UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

SBI-IFUSP
305M810T2759

Estudo da Existência da Fase de Kosterlitz–Thouless no Estado Fundamental de Rotores Quânticos

OSCAR BOLINA JÚNIOR

Tese de doutorado apresentada
ao Instituto de Física da
Universidade de São Paulo
Orientador: Prof. Dr. José Fernando Perez

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ex. 1
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
2759
INSTITUTO DE FÍSICA

Dezembro, 1997

Prof. Sylvio Roberto Accioly Canuto
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

Prof. Dr. José Fernando Perez – IFUSP (Orientador)
Prof. Dr. Walter Wreszinski – IFUSP
Prof. Dr. Eduardo Jordão Neves – IME
Prof. Dr. Clodoaldo Grotta Ragazzo – IME
Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar – IFT

530.414
B689e
D
ex.1

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Bolina Junior, Oscar
Estudo da Existência da Fase de Kosterlitz-Thouless no Estado Fundamental de Rotores Quânticos. São Paulo, 1997.

Tese (Doutoramento) Universidade de São Paulo.
Instituto de Física - Departamento de Física Matemática

Área de Concentração: Física das Partículas Elementares
Orientador: Prof. Dr. José Fernando Perez

Unitermos: 1. Transição de Kosterlitz-Thouless;
2. Rotores Quânticos; 3. Estimativas de Correlação;
4. Representação das Cargas; 5. Transformação de Sine-Gordon.

USP/IF/SBI - 64/97

RESUMO

Investigamos a existência de uma fase de Kosterlitz-Thouless no estado fundamental de um sistema de rotores quânticos em uma dimensão. Provamos que o modelo não exibe uma transição de primeira ordem, já que a estimativa de McBryan-Spencer é válida para os rotores. Obtemos a função de partição do modelo nas representações de Lie-Trotter, de *sine*-Gordon, e na representação das cargas. Nessa última, provamos um limite inferior para a função de correlação entre cargas externas.
Ainda na representação das cargas, damos uma nova prova do decaimento polinomial do limite superior para a função de correlação de um gás de dipolos (caroço duro) na presença de cargas externas.

ABSTRACT

We investigate the existence of a Kosterlitz-Thouless phase in the ground state of a one-dimensional array of quantum rotators. We prove that this model does not exhibit a first-order phase transition since a McBryan-Spencer bound holds for it. We obtain the partition function of the rotators in the Lie-Trotter, *sine*-Gordon, and charge representations. In this latter representation, we give a new proof of the upper bound polynomial decay on the external charges correlation function of a dipole gas with hardcore.

AGRADECIMENTOS

Mais uma vez me cabe agradecer ao Prof. Perez já tantos anos de orientação e troca de idéias (de fato, não é bem troca, visto que elas vinham mais de lá para cá). A par do trabalho científico, fique registrada minha gratidão por seu empenho naqueles sábados fora de hora, naqueles dias de imigrante ilegal, ... ;

Ao Parreira, com cuja colaboração esta tese (e já alguns *papers*) foi elaborada;

Ao Mingo, que tem me ajudado a resolver o que deixo sem resposta aqui;

Ao Departamento de Física-Matemática pelo suporte administrativo;

Sou grato ao Prof. Iberê Caldas por sua ajuda e paciência na conclusão deste trabalho;

Muito especialmente agradeço ao Prof. Abel Klein, da Universidade da Califórina, Irvine, que por um ano tão generosamente aí me recebeu;

À FAPESP e à CAPES, o apoio financeiro.

Conteúdo

1 Introdução à Transição de Kosterlitz-Thouless **13**
1.1 Transições de Segunda Ordem 16
1.2 A Transição de Kosterlitz-Thouless 17
1.3 A Transição em Gases de Coulomb 19

2 Revisão do Gás de Coulomb e Alguns Resultados **21**
2.1 Gases de Coulomb 21
2.2 A Representação de *sine-Gordon* do Gás de Coulomb 24
2.3 A Função de Correlação 26
2.4 Limite Inferior da Função de Correlação 26
2.5 A Função de Partição de Cargas Externas 27
2.6 O Operador de Desordem 28

3 Estimativas de Correlação na Representação das Cargas **30**
3.1 Introdução 30
3.2 A Função de Partição de Gases de Dipolos 32
3.3 A Desigualdade Eletrostática 33
3.4 As Cargas Externas 34
3.5 A Expansão de Cluster 36
3.6 O Limite Superior 37
3.7 Dipolos de Comprimentos Diferentes 39
3.8 Renormalização em L_1 e L_2 40
3.9 Translação 41
3.10 Expansões de Cluster 42

4 O Modelo de Villain **45**
4.1 Combinações Convexas 46

4.2 A Construção dos Blocos 47
4.3 Reprimindo a Atividade 48
4.4 Um Passo Intermediário 50
4.5 O Procedimento Indutivo para a Função de Partição 52
4.6 A Hipótese Indutiva 54
4.7 Extração da Energia de Cargas Isoladas 55
4.8 A Função de Correlação das Cargas Externas 58

5 Rotores Quânticos **61**
5.1 A Função de Partição 61
5.2 Exemplos de Rotores Planos 65
5.3 A Aproximação de Villain 66
5.4 A Estimativa de McBryan-Spencer 69

6 A Transformação de Dualidade **72**
6.1 Transformada de Fourier 72
6.2 O Modelo Dual de Villain e a Representação das Cargas . . . 75
6.3 Estimativa da Correlação entre Cargas Externas 76
6.4 O Operador de Desordem 77
6.4.1 Comentários 81
6.5 Conclusão 83

A A Desigualdade Eletrostática **84**

B A Função de Green **86**

APRESENTAÇÃO

Nesta tese estudamos um sistema de rotores quânticos em uma rede unidimensional com vistas a demonstrar a existência de uma fase de Kosterlitz-Thouless para o estado fundamental desse modelo no limite termodinâmico de volume infinito.

O sistema de rotores que estudamos é descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_x \frac{p^2(x)}{2I} - J \sum_x \cos(\theta(x) - \theta(x+1)) \tag{0.1}$$

$x \in \mathbb{Z}$, com acoplamento ferromagnético, $J > 0$, e onde $\theta(x) \in [-\pi, \pi]$ é a coordenada angular do rotor, e $p(x) = -\imath \frac{\partial}{\partial \theta(x)}$ é o momento angular conjugado à variável $\theta(x)$.
A idéia de demonstrar a transição de Kosterlitz-Thouless para esse modelo parece natural se lembrarmos que alguns modelos clássicos *bidimensionais* na rede como o rotor plano, o gás de Villain, e o gás de caroço duro apresentam uma fase de Kosterlitz-Thouless abaixo de certo valor crítico da temperatura, no qual a função de correlação tem apenas decaimento polinomial, com um expoente que depende da temperatura.
Os rotores quânticos *unidimensionais* podem ser mapeados, por meio da representação de Lie-Trotter, num sistema clássico bidimensional. O mapeamento produz um gás de Villain semelhante ao clássico com interação coulombiana em duas dimensões.
A diferença está em que no sistema clássico bidimensional em que o modelo quântico é mapeado, a segunda direção é uma direção *temporal* na qual o espaçamento depende de um parâmetro discreto n que no fim dever ser tomado no limite $n \to \infty$. Como o valor do espaçamento é n^{-1}, no limite $n \to \infty$ obtemos um contínuo nessa direção .
A idéia básica da tese é aplicar o mesmo método de prova da transição Kosterlitz-Thouless que foi usado com sucesso nos modelos clássicos citados acima para o gás de Villain na rede anisotrópica, com obtenção de resultados no limite do contínuo na direção temporal extra.
Vale lembrar ainda que gases de Coulomb no contínuo também exibem uma

fase de Kosterlitz-Thouless, a qual pode ser provada usando essencialmente o mesmo procedimento empregado na rede.
Logo, o modelo de rotores, que leva a um gás na rede com espaçamento discreto em uma direção , contínuo na outra, não deve – em princípio – apresentar comportamento muito diferente do correspondente gás na rede discreta ou no contínuo. O problema é fazer o *discreto* tender ao *contínuo* corretamente. Provar a transição de Kosterlitz-Thouless significa mostrar que a função de correlação do modelo tem dois comportamentos distintos em função da temperatura. Especificamente, a transição de Kosterlitz-Thouless é a passagem de uma fase de alta temperatura em que o decaimento da correlação é exponencial a um fase de baixa temperatura em que o decaimento da correlação é polinomial.
Nos rotores, o acoplamento J substitui a temperatura (ou temperatura inversa β) como parâmetro de determinação das fases do modelo. A idéia é mostrar que ordem de longo alcance existe para valores suficientemente grandes de J. Além disso, nossas estimativas devem ser uniformes em n, ou seja, independentes desse parâmetro no limite do contínuo.
No entanto, encontramos dificuldades técnicas na execução desse roteiro, o que nos tem impedido de concluir a prova. Conseguimos escrever a função de partição gás de Villain resultante do mapeamento dos rotores à semelhança de um gás de Villain clássico na rede bidimensional. Desenvolvemos todos os elementos da teoria da transição de Kosterlitz–Thouless de gases clássicos para o nosso gás de Villain, como representação de *sine*-Gordon, operador de desordem, espaço dual; obtemos estimativas de correlação , como a estimativa de McBryan-Spencer e de Jensen. A referência básica aqui ainda é [24], [25].
No entanto, o método de prova da transição aplicado à função de partição do gás de Villain obtido a partir dos rotores não se mostrou adequado para lidar com o parâmetro discreto do eixo temporal. No caso de gases clássicos, a prova segue por indução sobre escalas de blocos construídos na rede em que, em cada escala, o balanço energia-entropia nos blocos dever ser favorável, no sentido de que a energia *ganha* da entropia. Estamos convencidos de que para o gás de Villain que obtivemos esse balanço é favorável a partir de uma escala grande, na qual os blocos têm lados –digamos – macroscópicos, qualquer coisa independente de n. O problema é que para se chegar até essa escala por indução , é preciso acertar o balanço energia-entropia em alguma escala inicial menor, em que o espaçamento de rede desequilibria aquele balanço em

favor da entropia.
É irônico encontrarmos dificuldade com os rotores, uma vez que esse sistema têm servido de base para a explicação heurítica da transição de Kosterlitz-Thouless [20].
Os resultados de correlação a que aludimos acima mostram que os rotores não possuem transição de primeira ordem, mas nada nos dizem acerca de transições de ordens mais altas, como é a de Kosterlitz-Thouless.
Esta tese é essencialmente um trabalho de desenvolvimento de métodos para obtenção de estimativas de correlação tanto para gases clássicos como para gases obtidos por mapeamento do sistema quântico.
Já desde o início da tese nos propusemos a verificar como certas estimativas de correlação , mesmo em modelos clássicos para os quais a transição de Kosterlitz-Thouless já havia sido provada, podia ser feita diretamente na *representação das cargas.* Como se verá adiante, a chamada representação de *sine*-Gordon é o instrumento de preferência para a realização de tais provas.
O método de obter estimativas de correlação que apresentamos em conexão com a representação das cargas consiste em escrever a função de correlação em expansão de cluster. As dificuldades com essas expansões são geralmente muito grandes. Todavia, no caso da correlação , a expansão de cluster, combinada com a desigualdade eletrostática, traz grande simplificidade.
O elemento de relevância aqui é que muitos modelos não possuem uma transformação de *sine*-Gordon diponível, e então não há como dispensar a representação das cargas para efetuar as estimativas.
Sumarizamos nossos resultados abaixo, juntamente com a descrição da tese.

O **Capítulo 1** é dedicado a uma introdução bastante geral à teoria das transições de fase, começando pelas transições de fase mais simples e conhecidas, que são as da água ao passar de um estado físico a outro. Apresentamos a idéia de ordem-desordem e de parâmetro de ordem ainda no âmbito das transições de primeira ordem.
A seguir, discutimos brevemente alguns resultados relacionados com transições de segunda ordem para entrarmos no tema principal da transição de Kosterlitz-Thouless em sistemas bidimensionais.

No **Capítulo 2** fazemos uma revisão de gases de Coulomb e enunciamos os resultados acerca da transição de Kosterlitz-Thouless nesses sistemas. Explicamos o que é a representação de *sine*-Gordon, e como esses resultados

são conseguidos nessa representação . Para isso, definimos a função de correlação e o operador de desordem para os gases de Coulomb. Discutimos como a obtenção de um limite inferior para a função de correlação , através da desigualdade de Jensen, é o primeiro passo para provar a existência da transição de Kosterlitz-Thouless. O passo seguinte é encontrar um limite superior para a função de correlação (ou, o que é equivalente, um limite inferior para o operador de desordem).

Esses limites — e, em particular, o limite superior para a função de correlação — são usualmente obtidos na representação de *sine*-Gordon. Para gases de dipolos e de Coulomb o limite superior para a correlação foi provado por Frohlich-Spencer [22] nessa representação .
Não conhecemos nenhuma prova alternativa desses resultados que tenha sido feita diretamente na representação das cargas. Os próprios autores dessas provas comentam [24]:

If one attempts to obtain such results (estimativas de correlação) *directly in the q representation the required estimates appear to be far more complicated.*

O leitor poderá ver no **Capítulo 3** como pudemos obter limites superiores para a função de correlação de um gás de dipolos de orientação discreta que não se sobrepõem, sem usar a representação de *sine*-Gordon. Fizemos isso primeiramente para o caso mais simples de um gás de dipolos de comprimentos iguais, e depois generalizamos para o caso em os dipolos possuem dois comprimentos diferentes. Conseguimos escrever uma expansão de cluster para a função de correlação fácil de trabalhar. Os termos mais difíceis são postos numa forma conveniente para derivar o resultado que desejamos. Pelas perspectivas que abre de poder ser empregado para sistema que não possuem uma transformação de *sine*-Gordon disponível, achamos que esse método é a principal contribuição da tese. Provamos então:

Teorema 1. A função de correlação de um gás de dipolos com caroço duro é limitada superiormente por

$$G(x,y) \leq C_\beta e^{-m \log|x-y|}$$

com $C_\beta < \infty$ e

$$m = \frac{\beta}{2\pi}(1 + (1+\epsilon)\beta z e^{-\beta/16})^{-1}$$

para qualquer $\epsilon > 0$, onde β é a temperatura inversa, e z é a atividade. Estimativa semelhante vale para dipolos de comprimentos diferentes.
Convém citar que uma *representação das cargas* associada com modelos de percolação foi usada em [34].
Como tratamos somente de dipolos no capítulo anterior, achamos por bem apresentar o método já bem conhecido de obtenção de limites superiores para a função de correlação usando a representação de *sine*-Gordon. Isso é feito no **Capítulo 4**, para o gás de Villain. Procuramos simplificar ao máximo a prova, sem nos preocupar com a otimização das estimativas. Convém lembrar, no entanto, que todos os elementos dessa prova – que é muito mais elaborada do que para os dipolos – já estão contidos no tratamento dos dipolos (comprimentos diferentes) do capítulo anterior. Esperamos que o uso combinado desses dois capítulos – ainda que empregando métodos diferentes – possa levar a um entendimento dos detalhes mais difíceis da transição de Kosterlitz-Thouless.

No **Capítulo 5** estudamos os rotores quânticos (0.1). Definimos nosso modelo de rotores de modo bem geral e empregamos a fórmula de Trotter para obter a função de partição do modelo clássico bidimensional no qual os rotores foram mapeados. O mapeamento levou a

$$\mathcal{Z} = \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{x,t} v_I(\theta(x,t) - \theta(x,t+1))\, v_J(\theta(x,t) - \theta(x+1,t))\, d\theta(x,t)$$

com

$$v_I(\theta(x,t) - \theta(x,t+1)) = \sum_{m_0} \exp\{-\frac{In}{2\beta}[\theta(x,t) - \theta(x,t+\frac{\beta}{n}) + 2\pi m_0(x,t)]^2\}$$

e

$$v_J(\theta(x,t) - \theta(x+1,t)) = \exp\{-\frac{\beta J}{n}\cos(\theta(x,t) - \theta(x+1,t))\} \qquad (0.2)$$

Nessa representação deduzimos uma estimativa de McBryan-Spencer para a função de correlação dos rotores quânticos na chamada aproximação de Villain para o potencial da forma co-seno dada acima. Tal aproximação

consiste em substituir o potencial em (0.2) por uma gaussiana periodizada. Assim, em vez do co-seno, a nova interação é dada por

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-(z/2)(\theta_i-\theta_j+2\pi m)^2}$$

A estimativa de McBryan-Spencer é uma garantia da não exisyência de transição de primeira ordem, embora nada se possa afirmar acerca de transições de ordens mais altas.
Temos

Teorema 2. Seja $G(y-y', s-s')$ a função de correlação entre dois sítios (y,s), (y',s') na rede bidimensional no limite termodinâmico de $\beta, n \to \infty$. Temos a seguinte estimativa

$$G(y-y', s-s') \leq e^{-\sqrt{\frac{IJ}{\pi^2}} \ln \sqrt{(y-y')^2+(J/I)(s-s')^2}}$$

No **Capítulo 6**, escrevemos a função de partição do sistema na representação de *sine*-Gordon. Isso é feito por meio de uma transformação de dualidade – que é o efetuar a transformada de Fourier na variável θ do integrando da função de partição obtida acima.
Nessa representação a função de partição dos rotores se escreve

$$Z_\Lambda = \int \prod_{x,t} (1 + 2 \sum_{q(x,t)\in Z} \cos 2\pi\phi(x,t) q(x,t)) d\mu_n(\phi) \tag{0.3}$$

onde

$$d\mu_n(\phi) = e^{-\frac{1}{2n}\sum_{x,t}[(\phi(x,t)-\phi(x+1,t))^2+n^2(\phi(x,t)-\phi(x,t+1/n))^2]}$$

é a gaussiana discreta.
A partir daqui, a prova da transição de Kosterlitz-Thouless seguiria – em princípio – pelas expansões de multi-escala do gás obtido como foi feito para o gás de Coulomb em [30].

Como dissemos, temos encontrado dificuldades técnicas para a realização desse programa. No final do *Capítulo 6* tecemos comentários sobre o método de construção de blocos e extração da auto-energia desses blocos com o qual

se reprime a atividade do gás e se obtém estimativas válidas quando a atividade é pequena. Em nossa rede de espaçamentos desiguais, no limite do contínuo do espaçamento em uma única direção , o balanço entre agrupamento de blocos e extração da auto-energia mostra-se desfavorável a que façamos a atividade pequena e impede a obtenção de estimativas de correlação .

Da representação de *sine*-Gordon, passamos à representação das cargas, e aí estabelecemos um limite inferior para a função de correlação entre cargas externas do gás de Villain resultante:

Teorema 3. Seja a função de correlação de cargas externas

$$\mathcal{Z}^{\xi}(x) = \mathcal{Z}^{-1} \int e^{-(1/2)(q_\Lambda + \rho(y,t), -\Delta^{-1}(q_\Lambda + \rho(y,t)))} \prod_{y,t} d\lambda q(y,t)$$

onde $\mathcal{Z}$ é a função de partição na ausência de cargas externas, e ρ_{ax} é a distribuição das cargas externas fracionárias colocadas no sistema, uma $+\xi$, situada na origem, outra, $-\xi$, situada em x. Temos

$$G^{\xi}_{\Lambda}(x) \geq C_{\xi} e^{-\xi^2 \sqrt{\frac{\ln 4}{\pi^2}} \ln |x|}$$

com $0 < C_{\xi} < \infty$.

No **Apêndice A** mostramos como a desigualdade eletrostática, que é um instrumento básico de aplicação nos capítulos **3,4** e **6**, como um exercício simples de completar quadrados no peso de Gibbs da medida do gás.

