q)$. Se dois spins vizinhos i e j tem a mesma orientação, então eles contribuem com um valor $-J$ para a energia total da configuração. Se i e j não têm a mesma orientação, então a contribuição do par é nula. O hamiltoniano do sistema pode ser escrito na forma

$$\mathcal{H}_{Potts} = -J \sum_{\langle \vec{l}\vec{l}' \rangle} \delta(\zeta_{\vec{l}}, \zeta_{\vec{l}'}) \tag{37}$$

onde $\delta(\zeta_{\vec{l}}, \zeta_{\vec{l}'}) = 1$ se $\zeta_{\vec{l}} = \zeta_{\vec{l}'}$ e nulo nos outros casos. Uma outra formulação, como aparece no CL, é

$$\mathcal{H}_{Potts} = -J \sum_{\langle \vec{l},\vec{l}' \rangle} [N\delta(\zeta_{\vec{l}}, \zeta_{\vec{l}'}) - 1] \tag{38}$$

Esse modelo é uma extensão do modelo de Ising e é invariante para a simetria Z_N. Os parâmetros do modelo são a dimensionalidade do sistema d e a dimensionalidade do spin q.

A figura 8 ilustra os modelos de vetor$-n$ e de Potts para dois casos em cada um. os dois modelos generalizam o modelo de ising. Podemos apresentá-los esquematicamente na forma da *linha de metro*, com o modelo de Potts representado na linha Norte-Sul e o modelo do vetor-n na linha Leste-Oeste. Os pontos da linha são representados pelos valores de q e n e representam casos específicos dos modelos. O ponto de cruzamento $q = 2$, $n = 1$ é o modelo de Ising (fig. 9).

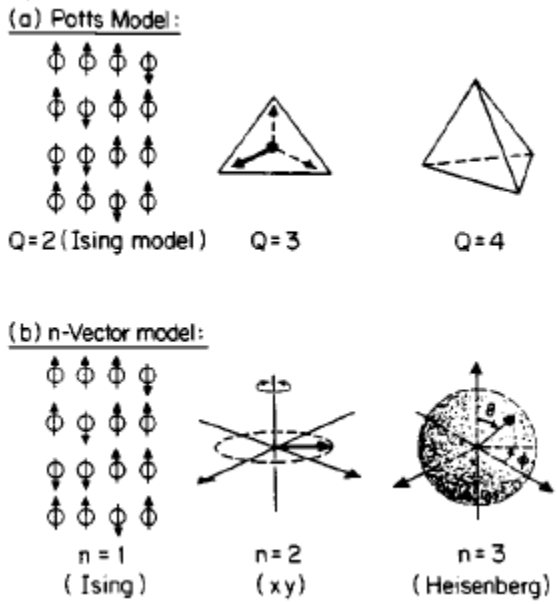

Figure 8: (a) Esquema do modelo q de Potts (b) e do modelo do vetor-n. Ref. .

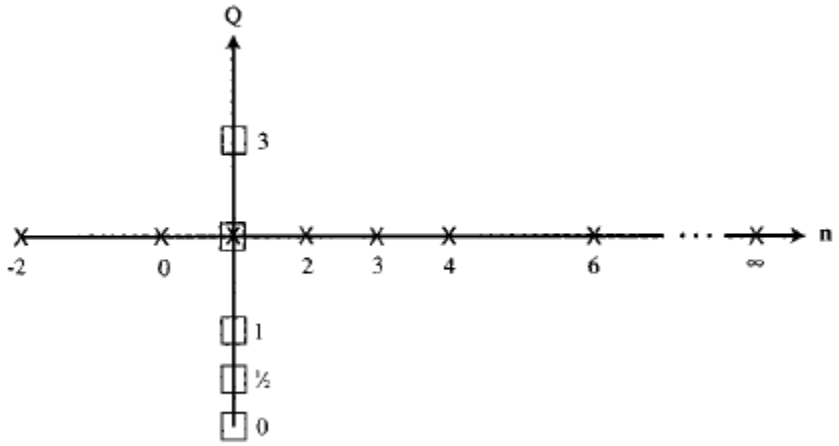

Figure 9: Esquema de apresentação do modelo de$q$ de Potts e do modelo do vetor-n como linhas de metro. Ref. .

References

[1] P.M. Chaikin and T.C. Lubensky, **Principles of Condensed Matter Physics**, Cambridge University Press, 2000.

[2] H.E. Stanley, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S358 (1999).

[3] R.B. Potts, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **48**, 106 (1952).

[4] Wu, F.Y., *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982)

[5] Alexander L. Fetter e John D. Walecka, **Quantum Theory of Many-Particle Systems**, Dover, 1971 (ed. Dover 2003).