No **Apêndice B** achamos por bem derivar explicitamente o comportamento assintótico da função de Green do gás bidimensional obtido pelo mapeamento dos rotores, já que nossos resultados (**Teoremas 2,3**) se baseiam na diferença $C(x,t) - C(0,0)$. Partindo da função de Green na rede finita com espaçamentos desiguais, mostramos como obter sua expressão no limite de volume infinito, espaçamento zero em uma direção , e posterior limite termodinâmico de temperatura zero.

Capítulo 1

Introdução à Transição de Kosterlitz-Thouless

As transições de fase mais familiares são as transições entre gelo e água e água e vapor. Essas transições envolvem uma reestruturação microscópica da substância ao passar de uma fase à outra, e são chamadas transições de primeira ordem. No diagrama de fase de um líquido simples – por exemplo, no plano *pressão* × *temperatura*, como na figura acima – as linhas separaram os diferentes estados em que o líquido pode se apresentar. Cada linha, por sua vez, indica regiões de coexistência de fases. As fases sólida e gasosa estão em equilíbrio ao longo da curva de *sublimação* ; a curva de *fusão* é a de equilíbrio entre as fases sólida e líquida; as fases líquida e gasosa estão em equilíbrio ao longo da curva de *pressão de vapor*. Essa última curva, em particular, termina em um ponto chamado *ponto crítico*, no qual o líquido pode ser convertido em gás continuamente.

As transições de primeira ordem ocorrem quando cruzamos as linhas de uma região à outra, ou de um estado a outro. Se observarmos o comportamento de uma grandeza do sistema – por exemplo a densidade – notaremos que seu valor dá um salto quando cruzamos as linhas que distinguem as fases.

Em contraste, há transições na qual, ao cruzarmos as linhas de fase, a densidade (nosso exemplo de novo) permanece contínua. As grandezas que se alteram descontinuamente estão relacionadas com as derivadas primeiras de algum potencial termodinâmico, que serão descontínuas para valores de P e T na curva. Essas transições não são de primeira ordem. Vamos chamar toda transição que não for de primeira ordem de transição de segunda ordem.

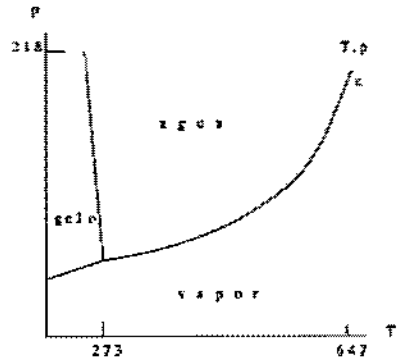

Figura 1.1: Diagrama de fase da água no plano pT mostrando o ponto crítico em c

A idéia fundamental no estudo de transições de fase é a de que a transição pode ser descrita por um parâmetro de ordem. Já no âmbito das transições de primeira ordem, é possível introduzir um parâmetro de ordem associado com um grupo de simetria, seja ele finito, discreto ou contínuo. O parâmetro de ordem é uma medida do tipo de ordem existente nas vizinhanças de um ponto crítico. Por exemplo,
(i) num cristal ferromagnético, com um eixo de magnetização ao longo da direção z, um parâmetro de ordem conveniente é a média estatística da componente z da magnetização em determinado ponto da rede. O vetor magnetização não tem módulo determinado quando o campo aplicado é nulo, podendo com isso apontar em direções diferentes. Essas escolhas de orientação não são mais possíveis, porém, quando a temperatura é maior que uma temperatura crítica,chamada temperatura de Curie;
(ii) no modelo de Ising, como parâmetro conveniente considera-se o valor esperado da interação *spin-spin* $\langle\sigma_i\sigma_j\rangle$ entre *spins* situados em i e j. Essas correlações de longo alcance entre *spins* estão associadas com a ordem de longo alcance na qual a rede possui magnetização , mesmo na ausência de um campo magnético. Tais transições *magnéticas* são análogas à transição líquido-gás;
(iii) na transição líquido-gás, o parâmetro de ordem é dado pela diferença $\rho_L - \rho_G$ entre as densidades das fases coexistentes, ou seja, no estado líquido e gasoso. Aqui também há uma oscilação do valores da densidade quando a temperatura está abaixo da temperatura crítica. Tomando como exemplo

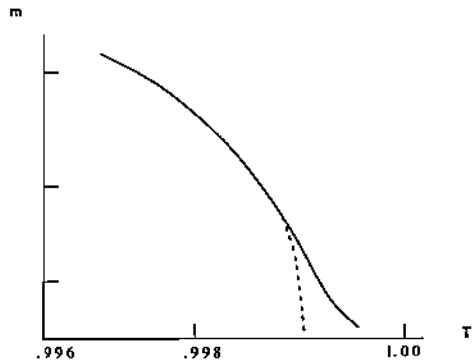

Figura 1.2: Diagrama do comportamento dos parâmetros de ordem em função da temperatura

a água, a $T = 376K$, $p = 1$ atm, a densidade não tem valor fixo, mas há uma escolha entre um valor mais alto, correspondente a densidade do estado líquido, e um valor mais baixo, correspondente ao vapor. Acima do ponto crítico, não há mais escolhas.
Nos exemplos (ii) e (iii) o gráfico que ilustra a relação entre o parâmetro de ordem e a temperatura é uma função decrescente de T que se anula em T_c. O ponto T_c é o ponto final de uma linha de transições de primeira ordem. Em duas dimensões, próximo de T_c o comportamento das variáveis (magnetização /densidade) com T é de lei de potência

$$|M| \approx (T_c - T)^{1/8}$$

$$\rho_L - \rho_G \approx (T_c - T)^{1/3}$$

para $T \leq T_c$.
A existência de um quantidade que é diferente de *zero* abaixo de uma temperatura crítica, e é *zero* acima dela é uma característica comum associada aos pontos críticos de grande quantidade de sistema físicos.
Que transições de fase são manifestações da interação entre partículas pode ser bem compreendida pela análise novamente do modelo de Ising, que, como vimos, apresenta transição do tipo ordem-desordem. No caso unidimensional, as energias de excitação para levar o sistema de um estado ordenado para um de estados não ordenados são de ordem de grandeza muito menor do que a entropia correspondente, impossibilitando que o sistema se estabilize em qualquer dos estados possíveis. Já em duas e três dimensões, a diferença

de energia entre o estado ordenado e um estado desordenado qualquer tem a mesma ordem de grandeza da entropia – ambos cresce com o volume do sistema –, possibilitando então a estabilização do estado ordenado [1].
Como transições de fase são fenômenos de sistemas de volumes infinitos, para considerar todos os infinitos graus de liberdade de tais sistemas no ponto crítico, usamos o procedimento do grupo de renormalização . Por esse procedimento, imaginamos que a rede está dividida em blocos ou células. Se as interações entre os blocos fossem nulas, não haveria correlação a grandes distâncias (maior do que a dimensão típica de um bloco) entre os blocos. Como essa são as correlações que produzem divergência nas derivadas de funções termodinâmicas, concluímos que as interações importantes para o fenômeno de transição de fase são aquelas entre blocos. O método que leva em consideração flutuações em grandes comprimentos de escala é conhecido como *Teoria do Grupo de Renormalização* [1]. O primeiro conceito de *RG* é o explicado acima de retirar uma fração finita dos graus de liberdade do sistema, efetuando a média sobre eles. O segundo conceito é o de obtenção de leis de recorrência com as quais se determina a dependência do comportamento das grandezas físicas (funções de partição) com as escalas dos blocos.

1.1 Transições de Segunda Ordem

A questão primeira no estudo de sistemas de *spins*, em uma rede cúbica com interações quadráticas de curto alcance entre vizinhos mais próximos, é a de se determinar se tais sistemas têm ordem de longo alcance em baixas temperaturas no limite termodinâmico. Como vimos, estas são as transições de primeira ordem no campo magnético.
Entre os modelos do tipo de Heisenberg (i) os modelos clássicos, isotrópicos e anisotrópicos, ferromagnéticos e antiferromagéticos, em dimensão $\nu \geq 3$ têm transição de primeira ordem [13]; (ii) o modelo quântico isotrópico antiferromagnético também exibe transição de fase em dimensão $\nu \geq 3$ para *spins* $S \geq 1$ [16]; quanto ao modelo quântico ferromagnético, nada se sabe; (iii) os modelos clássicos, ferromagnéticos e antiferromagnéticos, em $\nu = 2$ dimensões, têm transição de primeira ordem para todas as anisotropias [18]; (iv) o modelo quântico antiferromagnético de Heisenberg com anisotropia arbitrária apresenta ordem de longo alcance quando o módulo do valor do

[1] Esse método foi originalmente elaborado para estudar transições de segunda ordem

spin, dependente da anisotropia, é suficientemente grande [17]; (v) o modelo de Ising em $\nu = 2$ dimensões tem estados de equilíbrio com ordem de longo alcance em baixas temperaturas (o modelo isotrópico de Heisenberg – ferromagnético ou antiferromagnético –, incluindo o rotor, não tem).
Em 1966 Mermin e Wagner [4] provaram que o modelo isotrópico de Heisenberg em duas dimensões com interações de curto alcance não pode ser ferromagnético nem antiferromagnético, ou seja, não há magnetização espontânea. Stanley e Kaplan [5] apresentaram evidência numérica, baseada em expansões de altas temperaturas da susceptibilidade, indicando a existência de uma transição de fase no modelo isotrópico de Heisenberg em duas dimensões, com interações ferromagnéticas de vizinhos mais próximos, não acompanhadas por ordem de longo alcance. Esse resultado questionava, de um lado, o anulamento da magnetização espontânea – como previsto pelo argumento de ondas de *spins* – e, de outro lado, a implicação de que a ausência de ordem de longo alcance seria uma consequência do anulamento da magnetização espontânea.
Parâmetros de ordem nunca se anulam abaixo de T_c, embora possam se anular acima de T_c. Como o parâmetro de ordem pode tender a zero continuamente quando $T \to T_c$ por baixo, essa continuidade garante que a transição não seja de primeira ordem [8]. Notamos aqui que quando a transição envolve uma quebra de simetria, o parâmetro de ordem fica bem definido. Por isso podemos também dizer que o parâmetro de ordem denota uma variável de flutuação cujo valor médio é uma medida da ordem ou simetria quebrada no sistema.

1.2 A Transição de Kosterlitz-Thouless

Tendo em vista os conceitos acima, parece já possível entender a definição formal de transição de Kosterlitz-Thouless, conforme geralmente a encontramos.
A transição de Kosterlitz-Thouless ocorre em uma classe de sistemas bidimensionais, de uma fase de alta temperatura para uma fase de baixa temperatura, caracterizada por o decaimento da correlação obedecer a uma lei de potência. Não há ordem convencional em ambas as fases, no sentido de que não há parâmetro de ordem local, mas a razão de decaimento muda de um

decaimento polinomial abaixo da temperatura crítica a um decaimento exponencial acima da temperatura crítica. Assim, é o comportamento distinto da correlação em alta e baixa temperaturas que distingue as duas fases.
Wegner [9] foi o primeiro a salientar a importância da função de correlação como forma de distinguir as duas fases de determinado modelo. Se um modelo sofre transição de fase sem apresentar magnetização espontânea, é necessário encontrar um parâmetro do problema que reconheça suas diferentes fases. A função de correlação funciona como tal parâmetro.
Os sistemas bidimensionais que nos interessam mais de perto quando discutimos a transição de Kosterlitz-Thouless são gases de partículas carregadas. A função de correlação , nesse caso, se relaciona com a interação das cargas do gás com cargas externas inseridas no sistema.
Para esse modelos, o fenômeno físico que gera o comportamento distintivo da função de correlação está relacionado com uma mudança da forma de agrupamento das cargas no gás. Em certo caso limite do gás, quando a temperatura for suficientemente pequena, todas as partículas estarão agrupadas aos pares. Em um estreito intervalo de temperatura, a partir de uma temperatura crítica, ocorre um processo no qual as cargas, que formavam pares neutros, se desemparelham, e uma transião de fase termodinâmica acontece – a transição de Kosterlitz-Thouless –, a qual tem início naquela temperatura crítica do gás. Essa transição foi primeiramente observada por Berezinski, e Kosterlitz e Thouless [11], em sistemas do tipo X-Y nos quais a ordem de longo alcance é destruída por vórtices.
Kosterlitz-Thouless [11] explicaram o mecanismo desse tipo de transição de fase. Eles mostraram que em variáveis angulares, o espaço de configurações pode ser visto como uma superposição de duas configurações independentes $\theta = \theta_{sw} + \theta_c$. Correspondentemente, duas contribuições à função de partição têm de ser levadas em conta: uma são as excitações de ondas de *spin*, que são campos sem massa. Apenas essas excitações não são capazes de gerar uma transição de fase porque estão relacionadas com a energia cinética, e são responsáveis por destruir a ordem de longo alcance convencional. Outra contribuição são as excitações de vórtices que interagem como cargas através de um potencial bidimensional, e desordenam a função de correlação de *spin-spin*. A representação 'vórtice-ondas de *spin*' de sistemas bidimensionais aparece porque as variáveis na rede são ângulos. A periodicidade nessa variável angular dá origem a configurações singulares de *spins* que destroem a ordem da função de correlação a altas temperaturas. Em três dimensões

a representação análoga derivada da teoria de *gauge* na rede é uma representação de 'monopolo-fóton'; em quatro dimensões a representação é a de 'corrente de monopolo-fóton' [14].

1.3 A Transição em Gases de Coulomb

Frohlich e Spencer [25] foram capazes de provar a existência da transição de Kosterlitz-Thouless para vários sistemas bidimensionais na rede, como o gás de Coulomb, o rotor plano, o gás de Villain, o gás de esferas rígidas (hard core), e os modelos Z_N, $(N \gg 1)$. Todos esses sistemas podem ser expressos, por uma tranformação de dualidade, como gases de partículas interagentes através de forças de Coulomb.

Kadanoff [3] foi o primeiro a mostrar que muitos problemas em Mecânica Estatística podiam ser reescritos como problemas de gás de Coulomb. Essa associação é possível, a despeito da natureza de longo alcance do potencial coulombiano, por causa da ocorrência de blindagem (*screening*).

Blindagem é um fenômeno da região de altas temperaturas de sistemas globalmente neutros que causa uma cancelamento do carácter de longo alcance da força, deixando um potencial efetivo que decai exponencialmente agindo entre grupos de partículas. A força entre a maioria dos pares de partículas distantes é quase inteiramente cancelada pelas forças das partículas restantes na configuração mais provável.

Nesses termos, podemos dizer que a fase de Kosterlitz-Thouless é caracterizada pela existência de uma temperatura crítica β_c, tal que, para $\beta < \beta_c$, o sistema apresenta blindagem de Debye das cargas externas fracionárias, e, para $\beta > \beta_c$, nenhuma blindagem ocorre.

Se observarmos o diagrama de fase de estados de equilíbrio de um gás de Coulomb – vamos exemplificar com o diagrama do gás de caroço duro –, cujos parâmetros relevantes são a atividade z do gás e a temperatura inversa β, notamos que a região delimitada por $(\beta, z) = (0, 0)$ e $(\beta, z) = (\infty, e^{\epsilon\beta})$, $\epsilon < 1/16$, apresenta dois comportamentos diferentes para o gás. Para altas temperaturas e baixas densidades – o domínio de Debye-Huckel – a correlação truncada decai exponencialmente

$$G^T_\beta(x, \xi) \leq O(\exp(-m(\beta)|x|)) \qquad m(\beta) > 0,$$

uniformemente no volume para todo $\xi \in (0,1)$. Para essa fase plasmática do gás de Coulomb esse resultado foi provado por Brydges e Federbush [21] e Yang [29].
Quando β cresce, uma fase dipolar aparece. Essa é a região da fase de Kosterlitz-Thouless para a qual a correlação $G_\beta(x,\xi)$ satisfaz

$$a(1+|x|)^{-\beta\xi} \leq G_\beta(x,\xi) \leq b(1+|x|)^{-c}$$

para constantes a, b e $c > 0$.
Há ainda um terceiro domínio, o de baixas temperaturas para $z > e^{\epsilon\beta}$, caracterizado pela existência de pelo menos dois estados ordenados nos quais as cargas do gás se dispõem em formação cristalina análoga a estrutura do NaCl [22].
O gás de Coulomb na rede em duas dimensões não sofre blindagem se a temperatura e a densidade são suficientemente pequenas. Frohlich e Spencer predisseram, por argumentos de entropia-energia, que, para $\beta > 8\pi$, o gás se comportaria como um gás diluído de dipolos em que grandes dipolos seriam improváveis. A função de correlação entre duas cargas fracionárias opostas teria decaimento polinomial. Esse resultado foi provado por Marchetti e Klein[32] usando o mesmo argumento de energia-entropia numa forma conveniente à prova rigorosa da transição em temperatura inversa $\beta \geq 8\pi$.
Conforme a temperatura aumenta, deixa de fazer sentido o pensar as cargas como estando ligadas aos pares para a formação de dipolos, e tem-se de tratar com um número igual de partículas livres de sinais opostos que não sofreram blindagem.
Resultados semelhantes aos citados acima para sistemas na rede valem para o caso contínuo. Em particular, para o gás de Coulomb no contínuo, citamos a referência [31].

Capítulo 2

Revisão do Gás de Coulomb e Alguns Resultados

Como mencionamos no primeiro capítulo, gases de Coulomb na rede em duas dimensões exibem a transição de fase de Kosterlitz–Thouless, a qual é caracterizada pela existência de uma temperatura crítica, β_c, tal que, para $\beta < \beta_c$, a correlação truncada decai exponencialmente, e, para $\beta > \beta_c$, a correlação decai polinomialmente.
Neste capítulo fazemos uma revisão de sistemas coulombianos que exibem a transição de fase de Kosterlitz–Thouless. Damos definições e citamos alguns resultados para funções de correlação . O resultado principal – prova de limite inferior para o operador de desordem – aparece no *Capítulo 4* para o gás de Villain. A razão da escolha desse gás é que nosso sistema quântico de rotores será mapeado em um gás de Villain, para o qual a prova deve valer, ainda no caso em que o espaçamento de rede em uma direção seja contínuo. O limite inferior para a função de correlação – que, juntamente com a estimativa para o operador de desordem mencionada acima, completa a prova da transição de Kosterlitz–Thouless para o gás de Villain – será derivado no *Capítulo 6* para o gás obtido do mapeamento do rotores.

2.1 Gases de Coulomb

Consideramos um sistema de partículas clássicas com cargas elétricas inteiras interagindo através de um potencial coulombiano de cargas estáticas em

alguma região finita $\Lambda \subset \mathbf{Z}^2$. A cada sítio $x \in \Lambda$ associamos uma carga elétrica total $q(x)$ concentrada em x.
Uma configuração do sistema é dada pela função

$$q_\Lambda : \Lambda \to Z, x \in \Lambda \to q(x) \in Z.$$

A energia eletrostática de uma configuração q_Λ é

$$E(q_\Lambda) = \frac{1}{2} \sum_{x,y \epsilon \Lambda} q(x)q(y)C(x,y)$$

$$\equiv \frac{1}{2}(q_\Lambda, (-\Delta)^{-1} q_\Lambda),$$

$C(x,y)$ é a função de Green do laplaciano de diferença finita Δ com condições de contorno de Dirichilet em Λ.
Vamos nos restringir a configurações neutras únicas cujas energias permanecem finitas quando $\Lambda \uparrow \mathbf{Z}^2$.
O fator de Boltzmann de uma configuração q_Λ é

$$e^{-\beta E(q_\Lambda)}, \qquad \beta = 1/T,$$

e o peso *a priori*

$$\prod_{x \epsilon \Lambda} \lambda(q(x))$$

cujas medidas satisfazem, para cada $q \in \mathbf{Z}$, as propriedade de uma distribuição chamada típica:
a) $\lambda(q) = \lambda(-q)$;
b) $|\lambda(q)| \leq e^{vq^2}$, para algum v.
O estado de equilíbrio do sistema é definido pela medida de Gibbs

$$d\mu_\Lambda(q_\Lambda) = Z_\Lambda^{-1} e^{-\beta E(q_\Lambda)} \prod_{x \epsilon \Lambda} \lambda(q(x))$$

onde

$$\mathcal{Z}_\Lambda = \sum_{q_\Lambda = \{q(x)\}_{x \in \Lambda}} e^{-\frac{\beta}{2}(q_\Lambda, (-\Delta)^{-1} q_\Lambda)} \prod_{x \in \Lambda} \lambda(q(x)).$$

é a função de partição .
Em duas dimensões a função de Green é dada por

$$C(x,y) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{4 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2}$$

Note que essa função é sempre positiva, mas não é finita em $(k_1, k_2) = (0,0)$. No entanto, impondo a condição de neutralidade[1] a função de Green fica bem definida em todo seu domínio. Isso pode ser visto da seguinte forma: decompomos a função de Green em duas partes

$$C(x,y) = C'(x,y) + C(0,0)$$

onde C' é finita no limite infravermelho

$$C'(x,y) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} - 1}{4 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2}$$

e

$$C(0,0) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \frac{1}{4 - 2\cos k_1 - 2\cos k_2}$$

Substituindo as expressões acima na função de partição obtemos explicitamente

$$\mathcal{Z}_\Lambda = \sum_{q_\Lambda = \{q(x)\}_{x\in\Lambda}} e^{-\frac{\beta}{2}C(0,0)(\sum_x q_\Lambda(x))^2} e^{-\frac{\beta}{2}(q_\Lambda,(-\Delta')^{-1}q_\Lambda)} \prod_{x\in\Lambda} \lambda(q(x)).$$

onde Δ' é o laplaciano para o qual a função de Green correspondente é C'. Dessa forma vemos que a exponencial seleciona automaticamente as configurações neutras ($\sum_x q_\Lambda(x) = 0$).
Os seguintes modelos especiais [27] podem ser tratados simultaneamente:

1) O gás de esferas rígidas

No gás de esferas rígidas, uma única partícula, independentemente de sua carga, pode ocupar um sítio da rede, de modo que a repulsão entre duas partículas posicionadas no sistema é infinita. A cada partícula da rede está associada uma atividade z, independentemente da carga. A função de distribuição das cargas *a priori* é dada por

$$d\lambda(q) = \delta_{q,0} + z(\delta_{q,1} + \delta_{q,-1})$$

onde δ é a função de Dirac.

2) O gás standard

[1] Densidade média de carga é zero

O *gás standard* é aquele em que qualquer número de partículas pode ser inserido em cada ponto x da rede. Cada partícula, independentemente de sua carga, tem associada a si uma atividade z e uma carga q. A função de distribuição das cargas *a priori* é dada por

$$\lambda(q) = \frac{I_q(2z)}{I_0(2z)} \text{ para } q = 0, \pm 1, \pm 2, ...,$$

onde z é a atividade que controla a densidade do sistema, I_q denota a função de Bessel modificada de ordem q, ou seja, o coeficiente q da transformada de Fourier de $\exp z \cos \phi$;

3) O gás de Villain

$$\lambda(q) = 1 \text{ para } q = 0, \pm 1, \pm 2, ... \tag{2.1}$$

2.2 A Representação de *sine-Gordon* do Gás de Coulomb

Na representação de *sine*-Gordon (ou Siegert), a função de partição do sistema coulombiano é escrita como uma média sobre um funcional de funções aleatórias gaussianas. A média é o funcional gerador de uma teoria de *sine*-Gordon. Essa representação é especialmente conveniente para descrever as propriedades do estado de equilíbrio como, por exemplo, a blindagem de Debye.

Seja $\phi : Z^\nu \to R$ o campo gaussiano em Z^ν com distribuição

$$d\mu_\beta(\phi) = N^{-1} \prod_j d\phi(j) \exp\left[\frac{1}{2\beta}(\phi, \Delta\phi)\right]$$

onde

$$(\phi, \Delta\phi) = -\sum_{|i-j|=1} (\phi(i) - \phi(j))^2$$

e

$$N = \det\left(-\frac{\Delta}{2\pi\beta}\right)^{-1/2}$$

é o fator de renormalização .

O funcional característico da medida gaussiana com média 0 e covariância

$\beta(-\Delta)^{-1}$ é dado por

$$\int e^{\imath(\phi,\rho)} d\mu_\beta(\phi) = e^{-\frac{\beta}{2}(\rho,(-\Delta)^{-1}\rho)} \tag{2.2}$$

A densidade $\rho(x)$ é a variável conjugada ao campo escalar ϕ em R^2 – é uma fonte –, e $\phi(\rho) = \sum \phi(x)\rho(x)$, com $\rho(x) = \sum_j q_j \delta(x - x_j)$.
A substituição da expressão (2.2) acima na função de partição fornece

$$\mathcal{Z} = \int d\mu_\beta(\phi) \sum_{q_\Lambda} e^{\imath\phi(q)} \prod_{x\in\Lambda} d\lambda(q(x))$$

Perfazendo a transformada de Fourier da medida de Gibbs com respeito às variáveis de carga $\{q(x)\}$ obtemos uma representação equivalente do gás de Coulomb como uma *sine-Gordon* da teoria quântica euclidiana de campos

$$Z_\Lambda = \int \prod_{x,t} \hat{\lambda}(\phi(x,t)) d\mu_\beta(\phi)$$

onde

$$\hat{\lambda}(\phi(x)) = \sum_{q_\Lambda} e^{\imath\phi(q)} \prod_{x\in\Lambda} d\lambda(q(x))$$

1) Para o gás de esferas rígidas

$$\hat{\lambda}_z(\phi) = 1 + z\cos\phi$$

2) Para o gás standard

$$\hat{\lambda}_z(\phi) = e^{z\cos\phi}$$

3) Para o gás de Villain (com $\zeta = 1$ em (2.1))

$$\hat{\lambda}_z(\phi) = \sum_n \delta(2\pi n - \phi)$$

onde usamos a fórmula de soma de Poisson:

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\phi - n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-\imath 2\pi k\phi}$$

para obter a transformada de Fourier da unidade.

2.3 A Função de Correlação

A função

$$\langle e^{i\phi(f)}\rangle_\Lambda(\beta,\lambda) = Z_\Lambda^{-1}\int e^{-\beta E(q_\Lambda+f)}\prod_{x\in\Lambda} d\lambda(q(x))$$

mede a correlação entre cargas externas $f(x)$, localizadas em sítios diferentes de Λ, que foram inseridas de fora no sistema. Assim, consideramos a distribuição de equilíbrio para uma situação em que uma carga fracionária ξ está fixada na origem, e verificamos o que ocorre quando outra carga de intensidade oposta àquela é inserida no sistema no ponto $x > 0$. A situação é descrita pela função de correlação de cargas externas, análoga à dada acima:

$$G_\Lambda^\xi(x) = \frac{Z_\Lambda^\xi(x)}{Z_\Lambda} \tag{2.3}$$

onde

$$Z_\Lambda^\xi(x) = \int e^{-E(q_\Lambda+\xi(\delta_0-\delta_x))}\prod_{j\in\Lambda} d\lambda(q(j))$$

e $f(j) = \xi(\delta_{j0} - \delta_{jx})$, onde $\xi : \Lambda \to \mathbf{R}$ é a distribuição de cargas externas. Como se sabe, o comportamento da função de correlação reflete as propriedades de blindagem do gás de Coulomb.
A função de correlação também pode ser escrita na representação de *sine*-Gordon como

$$G_\Lambda^\xi(x) = Z_\Lambda^{-1}\int d\mu_\beta(\phi)e^{i(\xi,\phi)}\prod_{x\in\Lambda}\hat{\lambda}(\phi(x))$$

Resultado 2.3.1 *(Frohlich-Spencer) Para o gás de Coulomb de esferas rígidas,*

$$G^\xi(0,x) < \text{const.}(1+|x|)^{-\delta(\beta,\xi)}$$

para algum $\delta(\beta,\xi) > 0$, para todo $\beta > \beta(\xi, z)$.

2.4 Limite Inferior da Função de Correlação

O primeiro passo para provar a existência da transição de Kosterlitz-Thouless consiste em encontrar um limite inferior para a função de correlação . Isso é feito por meio da desigualdade de Jensen aplicada à variável de carga. Como esse resultado é de mesma natureza daquele demonstrado para os rotores

quânticos no *Capítulo 6*, aqui apenas o citamos sem provas.
Temos que

$$G_\gamma(x) \geq |x|^{-\beta/2\pi}$$

para $z \leq e^{\epsilon\beta}$, $\beta > \beta_c$ para algum $\epsilon > 0$.
Se blindagem de Debye ocorre,

$$G^\xi_\Lambda(x) \to C > 0$$

exponencialmente rápido quando $|x| \to \infty$.

2.5 A Função de Partição de Cargas Externas

Na representação de *sine*-Gordon a função de partição na presença de cargas externas fica

$$\mathcal{Z}^\xi_\Lambda(x) = e^{-\frac{\beta}{2}\xi^2(\sigma_1,(-\Delta)\sigma_1)} \int d\mu_\beta(\phi) \sum_{q_\Lambda=\{q(x)\}_{x\in\Lambda}} e^{-\beta\xi(q_\Lambda,\sigma_1)} e^{i(\phi,q_\Lambda)} \prod_{j\in\Lambda} \lambda(q(j))$$

onde introduzimos

$$\sigma_1(j) = (-\Delta)^{-1}(\partial_1 f^x)(j)$$

e a função f^x é definida por

$$f^x(j_1,j_2) = \begin{cases} 1, & \text{if } 1 \leq j_1 \leq x, \quad j_2 = 0; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{2.4}$$

onde ∂_α $\alpha = 1,2$ é a derivada de diferença finita na direção α, definida por

$$(\partial_\alpha f)(j) = f(j+e_\alpha) - f(j) \tag{2.5}$$

onde $e_\alpha(\alpha = 1,2)$ é o vetor unitário na direção α.
Alternativamente

$$\mathcal{Z}^\xi_\Lambda(x) = e^{-\frac{\beta}{2}\xi^2(\sigma_1,(-\Delta)\sigma_1)} \int d\mu_\beta(\phi)\hat{\lambda}_x(\phi)$$

mas agora

$$\hat{\lambda}_x(\phi) = \sum_q e^{i\phi q + \beta\xi\sigma_1 q}\lambda(q)$$

2.6 O Operador de Desordem

Estabelecer um limite inferior para o valor esperado do operador de desordem [8] pode ser usado em substituição a calcular um limite superior – este mais difícil – para a função de correlação . Na representação do gás chamamos operador de desordem ao operador

$$\hat{D}^{\xi}_{0x}(q_\Lambda) = e^{i\xi(q,\sigma_2)-\frac{\xi^2}{2\beta}(\sigma_1,(-\Delta)^{-1}\sigma_1)}$$

onde

$$\sigma_2(j) = (-\Delta)^{-1}(\partial_2 f^x)(j) \tag{2.6}$$

para $\xi \in (0,1)$.
O valor esperado é então

$$\langle \hat{D}^{\xi}_{0x} \rangle = Z_\Lambda^{-1} \sum_{q_\Lambda} e^{-\beta E(q_\Lambda)} \hat{D}^{\xi}_{0x}(q_\Lambda) \prod_{x\in\Lambda} d\lambda(q(x))$$

Usando (2.2) podemos escrever, na representação de *sine*-Gordon,

$$\langle \hat{D}^{\xi}_{0x} \rangle = Z_\Lambda^{-1} e^{-\frac{\xi^2}{2\beta}(\sigma_1,(-\Delta)^{-1}\sigma_1)} \int \prod_{x\in\Lambda} \hat{\lambda}(\phi(x) + \xi\sigma_2(x)) d\mu_\beta(\phi) \tag{2.7}$$

Repare que

$$G(x) = e^{-\frac{\xi^2}{2\beta}(\sigma_1,(-\Delta)^{-1}\sigma_1)}$$

é a contribuição das ondas de spin ao valor esperado do operador de desordem.

Resultado 2.6.1 *(Fröhlich-Spencer) Se λ é o peso a priori da distribuição de um gás de Coulomb geral satisfazendo a condição de crescimento*

$$|\lambda(q)| \leq \text{const. } e^{(\alpha+\epsilon\beta)q^2}, \qquad \epsilon < 1/16,$$

então existe algum $\beta(\lambda)$ finito tal que para qualquer $\beta > \beta(\lambda)$

$$\langle \hat{D}^{\xi}_{0x} \rangle(\beta,\lambda) \geq \text{const. } e^{-\frac{\xi^2}{2\beta'}\ln(1+|x|)}$$

para algum $\xi \epsilon 2\pi Z$, para algum $\beta' = \beta'(\beta,\lambda) > 0$.

Resultado 2.6.2 *(Fröhlich-Spencer) Para o modelo de Villain, para cada* $0 < \xi < 1$ *existe algum* $\beta_0(\xi)$ *finito tal que para* $\beta > \beta_0(\xi)$

$$(D^{\xi}_{0x})(\beta) < \text{const.}(1 + |x|)^{-\xi^2\beta'}$$

para algum positivo $\beta' = \beta'(\beta, \xi) \to \infty$ *quando* $\beta \to \infty$. Por expansões de altas temperaturas

$$(D^{\xi}_{0x})(\beta) \geq \text{const.} > 0$$

uniformemente em $|x|$ quando β é suficientemente pequeno.

Capítulo 3

Estimativas de Correlação na Representação das Cargas

3.1 Introdução

Antes de prosseguir com os gases de Coulomb fazemos uma pausa para discutir a obtenção de estimativas de correlação em gases de dipolos. Há alguns motivos para isso. Em primeiro lugar, é interessante observar que apesar da interpretação correta fornecida por Kosterlitz e Thouless em 1973 da existência de uma transição de fase no estado fundamental do rotor plano – ou o modelo XY –, até 1981 nenhuma prova matemática havia dessa transição .

A técnica de prova da transição de Kosterlitz–Thouless, que visa a obter os comportamentos da função de correlação descritos no capítulo anterior, foi primeiramente desenvolvida e aplicada a gases de dipolos por Frohlich e Spencer [24].

Embora os próprios gases de dipolos não apresentem a transição de Kosterlitz–Thouless, eles constituem um ponto de partida natural para o estudo dessa transição em gases de Coulomb porque cargas em tais gases tendem a formar pares com cargas opostas, à semelhança de dipolos, em baixas temperaturas e pequenas atividades.

Aprimorada para poder ser aplicada a gases de Coulomb em geral, essa técnica permitiu a prova da existência da transição de Kosterlitz–Thouless para o gás de caroço duro, o gás de Villain, os rotores, os modelos Z_N.

O principal ingrediente da técnica consiste na aplicação da transformação de *sine*-Gordon, Eq. (2.2), à função de partição dos gases. É isso o que faremos no próximo capítulo para o gás de Villain.
Neste capítulo, porém, dispensamos a transformação de *sine*-Gordon, e trabalhamos diretamente na representação das cargas do gás de dipolos.
Como se sabe, diferentemente do comportamento da correlação em sistemas coulombianos, correlações de carga em gases de dipolos tem limite inferior e superior que decaem polinomialmente. O limite inferior é consequência da desigualdade de Jensen aplicada às variáveis de carga. Já vimos no *Capítulo 2* a que resultados essa desigualdade leva para a correlação de gases de Coulomb. Voltaremos a aplicá-la aos rotores quânticos no *Capítulo 6*, depois de mapeá-los em um sistema clássico bidimensional.
É da obtenção do limite superior para a função de correlação que tratamos aqui. Esperamos que os pormenores da prova que daremos no próximo capítulo para o gás de Villain possam ser mais facilmente entendidos a partir da análise do gás de dipolos.
É um resultado bem conhecido da teoria de campo médio que a correlação dipolar é proporcional à energia de interação de um par de dipolos, com fator de proporcionalidade dado pelo inverso da constante dielétrica $d(z,\beta)$. Esta, por sua vez, é dada pela série

$$d = 1 + \sum_{m+n>0} a_{mn} z^n \beta^m,$$

onde z é a atividade, e β a temperatura inversa.
Os coeficientes a_{mn} são derivados por teoria de perturbação . Nosso resultado fornece o termo de primeira ordem em $z\beta$, com $a_{11} = (1+\epsilon)$, para qualquer $\epsilon > 0$.
Primeiramente consideramos o mais simples gás de dipolos de comprimento fixo, com orientação discreta, que não se sobrepõem. Em seguida generalizamos para dipolos de dois comprimentos diferentes. Vamos sempre supor que as cargas externas interagentes com o gás estarão bem afastadas da região onde os dipolos se encontram. Tais simplificações visam a reduzir o método de obtenção de estimativas para a correlação ao essencial da translação de cargas, e enfatizar a utilização direta da expansão de cluster na representação das cargas.
Deixaremos para o próximo capítulo, o problema completo da transição de Kosterlitz–Thouless em gases de Coulomb, mas lá estaremos de volta à re-

presentação de *sine*-Gordon.

3.2 A Função de Partição de Gases de Dipolos

Um dipolo de rede é um par de cargas elétricas de mesma intensidade mas sinais opostos situadas em sítios vizinhos da rede.
Consideramos um gás de dipolos com orientação discreta em uma região quadrada finita Λ. Seja $L = 4r\mathbb{Z}^2$ uma sub-rede de Λ de espaçamento 4r, contida em uma caixa $\hat{\Lambda}$ dentro de Λ e concêntrica com ela.
Uma configuração dos dipolos é descrita pela função $\vec{\mu}_L = \{\vec{\mu}(j)\}$, onde $\vec{\mu}(j) = (\mu_1(j), \mu_2(j))$ é o momento de dipolo total no sítio $j \in L$ da rede.
A função de partição é dada por

$$\mathcal{Z} = \sum_{\vec{\mu}_L = \{\vec{\mu}(j) j \in L\}} e^{-\frac{\beta}{2} E(\vec{\mu}_L)} \prod_{j \in L} d\lambda(\vec{\mu}(j)). \tag{3.1}$$

onde

$$E(\vec{\mu}_L) = \sum_{j,k} \sum_{\alpha,\gamma} \mu_\alpha(j) \mu_\gamma(k) W_{\alpha\gamma}(j,k) \tag{3.2}$$

O potencial dipolar é dado por

$$W_{\alpha\gamma}(j,k) = \partial_\alpha \partial_\gamma C(j,k) \tag{3.3}$$

onde ∂_α foi definida em (2.5).
Vamos nos restringir à classe de gases de dipolos coulombianos com caroço duro para o qual $C(j,k)$ é a função de Green de um potencial de Coulomb na rede bidimensional, dado pela solução fundamental da equação de Laplace na rede:

$$C(j) = (-\Delta)^{-1}(j) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} d^2\zeta \frac{e^{i\zeta \cdot j}}{2 \sum_\alpha (1 - \cos \zeta_\alpha)} \tag{3.4}$$

O peso *a priori* da distribuição é dado por

$$\lambda(\vec{\mu}) = \delta(\vec{\mu}) + z\delta(|\vec{\mu}|^2 - 1)$$

onde z é a atividade ou fugacidade.
Não haverá sobreposição de dipolos se seu comprimento for fixo e igual a r. Por simplicidade tomaremos $r = 1$.
A correlação de duas cargas externas colocadas no sistema, uma em $+\xi$, situada em x, outra $-\xi$ em y, é dada por (2.3)

$$G(x,y) = \frac{Z_L^{\xi}(x,y)}{Z_L} \tag{3.5}$$

onde a função de partição na presença dessas cargas externas é

$$Z^{\xi}(x,y) = \sum_{\vec{\mu}_L = \{\vec{\mu}(j) j \in L\}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\vec{\mu}_L + \xi)} \prod_{j \in L} \lambda(\vec{\mu}(j)), \tag{3.6}$$

com $\xi = \xi(\delta(j-x) - \delta(j-y))$.
Vamos sempre supor que x e y não pertençam a Λ.

3.3 A Desigualdade Eletrostática

O primeiro passo para encontrar um limite superior para a função de correlação consiste em reprimir a atividade dos dipolos, de modo a obter estimativas válidas para valores pequenos de z. Isso é feito pela desigualdade eletrostática *(Apêndice A)*. Para aplicá-la, é mais conveniente efetuar a soma sobre os momentos de dipolo em (3.1), o que dá

$$Z = \sum_{\{\mu_1(j), \mu_2(j), j \in L\}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\vec{\mu}_L)} \prod_{j,\alpha} z_\alpha(j)$$

onde $z_\alpha(j) = z(j)^{|\mu_\alpha(j)|}$.
Se definirmos a densidade de carga do gás de dipolos por

$$\rho(j) = \sum_\alpha \delta_\alpha \mu_\alpha(j)$$

onde e_α $(\alpha = 1, 2)$ é o vetor unitário de rede na direção α, a energia eletrostática pode ser escrita como

$$E(\vec{\mu}_L) = E(\rho) = (\rho, -\Delta^{-1}\rho)$$

Substituimos a densidade de carga ρ, cujo suporte esta em $\hat{\Lambda}$, por uma densidade de carga $\bar{\rho}$, cujo suporte situa-se em Λ, de tal modo que a energia de interação entre as duas densidades de carga renormalizadas não se altere, mas a auto-energia de $\bar{\rho}$ seja menor do que a auto-energia de ρ. Usamos a diferença entre as auto-energias para renormalizar as atividades.
A densidade de carga renormalizada é dada por

$$\bar{\rho} = \rho + \frac{\Delta\rho}{||\Delta||} \tag{3.7}$$

com o propósito de renormalizar a atividade dos dipolos, escrevemos [22]

$$\bar{\mathcal{Z}} = \sum_{\bar{\rho}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar{\rho})} e^{-\frac{\beta}{2}(E(\rho)-E(\bar{\rho}))} \prod_{j,\alpha} z_\alpha(j) \tag{3.8}$$

A diferença em auto-energia é calculada como segue:

$$\begin{aligned} E(\rho) - E(\bar{\rho}) &= \frac{2}{||\Delta||}(\rho,\rho) - \frac{1}{||\Delta||^2}(\rho,-\Delta\rho) \\ &\geq \frac{1}{||\Delta||}(\rho,\rho) \end{aligned}$$

Obtemos

$$\bar{\mathcal{Z}} = \sum_{\bar{\rho}} e^{-\frac{\beta}{2}(\bar{\rho},-\Delta^{-1}\bar{\rho})} \prod_{j,\alpha} \bar{z}_\alpha(j) \tag{3.9}$$

com a estimativa

$$\bar{z}_\alpha(j) \leq z_\alpha(j) \exp\{-\frac{\beta}{2||\Delta||}\rho^2(j)\} \tag{3.10}$$

Como as atividades têm todas o mesmo valor, as atividades renormalizadas podem ser limitadas por (fazendo $||\Delta|| = 8$)

$$\bar{z}_\alpha(j) \leq \bar{z} = z \exp\{-\frac{\beta}{16}\}, \tag{3.11}$$

a qual pode ser feita arbitrariamente pequena para β suficientemente grande.

3.4 As Cargas Externas

Aplicamos o raciocínio acima à função de partição na presença de cargas externas, e obtemos

$$\mathcal{Z}^\xi(x,y) = \sum_{\bar{\rho}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar{\rho}+\xi)} \prod_{j,\alpha} \bar{z}_\alpha(j)$$

Nesse caso, no entanto, precisaremos renormalizar as cargas externas também. Isso é feito pela translação

$$\bar{\xi} = \xi + \frac{\gamma}{\beta}(\Delta a)(j)$$

onde γ depende de β de um modo ainda a ser determinado, e

$$a(j) = C(j,x) - C(j,y) \tag{3.12}$$

A função $a(j)$ satisfaz, para $|x-y|$ grande e para $|j-j'| = 1$, o seguinte

$$|a(j) - a(j')| \leq \text{const}\left|\frac{1}{|j-x+1|} + \frac{1}{|j-y+1|}\right. \tag{3.13}$$

$$|a(j) - a(j')| \leq \text{const}\frac{|x-y|}{|j|^2} \tag{3.14}$$

Essas estimativas podem ser deduzidas das propriedades correspondentes da função de Green para $|x-y|$ grande, como dado em [26].
Da definição do operador laplaciano e (3.12), temos também que

$$\sum_{|j-j'|=1} [a(j) - a(j')]^2 \leq (a, -\Delta a) = a(x) - a(y) \tag{3.15}$$

Para $|x-y|$ grande, o operador de covariância é bem aproximado pelo propagador contínuo sem massa em duas dimensões [2]. Assim

$$\begin{aligned} a(x) - a(y) &= 2[C(0,0) - C(x,y)] \\ &\approx \frac{1}{\pi}\log|x-y|. \end{aligned} \tag{3.16}$$

Depois da translação obtemos, da mesma maneira que em (3.8),

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}^{\xi}(x,y) &= e^{\frac{\gamma^2}{2\beta}(a,-\Delta a) - \gamma(a,\xi)} Z_1 \\ &= e^{(\frac{\gamma^2}{2\beta} - \gamma)(a,-\Delta a)} Z_1 \end{aligned} \tag{3.17}$$

onde usamos que $a(j) = [(-\Delta^{-1})\xi](j)$ de modo que $(a,\xi) = (a,-\Delta a)$, e

$$Z_1 = \sum_{\bar{p}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar{p}+\bar{\xi})} \prod_{j,\alpha} \bar{z}_\alpha(j) e^{\gamma_\alpha(j)} \tag{3.18}$$

com

$$\gamma_\alpha(j) = \gamma\mu_\alpha(j)\delta_\alpha\bar{a}(j). \tag{3.19}$$

e, como em (3.7),

$$\bar{a}(j) = a(j) + \frac{\Delta}{||\Delta||}a(j)$$

3.5 A Expansão de Cluster

Até aqui, vimos aplicando o método de translações reais para renormalizar as atividades de carga. Esse método é equivalente ao método das translações complexas introduzido em [24] usando a representação de *sine*-Gordon.
Agora precisamos de um novo procedimento para derivar um limite superior para a função de correlação . Começamos por expandir[1] $\prod_{j,\alpha} \exp\{\gamma_\alpha(j)\}$ em *cluster* [28]

$$\prod_{j,\alpha}[1 + (e^{\gamma_\alpha(j)} - 1)] = \prod_{\alpha}(1 + S_\alpha + P_\alpha) \tag{3.20}$$

onde

$$S_\alpha = \sum_{m_\alpha \geq 1} \sum_{j_1,\ldots,j_{m_\alpha}} D_\alpha(j_1). \ . \ .D_\alpha(j_{m_\alpha}) \tag{3.21}$$

com

$$D_\alpha(j_i) = \cosh \gamma_\alpha(j_i) - 1 \tag{3.22}$$

A soma (3.21) corre sobre todas as subsequências de $\{j_1, \ldots j_{m_\alpha}\}$, $m_\alpha \geq 1$.
Temos também que

$$P_\alpha = \sum_{\tau_\alpha}{}' \prod_{j} (\cosh \gamma_\alpha(j))^{\tau_\alpha(j)} (\sinh \gamma_\alpha(j))^{1-\tau_\alpha(j)} \tag{3.23}$$

onde $\tau_\alpha = \{\tau_\alpha(j) = 0, 1$ para todo $j\}$, e a soma é efetuada sobre todos os conjuntos de valores de τ_α não identicamente 1, visto que esse termo já aparece em S_α.
Fazendo a multiplicação sobre α em (3.20) e substituindo o resultado em Z_1, obtemos

$$Z_1 = \sum_{\vec{\sigma}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\vec{\sigma})} \prod_{j,\alpha} \bar{z}_\alpha(j)(1 + S + P + S_1P_2 + S_2P_1) \tag{3.24}$$

onde $S = S_1 + S_2 + S_1S_2$ e $P = P_1 + P_2 + P_1P_2$.
Nesse ponto convém levar a cabo explicitamente o cálculo dos termos envolvidos na expansão de cluster. Não é difícil ver que a soma de termos em (3.24) fornece

$$Z_1 = Z + \sum_{\vec{\sigma}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\vec{\sigma})} \prod_{j,\alpha} \bar{z}_\alpha(j)(S_1 + S_2 + S_1S_2 + R)$$

[1] Seremos demasiadamente gerais aqui. Isso se justifica, no entanto, porque queremos desenvolver um método, e também porque temos em mente a aplicação da expansão de cluster em situações mais complexas do que simples gases de dipolos.

onde Z é a função de partição dada em (3.9), e

$$R = \prod_{j,\alpha}(\cosh\gamma_\alpha(j) + \sinh\gamma_\alpha(j)) - \prod_{j,\alpha}(\cosh\gamma_\alpha(j)).$$

3.6 O Limite Superior

Temos a estimativa óbvia então

$$Z_1 \leq Z + \sum_{\bar\sigma} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar\sigma)} \prod_{j,\alpha} \bar z_\alpha(j)(S_1 + S_2 + S_1S_2) + \sum_{\bar\sigma} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar\sigma)} R_1 \tag{3.25}$$

onde

$$R_1 = \prod_{j,\alpha}(\bar z_\alpha(j)\cosh\gamma_\alpha(j) + \bar z_\alpha(j)\sinh\gamma_\alpha(j)) \tag{3.26}$$

A função $\gamma_\alpha(j)$ depende de $\delta_\alpha\bar a(j)$. Todavia, note que

$$\delta_\alpha\bar a(j) = \bar a(j) - a(j+e) = a(j) - a(j+e) \tag{3.27}$$

quando $j \neq x, y$, pois

$$\bar a(j) - a(j) = \frac{1}{||\Delta||}(\Delta a)(j) = 0 \tag{3.28}$$

para $j \neq x, y$.
De acordo com a definição (3.19) de γ_α e as estimativas (3.13),(3.14) para $|a(j) - a(j')|$, o argumento de $\cosh(\cdot)$ é pequeno para $|j-x| \gg \gamma$ and $|j-y| \gg \gamma$. Então podemos escrever

$$\cosh\gamma_\alpha(j) - 1 \leq \frac{1}{2}(1+\epsilon)\gamma^2[a(j) - a(j')]^2 \tag{3.29}$$

para algum $\epsilon > 0$.
Para $|j-x| \leq O(\gamma), |j-y| \leq O(\gamma)$, de novo por (3.19) e (3.13),(3.14), estimamos $\cosh(\cdot) - 1$ por uma constante dependente de γ.
Em ambos os casos, cada fator em (3.26) pode ser limitado pela unidade para z suficientemente pequeno, e consequentemente, $|R_1| \leq 1$. Além disso, podemos sempre fazer β tão grande que $\sum_{\bar\sigma}\exp -\frac{\beta}{2}E(\bar\sigma) < 1$. Nessas circunstâncias, podemos eliminar o último termo em (3.25):

$$Z_1 \leq K_\beta\left\{Z + \sum_{\bar\sigma} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar\sigma)} \prod_{j,\alpha} \bar z_\alpha(j)(S_1 + S_2 + S_1S_2)\right\} \tag{3.30}$$

para alguma constante K_β.
Podemos distribuir as atividades nos produtos de S_α. Isso dá

$$Z_1 \leq K_\beta \left\{ \mathcal{Z} + \sum_{\bar{\sigma}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar{\sigma})}(s_1 + s_2 + s_1 s_2) \right\} \tag{3.31}$$

onde $s = s_1 + s_2 + s_1 s_2$ e, como em (3.21),

$$s_\alpha = \sum_{m_\alpha \geq 1} \sum_{j_1, \ldots, j_{m_\alpha}} \bar{z}_\alpha(j_1) D_\alpha(j_1) \ldots \bar{z}_\alpha(j_{m_\alpha}) D_\alpha(j_{m_\alpha})$$

Vemos então que Z_1 admite o limite superior

$$Z_1 \leq K_\beta \mathcal{Z}(1 + s_1 + s_2 + s_1 s_2) \tag{3.32}$$

Aqui os termos s tomam seus valores máximos, os quais ocorrem quando $\mu_\alpha(j) = 1$ para todo j, α, e usamos que $\mathcal{Z} > 1$.
A equação (3.32) tem o mesmo padrão da equação (3.20) expandida, exceto que aqui inserimos as atividades em S. Se *re-somarmos* a expansão de *cluster* em sua forma original, vem

$$Z_1 \leq K_\beta \mathcal{Z} \prod_{j,\alpha} (1 + \bar{z}_\alpha(j) D_\alpha(j)) \tag{3.33}$$

com $\mu_\alpha(j) = 1$ para todo j, α.
Substituindo (3.33) em (3.17) e usando (3.11) e (3.15), obtemos

$$\mathcal{Z}^\xi(x, y) \leq K_\beta \, \mathcal{Z} \, e^{\{\frac{\gamma^2}{2\beta} + \frac{1}{2}(1+\epsilon)\bar{z}\gamma^2 - \gamma\}(a, -\Delta a)} \tag{3.34}$$

Finalmente, derivando o coeficiente

$$\frac{\gamma^2}{2\beta} + \frac{1}{2}(1+\epsilon)z\gamma^2 - \gamma$$

com relação a γ obtemos a escolha ótima de γ

$$\gamma = \beta(1 + (1+\epsilon)\bar{z}\beta))^{-1}$$

a qual fornece, usando (3.14) e (3.15),

$$G(x, y) \leq K_\beta e^{-\frac{\beta}{2\pi} \frac{1}{1+(1+\epsilon)\bar{z}\beta} \log|x-y|}$$

3.7 Dipolos de Comprimentos Diferentes

Para estudar o caso mais geral de dipolos que têm comprimentos diferentes, simulamos a situação em que há duas espécies de dipolos definindo o modelo em duas redes diferentes:

$$L_1 = d\mathbf{Z}^2 \cap \Lambda \quad \text{e} \quad L_2 = [dL\mathbf{Z}^2 + (\frac{d}{2}, 0)] \cap \Lambda.$$

Note que não haverá sobreposição se $d > 2L + 2$.
O limite superior para a função de correlação , nesse caso em que o gás possui dipolos de comprimento unitário, como antes, e comprimento L, é dado por

$$G(x, y) \leq C_\beta e^{-m \log |x-y|}$$

onde $C_\beta < \infty$ *e*

$$m = \frac{\beta}{8\pi}(1 + \beta \frac{\bar{z}_1 + \bar{z}_2}{d^2} \text{const.})^{-1}$$

onde x, y *são os sítios das cargas externas,* $\bar{z}_1, \bar{z}_2$ *as atividades efetivas.*
É melhor escrever a interação dipolar (3.2) na forma mais geral

$$V(n) = \sum_{\mu,\nu} \sum_{j,k} (\vec{n}_\mu(j) \vec{\nabla}_\mu(j))(\vec{n}_\nu(k) \vec{\nabla}_\nu(k)) C(j, k)$$

where $C(j, k)$ é dada em (3.4), e o momento de dipolo no sítio j passa a ser $\vec{n}_\mu(j) = (n_{\mu 1}(j), n_{\mu 2}(j))$, $\vec{n}_1^2(j) = 1$, $\vec{n}_2^2(j) = L$.
O potencial efetivo das cargas fracionárias é o mesmo dado em (3.5) com

$$\mathcal{Z}(x, y) = \sum_{n=\{\vec{n}_\mu(j)\}} e^{-\frac{\beta}{2} V(n+\xi)} \prod_{j \in L_1} \lambda(\vec{n}_1(j)) \prod_{j \in L_2} \lambda(\vec{n}_2(j)). \tag{3.35}$$

correspondendo a (3.6), onde $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}(x, y)$ para $\xi = 0$ e $\xi(j) = \xi(\delta_{j,x} - \delta_{j,y})$.
Dipolos de mesmo comprimento tem a mesma atividade e distribuição

$$\lambda(\vec{n}_1) = \delta(\vec{n}_1) + z_1 \delta(|\vec{n}_1|^2 - 1)$$

$$\lambda(\vec{n}_2) = \delta(\vec{n}_2) + z_2 \delta(|\vec{n}_2|^2 - L)$$

Agora temos duas densidades de carga

$$\sigma_\mu(j) = \sum_{k,\alpha} n_{\mu\alpha}(j)(\delta_{j,k} - \delta_{j,k+L_\mu e_\alpha}) \qquad \mu, \alpha = 1, 2,$$

e podemos escrever a função de correlação como

$$G(x,y) = \sum_{\sigma_\mu=\{\sigma_\mu(j),\mu=1,2\}} e^{-\frac{\beta}{2}V(\sigma_1+\sigma_2+\xi)} \prod_{j,\alpha\in L_1} z_{1\alpha}(j) \prod_{j,\alpha\in L_2} z_{2\alpha}(j)$$

novamente $z_{\mu\alpha}(j) = z_\alpha(j)^{|n_{\mu\alpha}(j)|}$, $\mu = 1,2$ (Compare com (3.9)).

3.8 Renormalização em L_1 e L_2

A renormalização dos dipolos em L_1 é idêntica à anterior (3.7), com a atividade satisfazendo as estimativas (3.10) e (3.11), mesmo quando $d > 1$. Obtemos

$$\mathcal{Z}(x,y) = \sum_{\bar\sigma_1,\sigma_2} e^{-\frac{\beta}{2}(\bar\sigma_1+\sigma_2+\xi,-\Delta^{-1}(\bar\sigma_1+\sigma_2+\xi))} \prod_{j,\alpha\in L_1} \bar z_{1\alpha}(j) \prod_{j,\alpha\in L_2} z_{2\alpha}(j)$$

Já a renormalização dos diplos em L_2 requer mais cuidado. É conveniente neste ponto denotar por $\bar L_1$ e $\bar L_2$ a coleção de quadrados $B_1(j)$ e $B_2(j)$ centrados nos sítios das respectivas rede L_1 e L_2 de lados de comprimentos d e dL respectivamente.
Para cada $j \in L_2$, fazemos a translação

$$\bar\sigma_2 = \sigma_2 + \Delta f_j$$

onde

$$f_j(k) = \begin{cases} \zeta_j(k)g(k) & \text{for } k \in \bar L_1 \\ \zeta_j(l)g(l), & |k-l| \le 2 \quad \text{for } k \in L_2 \end{cases}$$

com $g(k) = C(j,k) - C(j+Le,k)$ e

$$\zeta_j(k) = \begin{cases} 1 & \text{if } |j-k| \le \frac{3}{2}L \\ 0 & \text{if } |j-k| \ge 2L \end{cases}$$

tendo um decaimento suave

$$|\nabla\zeta_j(k)| \le \frac{\text{const}}{L} \qquad 0 \le \zeta_j(k) \le 1.$$

A função $\zeta_j(k)$ permite deslocar a carga dos dipolos em L_2 sem afetar os dipolos em L_1, já que funções fora da faixa $\{|k| > 2L\}$, a partir de um ponto em L_2, não se alteram, e o dipolo mais próximo a j está a uma distância maior que $2L + 2$.
Depois da translação escrevemos

$$\mathcal{Z}(x,y) = \sum_{\bar{\sigma}} e^{-\frac{\beta}{2}(\bar{\sigma}+\xi,-\Delta^{-1}(\bar{\sigma}+\xi))} \prod_{j,\alpha\in L_1} \bar{z}_{1\alpha}(j) \prod_{j,\alpha\in L_2} \bar{z}_{2\alpha}(j)$$

onde $\bar{\sigma} = \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 + \xi$.
Agora

$$\bar{z}_{2\alpha}(j) \leq e^{-\frac{\beta}{2}(2(\sigma_2,f_j)-(f_j,-\Delta f_j))}$$

Temos as estimativas

$$\begin{aligned}(\sigma_2, f_j) &\leq f_j(j) - f_j(j + L_2 e_\alpha) \\ &\leq \frac{1}{2\pi}\log L\end{aligned}$$

e

$$(f_j, -\Delta f_j) \leq \frac{1}{2\pi}\frac{\log L}{d^2}.$$

onde o lado direito em cada um das estimativas acima pode ser verificado para o caso particular em que $j = 0$.

3.9 Translação

Falta-nos transladar as cargas externas:

$$\rho = \bar{\sigma} + \frac{\gamma}{2\beta}(\Delta a)(j),$$

onde agora $a(j) = g(j,x) - g(j,y)$, e γ é uma nova função de β para este caso.
A função de partição muda para (Compare com (3.20))

$$\mathcal{Z}(x,y) = e^{\frac{\gamma^2}{8\beta}(a,-\Delta a)-\frac{\gamma}{2}(\xi,a)} Z_1(x,y) \tag{3.36}$$

onde, como em (3.18),

$$Z_1(x,y) = \sum_{\rho} e^{-\frac{\beta}{2}(\rho,(-\Delta)^{-1}\rho)} \prod_{j,\alpha\in L_1} \bar{z}_{1\alpha}(j) e^{\gamma_{1\alpha}(j)} \prod_{j,\alpha\in L_2} \bar{z}_{2\alpha}(j) e^{\gamma_{2\alpha}(j)} \tag{3.37}$$

e

$$\gamma_{1\alpha}(j) = n_{1\alpha}(j)\delta_1\bar{a}_\alpha(j) \qquad \gamma_{2\alpha}(j) = n_{2\alpha}(j)\delta_2\bar{a}_\alpha(j)$$

são análogas a (3.19).

3.10 Expansões de Cluster

As expansões de cluster feitas aqui são idênticas à da **seção 3.5**, exceto que temos de trabalhar um pouco mais antes de aplicá-las.
Para derivar um limite superior para a função de partição (3.37) escrevemos

$$\prod_{j,\alpha} \bar{z}_\alpha(j)e^{\gamma_{\mu\alpha}(j)} = \prod_{j,\alpha} \bar{z}_\alpha(j)\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j) + R_\mu$$

onde

$$R_\mu = \prod_{j,\alpha}(\bar{z}_{\mu\alpha}(j)\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j)+\bar{z}_\alpha(j)\sinh\gamma_{\mu\alpha}(j))-\prod_{j,\alpha}\bar{z}_{\mu\alpha}(j)\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j) \quad (3.38)$$

para $\mu = 1, 2$.
Assim (3.37) fica

$$\begin{aligned} Z_1 &= \sum_\rho e^{-\frac{\beta}{2}E(\rho)}\prod_{j,\alpha}\bar{z}_\alpha(j)\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j)\prod_{j,\alpha}\bar{z}_\alpha(j)\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j) + R_1R_2 \\ &+ R_1\prod_{j,\alpha}\bar{z}_\alpha(j)\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j) + R_2\prod_{j,\alpha}\bar{z}_\alpha(j)\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j)) \end{aligned} \quad (3.39)$$

Pelas mesmas considerações de (3.27), (3.28) e 3.29), os termos em R de (3.39) podem ser desprezados:

$$Z_1 \leq K_\beta\sum_\rho e^{-\frac{\beta}{2}E(\rho)}\prod_{j,\alpha\in L_1}\bar{z}_{1\alpha}(j)\cosh\gamma_{1\alpha}(j)\prod_{j,\alpha\in L_2}\bar{z}_{2\alpha}(j)\cosh\gamma_{2\alpha}(j) \quad (3.40)$$

com alguma constante positiva K_β.
Agora desenvolvemos uma expansão de cluster para $\prod_{j,\alpha}\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j)$ $\mu = 1, 2$ da seguinte forma

$$\prod_{j,\alpha}[1 + (\cosh\gamma_{\mu\alpha}(j) - 1)] = \prod_\alpha(1 + S_{\mu\alpha}) \quad (3.41)$$

onde (veja (3.29))

$$S_{\mu\alpha} = \sum_{m_{\mu\alpha}\geq 1} \sum_{j_1,\ldots,j_{m_{\mu\alpha}}} D_{\mu\alpha}(j_1) \ldots D_{\mu\alpha}(j_{m_{\mu\alpha}}), \tag{3.42}$$

com

$$D_{\mu\alpha}(j_i) = \cosh \gamma_{\mu\alpha}(j_i) - 1, \tag{3.43}$$

Expandindo (3.41) obtemos

$$\prod_{j,\alpha}[1 + (\cosh \gamma_{\mu\alpha}(j) - 1)] = 1 + S_{\mu 1} + S_{\mu 2} + S_{\mu 1}S_{\mu 2} \tag{3.44}$$

Inserindo (3.44) na função de partição (3.40), obtemos

$$Z_1 \leq K_\beta \sum_{\rho} e^{-\frac{\beta}{2}E(\rho)} \prod_{j,\mu,\alpha} \bar{z}_{\mu\alpha}(j)(1 + S_{\mu 1} + S_{\mu 2} + S_{\mu 1}S_{\mu 2}). \tag{3.45}$$

Agora escrevemos

$$Z_1 \leq K_\beta \left\{ \mathcal{Z} + \sum_{\bar{\sigma}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar{\sigma})} \prod_{j,\mu\alpha} \bar{z}_{\mu,\alpha}(j)(S_1 + S_2 + S_1S_2) \right\} \tag{3.46}$$

where $S_\mu = S_{\mu 1} + S_{\mu 2} + S_{\mu 1}S_{\mu 2}$, $\mu = 1, 2$.
Claramente (3.46) admite a estimativa

$$Z_1 \leq K_\beta \left\{ \mathcal{Z} + \sum_{\bar{\sigma}} e^{-\frac{\beta}{2}E(\bar{\sigma})} \prod_{j,\mu,\alpha} \bar{z}_\alpha(j)(s_1 + s_2 + s_1s_2) \right\} \tag{3.47}$$

onde $s_\mu = s_{\mu 1} + s_{\mu 2} + s_{\mu 1}s_{\mu 2}$, e, como em (3.42),

$$s_{\mu\alpha} = \sum_{m_{\mu\alpha}\geq 1} \sum_{j_1,\ldots,j_{m_{\mu\alpha}}} \bar{z}_{\mu\alpha}(j_1)D_{\mu\alpha}(j_1) \ldots \bar{z}_{\mu\alpha}(j_{m_{\mu\alpha}})D_{\mu\alpha}(j_{m_{\mu\alpha}}).$$

Temos

$$\begin{aligned} Z_1 &\leq K_\beta \mathcal{Z}(1 + s_1 + s_2 + s_1s_2) \\ &\leq K_\beta \mathcal{Z}(1 + s_{11} + s_{12} + s_{11}s_{12})(1 + s_{21} + s_{22} + s_{21}s_{22}) \end{aligned} \tag{3.48}$$

onde tomamos os termos em s em (3.48) com $n_{\mu\alpha}(j) = 1$ for all j, μ e α, e usamos que $\mathcal{Z} > 1$.

De novo desfazemos a expansão de cluster (3.48) de acordo com as fórmulas (3.41), (3.42) para obter

$$Z_1 \leq K_\beta Z \prod_{j,\alpha\in L_1} (1 + \bar{z}_{1\alpha}(j) D_{1\alpha}(j)) \prod_{j,\alpha\in L_2} (1 + \bar{z}_{2\alpha}(j) D_{2\alpha}(j)) \tag{3.49}$$

com $n_{\mu\alpha}(j) = 1$ para todo j, μ e α.
Assim, substituindo a expressão para Z_1 em (3.36), obtemos

$$G(x,y) \leq C_\gamma \, Z \, e^{\{\frac{\gamma^2}{8\beta} - \frac{\gamma}{2}\}(a, -\Delta a) + p(\gamma)} \tag{3.50}$$

onde

$$p(\gamma) = \bar{z}_1(1+\epsilon_1)\frac{\gamma^2}{2}\sum_j (\delta_1 a(j))^2 + \bar{z}_2(1+\epsilon_2)\frac{\gamma^2}{2}\sum_j (\delta_2 a(j))^2$$

As constantes ϵ_1, ϵ_2 vêm de (3.29).
Ambos as somas acima podem ser estimadas pelo mesmo fator

$$\sum_j |\delta_\mu a(j)|^2 = const \, \frac{\log|x-y|}{\pi d^2}$$

O coeficiente da exponencial em (3.50) é

$$\frac{\gamma^2}{8\beta} - \gamma/2 + \left\{ \frac{\gamma^2}{2}(1+\epsilon_1)\bar{z}_1 + \frac{\gamma^2}{2}(1+\epsilon_2)\bar{z}_2 \right\} \frac{\text{const.}}{d^2}$$

o qual toma o valor ótimo para

$$2\beta\gamma^{-1} = 1 + 4\beta \left\{ (1+\epsilon_1)\bar{z}_1 + (1+\epsilon_2)\bar{z}_2 \right\} \frac{\text{const}}{d^2}.$$

Então obtemos

$$G(x,y) \leq C_\beta e^{-\frac{\beta}{2\pi}(1+4\beta[(1+\epsilon_1)\bar{z}_1+(1+\epsilon_2)\bar{z}_2]\frac{\text{const}}{d^2})^{-1}\log|x-y|}$$

Capítulo 4

O Modelo de Villain

Neste capítulo provamos que a fase dipolar do gás de Villain é caracterizada por

$$\langle e^{i\xi(\phi(0)-\phi(x))}\rangle(\beta, z) \leq \text{const}(1+|x|)^{-\xi^2\beta_c/2\pi}$$

para algum $\beta_c(\beta, \xi, z)$.
Reproduzimos o resultado de [25] quanto às estimativas, mas usamos o método de multi-escala como em [30].
A idéia da prova consiste em escrever a *função de partição* na representação de *sine*-Gordon (ver 2.7)

$$\mathcal{Z}(\sigma_2) = \int \prod_{x\in\Lambda} \hat{\lambda}(\phi+\sigma_2)(x) d\mu_\beta(\phi)$$

onde

$$\hat{\lambda}(\phi+\sigma_2)(x) = 1 + 2\sum_{q=1}^{\infty} \lambda(q)\cos(\phi(x)+\sigma_2(x))q(x)) \tag{4.1}$$

como combinação convexa de funções de partição de gases de multipolos neutros.
Cada passo do processo consiste em construir ensembles esparsos, o que significa diminuir a densidade do gás. Sabemos que uma alteração na densidade provoca uma mudança na atividade do gás. No caso, estaremos aumentando a atividade. Esse é o custo entrópico do processo. Por outro lado, para que a medida de probabilidade na variável ϕ seja positiva – ou equivalentemente – a soma em (4.1) convirja, a atividade do gás não poderá ser maior do que 1. Logo deveremos compensar o custo entrópico pela extração da auto-energia

das cargas de cada ensemble, a qual terá de superar o aumento de entropia resultante do agrupamento de cargas em blocos esparsos.

4.1 Combinações Convexas

Aqui começamos a aplicar as técnicas de renormalização para escrever a função de partição como combinações convexas de funções de partição regulares. Como em [25], escolhemos uma sequência $\{\zeta_{q(x)}\}_{q(x)=1}^{\infty}$ de números positivos, cuja dependência com $q(x)$ há de ser posteriormente estabelecida, satisfazendo a condição

$$\sum_{q(x)=1}^{\infty} \zeta_{q(x)} = 1, \tag{4.2}$$

e escrevemos

$$\prod_x \hat{\lambda}(\phi + \xi\sigma_2)(x) = \sum_{q_\Lambda} \zeta(q_\Lambda) \prod_x [1 + z(q(x)) \cos((\phi(x) + \sigma_2(x))q(x))]$$

onde

$$\zeta_{q_\Lambda} = \prod_{x\epsilon\Lambda} \zeta_{q(x)} \qquad e \quad q_\Lambda = \{q(x) = 1, 2, 3, \dots \ ; x \ \in \ \Lambda\}. \tag{4.3}$$

e $z(q(x)) = 2\lambda(q(x))/\zeta_{q(x)}$.

A sequência ζ_q pode ser escolhida arbitrariamente, contanto que

$$|\zeta_q|^{-1} \leq \text{conste}^{cq^2}$$

com $0 < c < \infty$.
Note que $\sigma(x) = \xi(-\Delta)^{-1}\partial_2 f^x$ não será afetado pela renormalização de cargas, e será pequeno se ρ for neutro e tiver suporte longe de 0 ou x.
Temos que $\mathcal{Z}(\sigma_2)$ será combinação convexa de funções da forma

$$\mathcal{Z}(\sigma_2) = \sum_{q_\Lambda} \zeta(q_\Lambda) \int \prod_x [1 + z_x \cos(\phi(x) + \sigma_2(x))q(x)] d\mu_\beta(\phi) \tag{4.4}$$

4.2 A Construção dos Blocos

A seguir, fixamos a geometria do problema. Dividimos a rede em blocos. Denotamos por $B(x, L)$ o quadrado em $\mathbf{Z}^2$ de lado L com centro em x

$$B(x, L) = \{y \in \mathbf{Z}^2 : |x - y| < L/2\}$$

tal que

$$\Lambda = \bigcup_{y \in \hat{\Lambda}} B_0(y, L) \qquad \hat{\Lambda} = \Lambda \cap 3\,\mathbf{Z}^2.$$

Fixado q_Λ

$$\prod_{x \in \Lambda} (1 + z(q(x)) \cos(q(x)\phi'(x))) = \prod_{y \in \hat{\Lambda}} \prod_{u \in B_0(y)} (1 + z(q(u)) \cos(q(u)\phi'(u)))$$

onde $\phi' = \phi + \sigma$.
Seguindo [30] reapresentamos o [Lemma 2.1], com o qual o produto acima é escrito como combinação convexa de fatores similares correspondentes a multipolos de dimensão variável.

Lema 4.1 Seja $z_i > 0$, $\phi'_i \in \mathbf{R}$, $i = 1, 2, ..., N$. Expandimos o produto acima em soma de produtos por meio da identidade[1]

$$\prod_{i=1}^{N} (1 + z_i \cos \phi'_i) = \sum_{\tau \in g_N} c_\tau (1 + z_\tau \cos \phi'(\tau))$$

onde $g_\tau\{\tau : 1, 2, ..., N \to 0, 1, -1, \tau \equiv 0\}$, $\phi'(\tau) = \sum_{i=1}^{N} \phi'_i \tau_i$, $0 < c_\tau$, $\sum_{\tau \in g_N} c_\tau = 1$, e

$$z_\tau = \prod_{i=1}^{N} (b_N z_i)^{|\tau_i|}$$

Note-se que a magnitude do coeficiente c_τ não é importante; mas sim seu sinal, $c_\tau > 0$. A variável de bloco b_N depende unicamente do número N de elementos do conjunto τ_y, com a única condição de que

$$\sum_{\tau_y} c_{\tau_y} = \sum_{\tau_y} \left(\frac{1}{2b_N}\right)^{|\tau_y(u)|} = 1.$$

[1] Usamos a identidade: $\prod_{i=1}^{N} \cos \phi'_i = (1/2)^N \sum_{\{\tau\}} \cos(\sum_{i=1}^{N} \tau_i \phi'_i)$ com $\tau_i = \pm 1, i = 1, 2, ..., N$

Essa condição determina unicamente a constante b_N visto que

$$1 = \sum_{\tau_y} \left(\frac{1}{2b_N}\right)^{|\tau_y(u)|} = \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{{b_N}^n} = \left(1 + \frac{1}{b_N}\right)^N - 1,$$

ou

$$b_N = (2^{1/N} - 1)^{-1} \leq \frac{N}{b_N}.$$

Disso resulta a estimativa

$$z_y \leq \prod_{u \in B_0(y)} \left(\frac{9}{\log 2} \frac{2\lambda(\rho_y(u))}{\zeta_{\rho_y(u)}}\right)$$

(Em nosso caso, $|B_0(y)| = 9$.)
Esse lema é aplicado em cada $y \in \hat{\Lambda}$ para escrever (4.3) como combinação convexa de funções do tipo

$$\int \prod_{y \in \hat{\Lambda}} [1 + z_y \cos(\phi(\rho_y) + \sigma_2(\rho_y))] d\mu_\beta(\phi) \tag{4.5}$$

Aqui

$$\phi(\rho) = \sum_{u \in B_0(y)} \phi(u)\rho(u)$$

4.3 Reprimindo a Atividade

Para β suficientemente grande, o gás de Coulomb comportar-se-á como gás de multipolos em que grandes multipolos serão improváveis se a atividade efetiva em função de β for pequena. Visando a reprimir a atividade z_{σ_y} das cargas do bloco $B_0(y)$, gostaríamos de extrair o termo de auto-energia de $E(q_\Lambda)$ mediante a seguinte desigualdade eletrostática. Isso é feito pela translação complexa $\phi \to \phi + \imath a, a \in \mathbf{R}$, usando o seguinte lema.

Lema 4.2 Seja $\rho : \mathbf{Z}^2 \to \mathbf{R}$ com suporte compacto, e seja $G(\rho)$ um funcional independente de $\phi(i) : i \in supp\rho$. Então

$$\int e^{\imath\phi(\rho)} G(\phi) d\mu_\beta = e^{-\beta((\rho,a) - \frac{1}{2}(a,-\Delta a))} \int e^{\imath\phi(\rho + \Delta a)} G(\phi) d\mu_\beta$$

A renormalização da densidade de carga se faz como em (3.7):

$$\tilde{\rho} = \rho + \frac{1}{||\Delta||}\Delta\rho$$

O laplaciano, porém, deslocaliza as cargas efetivas do bloco original, podendo com isso ocorrer em $\tilde{q}_\Lambda$ uma superposição de cargas inicialmente em blocos distintos. Evitamos esse efeito observando que a desigualdade eletrostática é valida ainda quando a transformação de cargas seja efetuada apenas num subconjunto de q_Λ – cuja escolha será especificada em conformidade com a construção de blocos que impusermos. Com isso, formamos blocos maiores que contenham alguns $B_0(y)$ e selecionamos – a seleção não é única – em cada um desses blocos um ponto para o qual seja lícito aplicar a desigualdade eletrostática sem deslocar as cargas escolhidas para fora da fronteira comum. O ponto selecionado, u_y, é aquele em que

$$\rho_y^2(u_y) \geq \frac{1}{9} \sum_{u \in B_0(y)} \rho_y^2(u).$$

Os blocos agrupados definem uma equivalência segundo o critério

$$y \sim y' \leftrightarrow |u_y - u_{y'}| = 1;$$

e o agrupamento, a classe de equivalência Y:

$$B_0(Y) = \bigcup_{y \in Y} B_0(y).$$

Cumpre observar que há quatro formas possíveis para cada Y, conforme $|Y| = 1, 2, 3$ ou 4. Esse procedimento vai garantir que, em cada bloco, o gás seja suficientemente diluto a fim de ser possível extrair a porção local da auto-energia eletrostática $exp[const\beta E(q)]$ das cargas u_y. Em termos dos novos blocos

$$\prod_{y \in \hat{\Lambda}} (1 + z_y \cos\phi'(\rho_y)) = \prod_{Y} \prod_{y \in Y} (1 + z_y \cos\phi'(\rho_y))$$

A repetição da transformação do produto dos termos de $B_0(y), y \in Y$ em soma convexa sobre um conjunto τ cujos elementos são funções constantes

nos blocos constituintes de Y, com valores possíveis em cada um deles iguais a $0, \pm 1$, conduz a

$$Z = \sum_{n_\Lambda} \zeta_{n_\Lambda} \sum_{\tau} c_\tau \sum_{\omega} c_\omega Z_{n_\Lambda,\tau,\omega}$$

agora,

$$Z_{n_\Lambda,\tau,\omega} = \prod_{Y} (1 + z_Y \cos \phi'(\rho_Y))$$

correspondentemente Y possui a distribuição de cargas compatível com a dos blocos internos:

$$\rho_Y(u) = \omega_y \rho_y(u), \qquad y \in B_0(Y).$$

O bloco Y que maximiza a atividade é o de $|Y| = 4$ com $|\omega_y(u)| = 1$ para todos os quatro pontos y internos, resultando na estimativa:

$$0 < z_Y \leq \left(\frac{4}{\log 2}\right)^4 \prod_{u \in B_0(Y)} \left[\frac{9}{\log 2} z_{\omega(u)}\right].$$

Neste ponto, aplicamos a desigualdade eletrostática restrita ao conjunto de pontos $U_Y = \{u_y,\ y \in Y\}$ cujas cargas efetivas são $\bar{\rho}_Y$ com o fito de reprimir a atividade z_Y do bloco Y pelo fator de auto-energia das cargas em U_Y:

$$\bar{z}_Y = z_Y\ exp\left\{-\frac{\beta}{16} \sum_{y \in U_Y} \rho_y^2(u_y)\right\}.$$

Pelo critério de seleção dos pontos selecionados daquele conjunto, segue a estimativa

$$\bar{z}_Y \leq z_Y\ exp\{-\frac{\beta}{144} \sum_{u \in B_0(Y)} \rho^2(u)\}.$$

Para qualquer Y, as atividades são limitadas pela função de β

$$\bar{z}_Y \leq K_0(\beta) = \left(\frac{4}{\log 2}\right)^4 \frac{18}{\log 2} \sup_{q=1,2,3,\ldots} \left[\frac{\lambda(q)}{\zeta_q} e^{-\frac{\beta}{144}q^2}\right].$$

4.4 Um Passo Intermediário

O inconveniente com os blocos Y são suas diferentes formas. A maneira de recuperarmos os blocos quadrados é passarmos a uma escala superior que

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
2759
INSTITUTO DE FÍSICA

agrupe todas as quatros formas possíveis de cada Y, mediante o seguinte procedimente:
1) Definimos uma coleção de densidades de carga cujos suportes são mutuamente disjuntos;
2) As áreas de densidades de carga são quadrados $\Lambda^{(1)} = \Lambda \cap L_1\mathbf{Z}^2$ de lado $L_1 = 3^{n_1}$ ($n_1 \geq 3$, inteiro), necessários para cobrir o suporte dessas densidades;
3) O critério de localização das densidades de carga em $B(y, L_1)$ é

$$supp\ \rho \subset B(y, \frac{4}{3}L_1) = \bar{B}(y, L_1).$$

Na escala assim definida, temos a seguinte igualdade para cada par $(\rho, z(\rho))$ de densidade de carga e da respectiva atividade localizado no quadrado $B(y, L_1)$:[2]

$$\int \prod_{y \in \Lambda^{(1)}} [1 + z_y \cos(\phi(\tilde{\rho}_y) + \sigma_2(\rho_y))] d\mu_\beta(\phi) \tag{4.6}$$

onde $\Lambda^{(1)} = \Lambda \cap L_1 Z^2$, com $L_1 = 3^{n_1}$, e $n_1 > 3$ é um inteiro. Agora a densidade de carga está localizada em $B_1(y) = B(y, L_1)$, com

$$z(\rho_y) \leq C_1 \prod_{u \in B_1(y)} \left[\frac{9}{\log 2} \frac{2\lambda(\rho_y(u))}{\zeta(\rho_y(u))} \right]$$

e $C_1 = (1/\log 2)^5 (64/9L_1)^2$. O valor de z_σ depende das formas dos blocos constituintes das classes de equivalência. O máximo valor ocorre quando esses blocos são todos iguais e têm $|Y| = 1$, de modo que temos somente um u_y em cada Y, perfazendo o número total

$$\frac{1}{9}\left(\frac{4}{3}L_1\right)^2$$

de pontos em cada $\Lambda^{(1)}$. Correspondentemente temos a estimativa:

$$z_\sigma \leq \left(\frac{4}{9}L_1\right)^2 \frac{K_0(\beta)}{\log 2} \equiv K_1(L_1, \beta).$$

[2]Note que em todas as transformações efetuadas a função *sigma* não é afetada pela translação de carga.

Ao concluirmos essa sequência de transformações , a função de partição de um gás de Coulomb bidimensional está escrita como combinação convexa de funções de partição de um gás de multipolos da forma (4.5). Essas são as condições iniciais para a realização de um processo indutivo sobre a função de partição na ausência de cargas externas apenas. Tanto o numerador quanto o denominador podem ser tratados da mesma maneira.

4.5 O Procedimento Indutivo para a Função de Partição

Aqui continuamos o processo de renormalização de densidades de cargas e atividades cujo objetivo é escrever a função de partição como combinação convexa de funções de partição regulares, que serão definidas em seguida, nas escalas de ρ.

Dado $n_1 \geq 3$, e construída a primeira escala de lado $L_1 = 3^{n_1}$, a função de partição do gás de Coulomb está escrita como combinação convexa de expressões da forma (4.5)

$$\int \prod_{y \in \Lambda^{(1)}} (1 + z(\bar{\rho}_y) \cos(\phi(\bar{\rho}_y) + \sigma_2(\rho_y))) d\mu_\beta(\phi)$$

com atividade $K_1(L_1, \beta) < 1$.

Para $k = 1, 2, 3, ...$, vamos construir funções , chamadas funções de partição regulares, que obedecem a uma relação de recorrência entre as escalas. Será possível, então, identificar a função de partição do gás como combinação convexa, em cada escala, de funções de partição regulares, a partir de sua identificação com com as funções regulares da primeira escala. Com isso, poderemos propagar as estimativas das atividades extraindo os termos de auto-energia dos elementos carregados em cada escala pela aplicação da desigualdade eletrostática a eles.

As escalas usadas são da forma $L_{k+1} = L_k^\alpha$, com $\alpha > 1$. Fixando uma delas, queremos que na rede $B(y, L_k) = B_k(y)$, formada por blocos de lado L_k, a função de partição do gás seja escrita como combinação convexa de funções indexadas pelos parâmetros (k, r), chamadas funções de partição regulares,

e definidas por

$$Z_{(k,r)} = \int F(\mathcal{N}_{(k,,y,r)};\phi) \prod_{y\in\Lambda^{(k)}} [1 + z(\rho_y)\cos(\phi(\bar{\rho}_y) + \sigma_2(\rho_y))]$$

As densidades de carga ρ_y localizadas em $B_k(y)$ para todo $y \in \Lambda^{(k)}$ com *supp* $\rho_y \subset \bar{B}(y, L_k)$ satisfazendo $z(\rho_y) \leq {L_k}^{-r}$, são chamadas densidades admissíveis de carga (k,y,r).
Seguindo a notação de [30], temos

i) $\bar{\rho}_y$ está localizada em $B(y, \frac{4}{3}L_k)$

ii) ρ_y está localizada em $B(y, L_k)$

iii) $z(\rho_y) \leq L_k^{-t} e^{-C|\rho|^2}$

O fator $\mathbf{F}(\mathcal{N}_{(k,y,r)})$ é dado por

$$F(\mathcal{N}_{(k,,y,r)};\phi) = \int \prod_{\rho,\bar{\rho}\in\mathcal{N}_{k,y,r}} [1 + z(\rho)\cos(\phi(\bar{\rho}) + \sigma_2(\rho))] d\mu_\beta(\phi)$$

onde $\{\mathcal{N}_{k,y,r}, \rho_y, \bar{\rho}_y, z_y\}$ é uma coleção de cargas, e $\rho = (\rho, \bar{\rho}, z(\rho))$ é uma densidade de carga admissível (k, y, t).
Nessa expansão, todo ρ em $\mathcal{N}_{k,y,r}$ é neutro e separado de outros.
Esse fator estabelece um vínculo com as escalas anteriores pois depende das coleções de densidades de carga $\mathcal{N}_{(k,y)}$ nelas contidas. Essas coleções reúnem as cargas das escalas até $k-1$ iterativamente por

$$\mathcal{N}_{(k,y)} = \left[\bigcup_{y'\in B(y',L_k)} \mathcal{N}_{(k,y')} \right] \cup \{\rho\},$$

a partir da primeira escala onde $\mathcal{N}_{(k=1,y)} = \emptyset$. A carga ρ está localizada em $B_k(y')$ para algum $y' \in B_{k+1}^{(k)}(y)$ cuja atividade é $z(\rho_y) \leq \left(\frac{8}{\log 2}\right)^4 L_k^{-r}$.
Em face dessas propriedades, a função de partição do gás da primeira escala é identificada com a função de partição regular $(k = 1, r + 2(\alpha - 1))$, para a qual a admissibilidade de seus parâmetros se realiza pela estimativa

$$K_1(L_1, \beta) \leq L_1^{-[r+2(\alpha-1)]}.$$

4.6 A Hipótese Indutiva

A hipótese indutiva é a de que, dada a condição inicial $\mathcal{N}_{(k=1,y)} = \emptyset$, qualquer função de partição regular $(k+1, r)$ pode ser obtida das funções de partição regulares (k,r) para $k = 1, 2, 3, ...$, $L_{k+1} = 3^{n_{k+1}}$ e $n_{k+1} = [\alpha n_k]$.
De fato, se a função de partição regular na escala k é

$$Z_{(k,r)} = \prod_{y \in \Lambda^{(k)}} \mathbf{F}(\mathcal{N}_{(k,y,r)}) \int \prod_{y \in \Lambda^{(k)}} (1 + z(\rho_y)\cos(\phi(\bar{\rho}_y) + \sigma_2(\rho_y)))d\mu_\beta(\phi) \quad (4.7)$$

é possível passar à escala $k+1$ usando o **Lema 4.1** para transformar os dois termos do lado direito de (4.6).
O produto

$$\prod_{y \in \Lambda^{(k)}} (1 + z(\rho_y)\cos(\phi(\bar{\rho}_y) + \sigma_2(\rho_y)))$$

se transforma em combinação convexa de funções de partição na rede de centros em pontos $u \in \Lambda^{(k+1)}$

$$\prod_{u \in \Lambda^{(k+1)}} (1 + z_u^* \cos(\phi(\bar{\rho}_y^*) + \sigma_2(\rho_y^*)))$$

O termo $\mathbf{F}$ por sua vez se transforma em

$$\begin{aligned}
\prod_{y \in \Lambda^{(k)}} \mathbf{F}(\mathcal{N}_{(k,y,r)}) &= \prod_{y \in \Lambda^{(k)}} \prod_{\rho \in \mathcal{N}_{(k,y,r)}} (1 + z(\rho_y)\cos(\phi(\bar{\rho}_y) + \sigma_2(\rho_y)))d\mu_\beta(\phi) \\
&= \prod_{u \in \Lambda^{(k+1)}} \prod_{\rho \in \mathcal{N}_{(k+1,u,r)}} (1 + z_u^* \cos(\phi(\bar{\rho}_y^*) + \sigma_2(\rho_y^*)))d\mu_\beta(\phi) \\
&= \prod_{u \in \Lambda^{k+1}} \mathbf{F}\left(\tilde{\mathcal{N}}_{(k+1,u,r)}\right),
\end{aligned}$$

onde

$$\tilde{\mathcal{N}}_{(k+1,u,r)} = \bigcup_{y \in B_{k+1}^{k}(u)} \mathcal{N}_{(k,y,r)},$$

e

$$\bar{\rho}_u^* = \sum_{y \in B_{k+1}^{(k)}(u)} \tau_y \rho_y, \quad \text{e} \quad \rho_u^* = \sum_{y \in B_{k+1}^{(k)}(u)} \tau_y \rho_y$$

onde $B_{k+1}^{(k)}(u) = B_k(u) \cap L_{k+1}Z^2$, e $\tau \in \mathcal{G}(I) = \{\tau : I \to 0, 1, -1\}$.
O par $(\rho^*(u), z_u^*)$ é da forma $\rho^*(u) = \tau_y \rho_y(u)$ para algum $\tau \in \mathcal{G}(\Lambda_{k+1}^{(k)}(u))$.
A estimativa para a atividade fica

$$z_u^* \leq \left[\frac{1}{\log 2} \left(\frac{L_{k+1}}{L_k} \right)^2 \frac{1}{L_k^{r+2(\alpha-1)}} \right]^{\sum_y |\tau_y|}.$$

Substituindo $L_{k+1} = L_k{}^{\alpha}$ resulta

$$z^*(u) \leq \left(\frac{1}{\log 2} \frac{1}{L_k{}^r} \right)^{\sum_y |\tau_y|}.$$

Todo ρ em $\tilde{\mathcal{N}}$ é neutro, exceto $\rho = \rho^*$ que é carregado.

4.7 Extração da Energia de Cargas Isoladas

Em alguns casos será preciso generalizar o procedimento de extrair a auto-energia eletrostática dos constituintes carregados das densidades de carga $\{\mathcal{N}_{k+1}, (\rho_u^*, z_u^*)\}_{u \in \Lambda^{(k+1)}}$ como acima definidas, nas escalas de ρ.
Isso é feito generalizando o **Lema 4.2** de deslocamento de cargas para acomodar uma translação das cargas pelo laplaciano de uma função f_k em cada escala, à semelhança do que fizemos para os dipolos.
Da rede $\Lambda^{(k+1)}$, onde os conjuntos $\{\mathcal{N}_{k+1}, (\rho_u^*, z_u^*)\}_{u \in \Lambda^{(k+1)}}$ de densidades de carga se localizam , vamos supor que em um de seus blocos, por exemplo, no de centro u_0, exista um ponto y_0 tal que $\rho_{u_0}^* = \rho_{y_0}^*$, e

$$B(y_0, \frac{1}{3}L_{k+1}) \cap supp\ \rho_{u_0}^* = \emptyset$$

para todo $u \in \Lambda^{(k+1)}$, $u \neq u_0$.
Admitiremos, por simplicidade, que $\rho_{u_0}^* = \rho_0^*$ está localizado em $B_k(0)$. A condição de validade da hipótese acima é $supp\ \rho_u^* \cap B(0, \frac{1}{3}L_{k+1}) = \emptyset$ para todo $u \in \Lambda^{(k+1)}$, $u \neq 0$. Queremos aplicar a desigualdade eletrostática apenas à ρ_0^*, o que exigirá uma melhor demarcação da região $B(0, \frac{1}{3}L_{k+1})$ onde está o suporte da carga.
Imaginamos, então, que cada função $\rho_y \in \mathcal{N}_{(k+1,0,r)}$ está localizada numa caixa $B_{n_y}(y)$, onde $n_y = inf\{n \in \mathbb{N} : supp\ \rho_y \subset B_n(y)\}$.

Com isso, podemos definir no bloco $B_{k+1}(0)$, que contém as caixas, as classes de equivalência distintas $Y_1, ..., Y_p$ pela regra

$$y \sim y' \leftrightarrow \bar{B}_{n_y}(y) \bigcap \bar{B}_{n_{y'}}(y') = \emptyset.$$

A reunião das densidades de carga contidas numa mesma classe de equivalência forma os conjuntos

$$B(Y_t) = \cup_{y \in Y_t} \bar{B}_{n_y}(y),$$

$t = 1, ..., p$.
Tomamos então em $B_{k+1}(0)$ a função $f_k(j)$ definida por

$$f_k(j) = \begin{cases} \log \frac{3^D}{L_k} & \text{para} \quad \|j\| \leq \frac{L_k}{2} \\ \log \frac{3^D}{2j} & \text{para} \quad \frac{L_k}{2} \leq \|j\| \leq \frac{3^D}{2} \\ 0 \quad \text{para} \quad \|j\| > \frac{3^D}{2} \end{cases}$$

e introduzimos

$$q = \sum_{y \in \bar{B}_k(0)} \rho_0^*(y).$$

A transformação das cargas é efetuada através da translação

$$\bar{\rho}_\Lambda = \rho_\Lambda + \kappa q \Delta f_k$$

onde κ é um parâmetro a ser escolhido posteriormente, e a função $\hat{f}_k(j)$ é definida em termos de $f_k(j)$ como segue

$$\hat{f}_k(j) = \begin{cases} f_k(j) & \text{se} \quad j \in \cup_{t=1}^{p} B(Y_t) \\ f_k(\bar{y}_t) & \text{se} \quad j \in B(Y_t), \quad t = 1, ..., p, \end{cases}$$

para algum ponto $\bar{y}_t$ em $B(Y_t)$.
Da definição de $f_k(j)$

$$(\rho_\Lambda, f_k) = \log \frac{3^D}{L_k},$$

e, se conseguirmos o limite superior

$$(\Delta f_k, f_k) \leq \delta \log \frac{3^D}{L_k},$$

para alguma constante $\delta < \infty$, teremos extraído o fator de decaimento

$$\left(\frac{L_{k+1}}{3L_k}\right)^{-\beta\kappa q^2} \leq Y^{(k)} \leq \left(\frac{L_{k+1}}{3L_k}\right)^{-\beta\kappa q^2(1-\kappa/2\delta)}.$$

De fato, aquele limite de $(\Delta f_k, f_k)$ existe. A estimativa $\delta^{-1} = 8 + O(L_1^{3-2\alpha})$ é obtida como em [MKP90].
Assim, sendo y_0 arbitrário, se $\alpha > 3/2$, para qualquer $\kappa > 0$, a função de partição , anteriormente obtida como produto de termos sobre todos os pontos u da rede $\Lambda^{(k+1)}$, agora terá o termo relativo ao ponto u_0 substituído pelo fator de decaimento $Y^{(k)}$.
Assim, para algum $\bar{\rho}^*_{u_0} \in \Lambda^{(k+1)}$, mantendo ρ^* inalterado, obtemos

$$\int e^{i(\phi(\bar{\rho}^*_{u_0})+\sigma_2(\rho^*_{u_0}))} \prod_{u\in\Lambda^{(k+1)}} F(\tilde{\mathcal{N}}_{(k+1,u,r);\emptyset}) \prod_{u\in\Lambda^{(k+1)}} [1+z^*_u\cos(\phi(\bar{\rho}^*)+\sigma_2(\rho^*_u))]d\mu_\beta(\phi)$$

$$= Y^{(k)} \int e^{i(\phi(\bar{\rho}^*_{u_0})+\sigma_2(\rho^*_{u_0}))} \prod_{u\in\Lambda^{(k+1)}} F(\tilde{\mathcal{N}}_{(k+1,u,r);\emptyset})$$
$$\prod_{u\in\Lambda^{(k+1)}} [1 + z_u\cos(\phi(\bar{\rho}^*) + \sigma_2(\rho^*_u))]d\mu_\beta(\phi)$$

onde

$$q = Q(\rho^*_u) = \sum_{y\in B(u,\frac{4}{3}L_k)} \rho^*_u(y)$$

e $\delta^{-1} = 8 + 0(L_1^{3-2\alpha})$ é independente de κ, e $\bar{\rho}^*_{u_0}$ é a densidade de carga localizada em $B(y_0, \frac{1}{3}L_{k+1})$ tal que $Q(\bar{\rho}^*_{u_0}) = Q(\rho^*_{u_0})$.
Note-se que a transformação das cargas nenhuma alteração acarreta em $\mathcal{F}(\tilde{\mathcal{N}}_{k+1,u,r})$.
O processo descrito acima é levado até a escala N. Para completar o processo, construímos um próximo bloco tal que $L_{N+1} = \infty$, de modo que $Y^{(k=N+1)} = 0$. Assim, a contribuição de todos os termos contendo fatores $z_u\cos\phi(\rho^*)$ com $Q(\rho^*_{u_0}) \neq 0$ se anula.
A análise deve acomodar ainda aquelas situações em que não valha a condição $B(y_0, \frac{1}{3}L_{k+1}) \cap supp\ \rho^*_{u_0} = \emptyset$. Para isso remetemos o leitor a [30].
Terminamos assim o tratamento da função de partição do gás na ausência de cargas externas, baseando nossa análise na obtenção de combinações convexas da função de partição e na construção de condições apropriadas para

aplicar a desigualdade eletrostática de modo que reproduzíssemos os resultados da referência acima.
Para $3/2 < \alpha < 2$, $2\alpha(\alpha-1)/(2-\alpha) < r < \beta\delta/2 - 2\alpha$, a função de partição está escrita como combinação convexa de funções de partição regulares, com os parâmetros acima, para qualquer $k = 1, 2, \ldots$ se L_1 for suficientemente grande.

4.8 A Função de Correlação das Cargas Externas

A expansão acima é feita até que todas as cargas ρ sejam neutras, ou seja, até que a contribuição de todos os termos contendo um fator $z\cos\phi(\rho)$ com $Q(\rho) \neq 0$ se cancele. Seja $\mathcal{N}$ a coleção de cargas neutras resultantes do procedimento acima, e $\mathcal{Z}_{\mathcal{N}}(\sigma_2)$ a função de partição regular para aquela coleção de cargas na escala N. Temos

$$\mathcal{Z}_{\mathcal{N}}(\sigma_2) = \int \prod_{\rho\in\mathcal{N}} [1 + z(\rho)\cos(\phi(\bar{\rho}) + \sigma_2(\rho))] d\mu_\beta(\phi)$$

com $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{\mathcal{N}}(\sigma_2 = 0)$.
O limite inferior para a expressão acima pode é obtido fatorando a dependência de σ_2 na função de partição , como em [25].
Definimos

$$x = z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho}) \qquad y = z(\rho)\cos(\phi(\bar{\rho}) + \sigma_2(\rho)) - x$$

e escrevemos

$$0 < 1 + z(\rho)\cos(\phi(\bar{\rho}) + \sigma_2(\rho)) = \exp\ln(1 + x + y)$$

Expandindo o logaritmo em torno de $y = 0$, usando o teorema de Taylor com resto até segunda ordem em y, vem

$$1 + z(\rho)\cos(\phi(\bar{\rho}) + \sigma_2(\rho)) = (1 + x)\exp\left\{\frac{y}{1+x} - \frac{1}{2}\frac{y^2}{(1 + x + \theta y)}\right\}$$

para algum $\theta \in (0, 1)$.
A aplicação da fórmula acima gera

$$\mathcal{Z}_{\mathcal{N}}(\sigma_2) = \int d\mu_\beta(\phi) \prod_{\rho\in\mathcal{N}} (1 + z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho}))e^{-S(\rho,\phi)}$$

$$\exp\{\frac{z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho})(\cos\sigma_2(\rho)-1)}{1+z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho})}-\frac{1}{2}\frac{y^2}{(1+x+\theta y)^2}\}$$

onde

$$S(\rho,\phi)=\frac{z(\rho)\sin\phi(\bar{\rho})\sin\sigma_2(\rho)}{1+z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho})}$$

Temos estes limites inferiores

$$\frac{z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho})(\cos(\sigma_2(\rho))-1)}{1+z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho})}\geq-\frac{z(\rho)}{2(1-z(\rho))}[\sigma(\rho)]^2_{2\pi}$$

e

$$-\frac{y^2}{(1+x+\theta y)^2}>-(1+\pi)\frac{z^2(\rho)}{(1-4z(\rho))^2}[\sigma_2(\rho)]^2_{2\pi}$$

onde fizemos a aproximação $1-\cos k\leq k^2/2$, e

$$z_1(\rho)=\frac{z(\rho)}{1-z(\rho)}\qquad z_2(\rho)=(1+\pi)\frac{z^2(\rho)}{(1-4z(\rho))^2}$$

Assim

$$\mathcal{Z}_{\mathcal{N}}(\sigma_2)\geq e^{-\frac{1}{2}\sum_{\rho\in\mathcal{N}}(z_1(\rho)+z_2(\rho))[\sigma_2(\rho)]^2_{2\pi}}\int\prod_{\rho\in\mathcal{N}}e^{-S(\rho,\phi)}[1+z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho})]\,d\mu_\beta(\phi)$$

Como a função $S(\rho,\phi)$ é ímpar em ϕ, a desigualdade de Jensen naquela variável dá

$$\mathcal{Z}_{\mathcal{N}}(\sigma_2)\geq\sum_{\rho\in\mathcal{N}}c_{\mathcal{N}}e^{-[\max_\phi S(\rho,\phi)]}\int\prod_{\rho\in\mathcal{N}}[1+z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho})]\,d\mu_\beta(\phi)$$

Uma vez que

$$S(\rho,\phi)\leq C\sum_{\rho\in\mathcal{N}}z(\rho)[\sigma_2(\rho)|\bmod 2\pi]^2$$

para alguma constant C, contanto que β seja tão grande que $z(\rho)<1$, obtemos

$$\mathcal{Z}_{\mathcal{N}}(\sigma_2)\geq e^{-\frac{1}{2}\sum_{\rho\in\mathcal{N}}(z_1(\rho)+z_2(\rho))[\sigma_2(\rho)]^2_{2\pi}}\int\prod_{\rho\in\mathcal{N}}[1+z(\rho)\cos\phi(\bar{\rho})]\,d\mu_\beta(\phi)\quad(4.8)$$

É possível encontrar um limite superior para

$$(z_1(\rho)+z_2(\rho))[\sigma_2]^2_{2\pi}$$

usando linearidade de $\sigma_2(\rho)$ nas cargas e neutralidade de ρ.
Pela neutralidade, podemos denotamos por p_μ e n_μ sítios contidos no suporte de ρ, tais que

$$p_\mu \in \{j : \rho(j) > 0\}, \quad n_\mu \in \{j : \rho(j) > 0\}$$

e escrevemos

$$\sigma_2(\rho) = \sum_\mu [\sigma_2(p_\mu) - \sigma_2(n_\mu)]$$

onde a soma em μ contém $\frac{1}{2}\sum_j \rho(j)$ termos. Lembrando que é sempre possível representar uma densidade arbitrária de carga como o divergente de um campo vetorial ϵ, escrevemos

$$\sigma_2(p_\mu) - \sigma_2(n_\mu) = \sum_j \{\epsilon_1(j)\partial_1\sigma_2(j) + \epsilon_2(j)\partial_2\sigma_2(j)\}$$

onde $\epsilon_k = 0, \pm 1$, $\sup \epsilon_k \subset D(\rho)$, para $k = 1, 2$, com

$$\sum_j \{\|\epsilon_1(j)\| + \|\epsilon_2(j)\|\} \leq 2d(\rho)$$

Da definição de $\sigma_2(\rho)$ vem

$$\xi^{-1}(\partial_1\sigma_2)(j_1, j_2) = \partial_2[C(j_1, j_2) - C(j_1 - x, j_2)]$$

e

$$\xi^{-1}(\partial_2\sigma_2)(j_1, j_2) = -f^x(j_1, j_2) + \partial_1[C(j_1, j_2) - C(j_1 - x, j_2)]$$

Logo, temos um limite superior da forma

$$(z_1(\rho) + z_2(\rho))[\sigma_2]^2_{2\pi} \leq z(d(\rho)\log d(\rho))^2\xi^2|\Delta\sigma_2|^2$$

onde $d(\rho)$ é o diâmetro do suporte de ρ, o qual em nosso caso é $(4/3L_k)^2$.
Conforme as renormalizações das atividades do gás, vimos que, para β suficientemente grande, há sempre uma constante t tal que

$$z \leq \exp(-t\log L_k)\exp(-C_\beta|\rho|^2)$$

Substituindo esses valores em (4.8) obtemos, para $|z| < 1/4$,

$$\begin{aligned}\langle D^\xi_{0x}(\beta, \lambda)\rangle &\leq e^{G(x)}e^{-(1/2)L_k^{(2-t)}}e^{-\beta^{-1}\xi^2\delta[C(0)-C(x)]} \\ &\leq e^{-(\xi^2/2\beta)\log(1+|x|)}\end{aligned}$$

para $\delta < 1$, o que completa o argumento.

Capítulo 5

Rotores Quânticos

Para esta apresentação procuramos ser o mais geral possível quanto à escolha do sistema de rotores que escolheremos. O único requerimento imposto ao Hamiltoniano dos rotores é que seu potencial seja periódico. A análise do modelo tem duas partes. Primeiro, usamos uma representação de espaço de fase – por meio da fórmula de Trotter – para mapear o sistema quântico unidimensional em um sistema clássico bidimensional. Como exemplo, escrevemos a função de partição de rotores cujo Hamiltoniano tem parte cinética quadrática no momento angular e interação da forma co-senoidal.
Em seguida, por meio de uma transformação de dualidade aplicada ao sistema clássico, obtemos a função de partição do gás no espaço dual (A transformação de dualidade é tema do próximo capítulo). Dessa representação passamos à representação das cargas, na qual a função de partição obtida é aquela de um gás interagente através de um potencial geral em duas dimensões, dependente das funções que definem o Hamiltoniano os rotores.

5.1 A Função de Partição

Seja Λ um subconjunto finito de $\mathbf{Z}$. A cada ponto $x \in \mathbf{Z}$ está associada uma variável $\theta(x) \epsilon [-\pi, \pi]$, a coordenada angular do rotor. Seja[1] $p(x) = -\imath \frac{\partial}{\partial \theta(x)}$ o momento angular conjugado à variável $\theta(x)$. Vamos definir o Hamiltoniano de um sistema de N rotores em termos de funções arbitrárias tanto para a parte cinética quanto para a parte da interação do Hamiltoniano. Assim,

[1] $\hbar = 1$

para esses rotores em $\Lambda = \mathbf{Z} \cap [-N, N]$ definimos

$$\mathcal{H} = \sum_{x=-N}^{N} f(p(x)) - \sum_{x=-N}^{N} V(\theta(x) - \theta(x+1))$$

Periodicidade em θ é a única condição que impomos à interação . O operador $p(x)$ é tomado com condições periódicas de contorno, de modo que seu espectro é discreto $\{k_x,\ k_x \in \mathbf{Z}\}$, e satisfaz as relações de comutação :

$$[p(x), \theta(y)] = -\imath\delta_{xy}$$

O sistema é tomado com condições periódicas de contorno, $\theta(N+1) = \theta(-N)$. O Hamiltoniano age no espaço de Hilbert $L^2([-\pi, +\pi]^{|\Lambda|})$, ou seja, o espaço de $N = |\Lambda|$ partículas movendo-se em círculo.

Lema 5.1 A função de partição do modelo de rotores quânticos em d=1 dimensão pode ser escrita como uma função de partição de um gás clássico em d=2 dimensões, cuja medida do estado de equilíbrio é dado por

$$Z_\Lambda^{-1} \prod_{x,t} d\theta(x,t) \sum_{m(x,t)} F_n(\theta(x, t + \frac{1}{n}) - \theta(x,t)) e^{-\frac{V}{n}(\theta(x,t) - \theta(x+1,t))}$$

onde

$$F_n(\theta, m_t(x)) = \int dp_t(x) e^{-\frac{f(p_t(x))}{n}} e^{\imath p_t(x)(\theta_t(x) - \theta_s(x) + 2\pi m_t(x))}$$

e $m_t(x)$ são números inteiros.
Para mostrar esse resultado, partimos da definição da função de partição do modelo:

$$Z = Tr[\exp -\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{V})] \tag{5.1}$$

onde usamos a notação

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{x=-N}^{N} f(p(x))$$

e

$$\mathcal{V} = \sum_{x=-N}^{N} V(\theta(x) - \theta(x+1)).$$

Para calcular (5.1) adotamos a base que diagonaliza $\mathcal{V}$, que é

$$|\theta\rangle = \prod_{x=-N}^{N} |\theta(x)\rangle$$

e com a qual podemos efetuar o cálculo explícito do traço acima:

$$\mathcal{Z} = \int_{[-\pi,\pi]}^{N} D\theta \langle\theta| \exp -\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{V})|\theta\rangle.$$

onde

$$D\theta = \prod_{x=1}^{N} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta(x)$$

Para reduzir o problema de tratar com operadores que não comutam a um problema semelhante ao problema clássico em uma dimensão maior, fazemos uso da fórmula de Trotter.

Lema 5.2 Para operadores A, B limitados inferiormente

$$e^{A+B} = \lim_{n\to\infty} (e^{A/n} e^{B/n})^n$$

Prova. (Ver [10]) Escrevemos, então

$$e^{-\beta(\mathcal{H}_0+\mathcal{V})} = \lim_{n\to\infty} (e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{n}} \; e^{-\frac{\mathcal{V}}{n}})^{\beta n} \tag{5.2}$$

Vamos supor que βn seja inteiro.[2]
Ao efetuar o cálculo acima inserimos a decomposição da unidade

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta_t |\theta_t\rangle\langle\theta_t|$$

entre cada um dos $n\beta - 1$ pares de fatores do produto de exponenciais que forma $e^{\mathcal{H}}$.
Chegamos à representação

$$\prod_{x=1}^{N} \prod_{t=0}^{\beta n-1} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_t(x) \langle\theta_t(x)| e^{-\frac{f(p(x))}{n}} e^{-\frac{V(\theta(x))}{n}} |\theta_{t+1}(x)\rangle$$

com a condição de periodicidade $\theta_0 = \theta_{\beta n}$.[3]
Já que V é diagonal na base escolhida, temos

$$\prod_{x,t} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_t(x) \langle\theta_t(x)| e^{-\frac{f(p(x))}{n}} |\theta_{t+1}(x)\rangle e^{-\frac{\beta V}{n}(\theta_t(x)-\theta_t(x)}$$

[2]Isso é so uma conveniência aqui. Adiante faremos β qualquer.

[3]A partir daqui quando se escrever o produtório de x e t entenda-se produto em $-N \leq x \leq N$, e $0 \leq t \leq \beta n - 1$.

O cálculo de cada $\langle\theta_t(x)|\exp[-\frac{f(p(x))}{n}]|\theta_s(x)\rangle$ é idêntico àquele do valor esperado, na representação das coordenadas, de uma função do momento de uma partícula movendo-se em círculo. Efetuamo-lo assim

$$\langle\theta_t|e^{-\frac{f(p(x))}{n}}|\theta_s\rangle = \sum_{p_t(x)\in Z} e^{-\frac{f(p_t(x))}{n}}\langle\theta_t(x)|p_t(x)\rangle\langle p_t(x)|\theta_s(x)\rangle$$

Substituindo o valor esperado

$$\langle\theta_t(x)|p_t(x)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ip_t(x)\theta_t(x)}$$

vem

$$\sum_{p_t(x)} e^{-\frac{f(p_t(x))}{n}}e^{ip_t(x)(\theta_t(x)-\theta_s(x))}$$

A fórmula de Poisson nos garante que é lícito integrar nas variáveis p, como se contínuas fossem, contanto que alteremos o argumento em θ do que está para

$$\theta_t(x) - \theta_s(x) + 2\pi m_t(x)$$

com $m_t(x)$ inteiro, e acrescentemos uma soma externa sobre $m_t(x)$[4]:

$$\sum_{m_t(x)\in Z}\int dp_t(x)e^{-\frac{f(p_t(x))}{n}}e^{ip_t(x)(\theta_t(x)-\theta_s(x)+2\pi m_t(x))}$$

Seja $F_n(\theta, m_y(x))$ é a transformada de Fourier de da parte cinética do Hamiltoniano:

$$F_n(\theta, m_t(x)) = \int dp_t(x)e^{-\frac{f(p_t(x))}{n}}e^{ip_t(x)(\theta_t(x)-\theta_s(x)+2\pi m_t(x))}$$

A função de partição fica

$$\mathcal{Z} = \int_{-\pi}^{\pi} D\theta \prod_{x,t}\sum_{m(x,t)} F_n(\theta_t(x) - \theta_s(x))e^{-\frac{V}{n}(\theta_t(x)-\theta_{t+1}(x))} \tag{5.3}$$

com condições periódicas de contorno $\theta_0(x) = \theta_{\beta n}(x)$.

Um passo para a simplificação dessa fórmula consiste em descrever cada

[4]Estamos eliminamos constantes desnecessárias

possível conjunto de valores de $\theta_t(x)$ como um campo bidimensional, introduzindo uma nova variável na direção 'temporal'

$$\theta_t(x) \longrightarrow \theta(x,t)$$

Simultaneamente, fazemos um reescalonamento da variável t da forma

$$t \rightarrow \frac{t}{n} - \frac{\beta}{2}$$

de modo a termos uma estrutura de teoria no contínuo. Correspondentemente temos

$$\theta = \{\theta(x,t), x \in \Lambda, t \in \frac{\mathbf{Z}}{n} \cap [-\frac{\beta}{2}, \frac{\beta}{2}]\}$$

Assim se completa a correspondência entre o modelo quântico unidimensional e o modelo clássico bidimensional.

5.2 Exemplos de Rotores Planos

O potencial do rotor plano é descrito pela interação

$$\mathcal{V} = J \sum_{x=-N}^{N} \cos(\theta(x) - \theta(x+1))$$

com acoplamento ferromagético, $J > 0$.
Dois exemplos de formas admissíveis para o termo cinético são

1. O Módulo. Seja

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{x=-N}^{N} \frac{|p(x)|}{2I}$$

onde I é o momento de inércia de cada rotor da rede.
A função de partição é dada por[5]

$$\mathcal{Z} = \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{x,t} v_l(\theta(x,t) - \theta(x,t+\frac{1}{n}))\, v_J(\theta(x,t) - \theta(x+1,t))\, d\theta(x,t) \quad (5.4)$$

[5]Note que devido ao reescalonamento na variável t, o produtório corre em $-N \leq x \leq N$ e $-\frac{\beta}{2} \leq t \leq \frac{\beta}{2}$.

com

$$v_I(\theta(x,t) - \theta(x,t+\frac{1}{n})) = \sum_{m_0} \frac{-(1/In)}{(1/2In)^2 + [\theta(x,t) - \theta(x,t+\frac{1}{n}) + 2\pi m_0(x,t)]^2}$$

e

$$v_J(\theta(x,t) - \theta(x+1,t)) = \exp\{-\frac{J}{n}\cos(\theta(x,t) - \theta(x+1,t))\}$$

onde $m = \{m(x,t), x \in \Lambda, t \in \frac{\mathbb{Z}}{n} \cap [-\frac{\beta}{2}, \frac{\beta}{2}]\}$.

2 Fn¸cẽs Qar aticas Seja

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{x=-N}^{N} \frac{p^2(x)}{2I}$$

Nesse caso a função de partição ainda toma a forma (5.4), com

$$v_I(\theta(x,t) - \theta(x,t+\frac{1}{n})) = \sum_{m_0} \exp\{-\frac{In}{2\beta}[\theta(x,t) - \theta(x,t+\frac{1}{n}) + 2\pi m_0(x,t)]^2\}$$

onde $m = \{m(x,t), x \in \Lambda, t \in \frac{\mathbb{Z}}{n} \cap [-\frac{\beta}{2}, \frac{\beta}{2}]\}$.

Klein e Perez [33] têm resultados de localização do estado fundamental desses rotores com momentos de inércia aleatórios.

5.3 A Aproximação de Villain

A interação de Villain é obtida pela substituição da forma de co-seno da interação por uma gaussiana periodizada. Note que na função de partição do rotor plano dada na seção anterior, a forma de Villain foi tomada na direção temporal. Neste ponto, gostaríamos de adotar o potencial de Villain também na direção espacial. Villain determiniou as condições para que a função

$$e^{z\cos\theta}$$

pudesse ser aproximada por

$$\sum_{m\in Z} e^{-\gamma(z)(\theta+2\pi m)^2}$$

onde, em nosso caso, $z = \frac{J}{n}$, e $\gamma(z)$ é uma constante a ser determinada.
O resultado é a identificação [12], [19].

$$\gamma(z) = \begin{cases} \frac{z}{2}(1 - \frac{1}{2z}) & \text{para } z \to \infty \\ \frac{1}{4 \log \frac{2}{z}} & \text{para } z \to 0 \end{cases}$$

Em nosso caso $z = J/n$ é pequeno. No entanto, vamos desconsiderar isso, e adotar a aproximação para $z \gg 1$ assim mesmo. Em essência estamos mudando nosso sistema inicial. O efeito disso será trocar a dependência de $\gamma(z)$ de $1/\log n$ para $1/n$. Esta última forma é mais adequada para a realização de transformações de dualidade que faremos no *Capítulo 6*
Assim, em vez do co-seno, a nova interação será dada por

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-(z/2)(\theta_i - \theta_j + 2\pi m)^2}$$

Repetindo o raciocínio para cada para da interação , vem

$$\exp -\frac{\mathcal{V}(\theta)}{n} = \prod_x \sum_{m(x)=-\infty}^{\infty} \exp -\frac{J}{2n}[\theta(x) - \theta(x+1) + 2\pi m(x)]^2$$

com $m(x)$ inteiro.
Note que essa transformação preserva a simetria do problema, no sentido de que em baixas temperaturas os dois modelos tem o mesmo comportamento. O novo potencial possui a simetria abeliana global na variable θ.
Nessa aproximação a função de partição pode ser escrita como

$$\mathcal{Z} = \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{x,t} v_I(\theta(x,t) - \theta(x, t + \frac{1}{n}))\, v_J(\theta(x,t) - \theta(x+1,t))\, d\theta(x,t) \quad (5.5)$$

com

$$v_I(\theta(x,t) - \theta(x, t + \frac{1}{n}) = \sum_{m_0} \exp\{-\frac{In}{2}[\theta(x,t) - \theta(x, t + \frac{1}{n}) + 2\pi m_0(x,t)]^2\}$$

e

$$v_J(\theta(x,t) - \theta(x+1,t)) = \sum_m \exp\{-\frac{J}{2n}[\theta(x,t) - \theta(x+1,t) + 2\pi m(x,t)]^2\}$$

onde $m = \{m(x,t), x \in \Lambda, t \in \frac{\mathbb{Z}}{n} \cap [-\frac{\beta}{2}, \frac{\beta}{2}]\}$.

Observação . Há uma formulação alternativa do problema que consiste em preservar a temperatura inversa β como parâmetro explícito na fórmula de Trotter. Seguindo esse caminho, em vez de (5.2), obtemos

$$e^{-\beta(\mathcal{H}_0+\mathcal{V})} = \lim_{n\to\infty}(e^{-\frac{\beta\mathcal{H}_0}{n}}\ e^{-\frac{\beta\mathcal{V}}{n}})^n$$

Com isso a função de partição (5.3) fica

$$\mathcal{Z} = \int_{-\pi}^{\pi} D\theta \prod_{x,t} \sum_{m(x,t)} F_n(\theta_t(x) - \theta_s(x), m_t(x)) e^{-\frac{\beta\mathcal{V}}{n}(\theta_t(x)-\theta_{t+1}(x))} \tag{5.6}$$

com

$$F_n(\theta, m_t(x)) = \int dp_t(x) e^{-\frac{\beta f(p_t(x))}{n}} e^{ip_t(x)(\theta_t(x)-\theta_s(x)+2\pi m_t(x))} \tag{5.7}$$

onde a variável t assume valores de 0 a n. Aqui também cabe introduzir uma nova variável na direção temporal pelo reescalonamento de t, agora da forma

$$t \to \frac{\beta}{n}t - \frac{\beta}{2}$$

A função de partição passa a ser dada por

$$\mathcal{Z} = \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{x,t} v_I(\theta(x,t) - \theta(x, t+\frac{\beta}{n}))\ v_J(\theta(x,t) - \theta(x+1,t))\ d\theta(x,t) \tag{5.8}$$

com

$$v_I(\theta(x,t) - \theta(x,t+\frac{\beta}{n}) = \sum_{m_0} \exp\{-\frac{In}{2\beta}[\theta(x,t) - \theta(x,t+\frac{\beta}{n}) + 2\pi m_0(x,t)]^2\}$$

e

$$v_J(\theta(x,t) - \theta(x+1,t)) = \sum_{m} \exp\{-\frac{J\beta}{2n}[\theta(x,t) - \theta(x+1,t) + 2\pi m(x,t)]^2\}$$

Correspondentemente temos

$$\theta = \{\theta(x,t), x \in \Lambda, t \in \frac{\beta\mathbf{Z}}{n} \cap [-\frac{\beta}{2}, \frac{\beta}{2}]\}$$

De agora em diante vamos trabalhar nessa rede de espaçamento unitário na direção x, e espaçamento $\delta = \beta/n$ na direção temporal.

5.4 A Estimativa de McBryan-Spencer

Essa estimativa é uma garantia de que não há transição de primeira ordem, embora nada se possa afirmar acerca de transicões de ordens mais altas. Os ingredientes da prova são periodicidade e analiticidade. Nosso resultado é de mesma natureza daquele obtido em [33], exceto que aqueles autores consideraram a forma do co-seno do potencial, sem aproximações . No entanto a translação complexa por eles efetuada é função do tempo apenas. Em nosso caso, podemos realizar uma translação arbitrária.

Teorema 5.3 Seja

$$G^{(n)}_{\Lambda,\beta}((y,s),(y',s')) = \langle e^{\imath(\theta(y,s)-\theta(y',s')}\rangle^{(n)}_{\Lambda,\beta}$$

onde $\langle\cdot\rangle^{(n)}_{\Lambda,\beta}$ é o valor esperado com relação à medida dada em (5.8).
Seja $G((y,s),(y',s'))$ o limite de $G^{(n)}_{\Lambda,\beta}((y,s),(y',s'))$ quando $\Lambda,\beta,n\to\infty$.
Então

$$G((y,s),(y',s')) \leq e^{-\sqrt{\frac{IJ}{4\pi^2}}\ln\sqrt{(y-y')^2+(J/I)(s-s')^2}}$$

Prova. Seja $a(x,t)$ uma função quadraticamente integrável. Fazemos a translação complexa [33]

$$\theta(x,t)\to\theta(x,t)+\imath a(x,t)$$

nas variáveis de integração na expressão da função de correlação . Aqui a é real e será escolhido logo adiante. Substituindo a translação acima na função de correlação , obtemos a estimativa

$$\begin{aligned}\langle e^{\imath(\theta(y,s)-\theta(y',s')}\rangle \quad &\leq \quad e^{-(a(y,s)-a(y',s')}e^{-\frac{In}{2\beta}\sum_{x,t}(a(x,t)-a(x,t+\beta/n))^2} \\ &\qquad e^{\frac{J\beta}{2n}\sum_{x,t}(a(x+1,t)-a(x,t))^2}\end{aligned} \tag{5.9}$$

onde os termos complexos foram estimados pelo módulo, $|e^{\imath x}|=1$, e a função de partição no denominador foi cancelada.
O lado direito de (5.9) pode ser escrito como forma quadrática

$$\langle e^{\imath(\theta(y,s)-\theta(y',s')}\rangle \leq e^{-(a(y,s)-a(y',s'))}e^{-\frac{\beta}{2n}(a,-\Delta a)}$$

onde definimos o produto escalar por

$$(f,g) = \sum_{x,t} f(x,t)g(x,t)$$

e Δ é o Laplaciano de diferença finita em duas dimensões, dado por

$$-\Delta = J\partial_1^*\partial_1 + I\partial_2^*\partial_2$$

onde ∂^* é o operador adjunto definido em (2.5)

$$\partial_1 f(x,t) = f(x+1,t) - f(x,t)$$

e

$$\partial_2 f(x,t) = \frac{f(x,t+\delta) - f(x,t)}{\delta}$$

Desse modo temos que

$$\begin{aligned} -\Delta f(x,t) &= 2f(x,y) - f(x+1,t) - f(x-1,t) \\ &+ \delta^{-2}(2f(x,t) - f(x,t+\delta) - f(x,t-\delta)) \end{aligned} \tag{5.10}$$

Escolhemos

$$a(x,t) = C(x-y,t-s) - C(x-y',t-s')$$

onde $C(x,t)$ é a função de Green do operador Δ, dada por

$$C(x-y,t-s) = \frac{1}{2N+1}\frac{1}{\beta}\sum_{p,q}\frac{\exp(ip(x-y)+q(t-s))}{I^{-1}(2-2\cos p)+J^{-1}\delta^{-2}(2-2\cos q\delta)} \tag{5.11}$$

com

$$p = \frac{2\pi}{2N+1}m_1, \qquad -N \le m_1 \le N$$

e

$$q = \frac{2\pi}{\beta}m_2, \qquad -\frac{n}{2} \le m_2 \le \frac{n}{2}$$

Então

$$(a,-\Delta a) = a(y,s) - a(y',s')$$

Obtemos

$$\begin{aligned}\langle e^{i(\theta(y,s)-\theta(y',s'))}\rangle &\leq e^{-(a(y,s)-a(y',s')}e^{(1/2)(a(y,s)-a(y',s'))}\\ &\leq e^{-(1/2)(a(y,s)-a(y',s'))}\end{aligned}$$

Agora

$$a(y,s)-a(y',s')=2(C(0,0)-C(y-y',s-s'))$$

O comportamento assintótico da diferença $C(0,0)-C(y-y',s-s')$ quando $n\to\infty$ é calculado no **Apêndice B** para o caso especial em que $s-s'=0$. O resultado geral, no entanto, pode ser facilmente deduzido da exposição que damos lá. A conclusão é que para $|y-y'|,|s-s'|$ suficientemente grandes $C(0,0)-C(y-y',s-s')$, é bem aproximado pelo propagador escalar contínuo sem massa em duas dimensões [20]. Logo,

$$\begin{aligned}\langle e^{i(\theta(y,s)-\theta(y',s'))}\rangle &\leq e^{2(C(y-y',s-s')-C(0,0))}\\ &\leq e^{-\sqrt{\frac{IJ}{\pi^2}}\ln\sqrt{(y-y')^2+(J/I)(s-s')^2}}\end{aligned} \tag{5.12}$$

□

Capítulo 6

A Transformação de Dualidade

Por transformação de dualidade entendemos o estudo de modelos duais ao Villain, os quais são obtidos por transformações de Fourier nas variáveis angulares da função de partição (5.6):

$$Z = \int_{-\pi}^{\pi} D\theta \prod_{x,t} \sum_{m(x,t)} F_n(\theta_t(x) - \theta_s(x)) e^{-\frac{\beta V}{n}(\theta_t(x) - \theta_{t+1}(x))}$$

onde $F_n(\theta)$ é dado em (5.7), e V é ainda da forma co-seno.
A rede dual é construída pelo deslocamento dos sítios da rede original por metade do espaçamento de rede em todas as direções simultaneamente.
Consideramos o modelo em uma caixa retangular Λ com condições livres de contorno em $\partial\Lambda$. A cada par de vizinhos mais próximos $\{(x,t)(x',t')\}$ associamos funções com período 2π.

6.1 Transformada de Fourier

Partimos da função de partição como obtida no capítulo anterior, e representamos tanto $F_n(\theta)$ quanto o potencial pelas respectivas transformadas de Fourier.
Os coeficientes da transformada de Fourier de $F_n(\theta)$ têm a forma original da parte cinética da interação , a única alteração é que a variável agora não é mais p, mas um *bond* (pares de vizinhos mais próximos) $k_{x,t}$:

$$F_n(k_{x,t}) = e^{-\frac{\beta f(k_{x,t})}{n}} \tag{6.1}$$

Já para o potencial admitiremos a seguinte expansão

$$(e^{-\beta V(\theta)})^{1/n} = \sum_{l_{x,t}\in Z} g_n(l_{x,t}) e^{il_{x,t}(\theta(x,t)-\theta(x+1,t))} \tag{6.2}$$

$k_{x,t}$ e $l_{x,t}$ são variáveis orientadas de *bond* direcionados de (x,t) a (x,t+1), e de (x,t) a (x+1,t) respectivamente.[1] Em teoria de *gauge* na rede, as variáveis fundamentais são definidas sobre *bonds*.
Substituimos a expressão acima na função de partição (5.6), resulta

$$\mathcal{Z}_\Lambda = \int_{-\pi}^{\pi} d\Theta \prod_{x,t} \sum_{k_{x,t},l_{x,t}} e^{-\frac{\beta f(k_{x,t})}{n}} g_n(l_{x,t}) e^{i[k_{x,t}(\theta(x,t)-\theta(x+1,t))+l_{x,t}(\theta(x,t)-\theta(x,t+1))]}$$

A integral em θ gera funções deltas:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \prod_{x,t} d\theta(x,t) e^{i\theta(x,t)(\partial_x k_{x,t}+\partial_t l_{x,t})} = \prod_{x,t} \delta(\partial_x k + \partial_t l)$$

Agora, estabelecemos uma correspondência entre as variáveis de *bond* e variáveis inteiras definidas no centro de uma curva fechada formada por quatro *bonds* (plaquetas). Isso vai nos permitir eliminar a restrição da soma sobre valores das variáveis de *bond* que aparece devido à condição de divergência zero.
Usamos a versão na rede do lema de Poincaré

$$*\partial * u = 0 \rightarrow u = *\partial\phi$$

onde u é um campo vetorial $(1 - form)$ na rede, e ϕ é um $(\nu - 2) - form$, ou um campo escalar em $\nu = 2$.
Temos

$$\partial u = 0, \;\; u = \partial m$$

com m um *2-form*. Então, fazendo $m = *\phi$,

$$u = \partial m = \partial * \phi = *\partial\phi$$

Estabelecemos a correspondência nesse novo conjunto de variáveis definidas no centro dos sítios da rede dual $\Lambda^* = \Lambda + (1/2, 1/2)$

$$\begin{aligned} l_{x^*,t^*} &= \phi(x^*,t^*) - \phi(x^*+1,t^*) \\ k_{x^*,t^*} &= \phi(x^*,t^*) - \phi(x^*,t^*+1) \end{aligned} \tag{6.3}$$

[1]Para evitar confusão e salientar o carácter de variável de *bond*, deveríamos escrever $k_{(x,t)(x,t+1)}$ e $l_{(x,t)(x+1,t)}$ A notação ficaria ruim, no entanto.

As restrições são satisfeitas automaticamente nessas novas variáveis e, substituindo as expressões (6.3) na função de partição acima, obtemos[2]

$$Z_\Lambda = \sum_{\phi \in Z^{L \times n}} \prod_{x,t} d\phi(x,t) e^{-\frac{\beta f(\partial_x \phi)}{n}} g_n(\partial_t \phi) \tag{6.4}$$

onde a soma é irrestrita sobre as variáveis da rede dual.[3]
Para escrever a função de partição na forma integral, impomos a condição de integrabilidade em ϕ através de funções deltas:

$$Z_\Lambda = \int \prod_{x,t} \{ \sum_{m(x,t)} \delta(\phi(x,t) - m(x,t)) \} d\mu_{f,g}(\phi) \tag{6.5}$$

onde

$$d\mu_{f,g}(\phi) = \prod_{x,t} d\phi(x,t) e^{-\frac{\beta f(\partial_x \phi)}{n}} g_n(\partial_t \phi)$$

A função *delta* periodizada pode ser expandida em série de Fourier. Isso dá[4]

$$\prod_{x,t} \{ \sum_{m(x,t)} \delta(\phi(x,t) - m(x,t)) \} = \sum_{q \in Z} e^{i2\pi(\phi,q)} \tag{6.6}$$

onde

$$(\phi, q) = \sum_{x,t} \phi(x,t) q(x,t)$$

De forma que

$$Z_\Lambda = \int \prod_{x,t} \{ \sum_{q(x,t)} e^{i2\pi(\phi,q)} \} d\mu_{f,g}(\phi) \tag{6.7}$$

ou

$$Z_\Lambda = \int \prod_{x,t} (1 + 2 \sum_{q(x,t) \in Z} \cos 2\pi \phi(x,t) q(x,t)) d\mu_{f,g}(\phi) \tag{6.8}$$

---

[2]Voltamos a usar x e t para representar os sítios da rede dual.

[3]Uma prova alternativa é esta: Seja $\vec{u}_{x,t} = (l_{x,t}, \frac{1}{n} k_{x,t})$ cujo divergente é nulo. Construímos, a partir de $\vec{u}_{x,t}$, o vetor $\vec{v}_{x,t} = (-\frac{1}{n} k_{x,t}, l_{x,t})$, cujo rotacional é zero. É sempre possível escolher $\vec{v}$ como o gradiente de um campo escalar M, de modo que $l_{x,t} = n(M(x,t) - M(x+1,t))$ e $k_{x,t} = n(M(x,t) - M(x,t+1))$. Como $M \in \frac{Q}{n}$, com $\phi \in Z$, temos (6.4) de novo.

[4]Quando $d\mu_{\nu,f}$ é uma medida gaussiana com média f e covariância ν a substituição da série de Fourier pela soma sobre m na função de partição , perfazendo a integração em ϕ, dá a representação de Blanks do gás de Coulomb [14]: $Z = \sum_{q \in Z} e^{i(q,f)} e^{-\frac{1}{2}(q,\nu q)}$.

Essa fórmula é uma prescrição para obter a função de partição dado o Hamiltoniano. A parte cinética se reproduz na função de partição – apenas seu argumento muda de $p(x)$ para $\partial_x(x,t)$. Quanto ao potencial, toma-se a sua transformada de Fourier – alterando-lhe o argumento de θ para $\partial_t(x,t)$.
O potencial original é de fato uma função da derivada espacial de θ na rede de espaçamento unitário. Após a transformação de dualidade essa função passou a depender da derivada da nova variável na direção extra que surgiu como decorrência da aplicação da fórmula de Trotter. Isso ocorre porque a transformação de dualidade troca *bonds* horizontais e verticais.

6.2 O Modelo Dual de Villain e a Representação das Cargas

Vamos nos restringir ao segundo modelo dado na **seção 5.2** – cuja parte cinética são funções quadráticas do momento angular –, com a aproximação de Villain para o potencial. Para esse modelo, a função de partição é dada em (5.8). A transformação de dualidade que leva a (6.8) fornece aqui

$$Z_\Lambda(x) = \int \prod_{x,t} \{ \sum_{\{q(x,t)\}} e^{i2\pi(\phi,q)} \} e^{-\frac{\delta}{2}(\phi,-\Delta\phi)} \tag{6.9}$$

onde o índice v indica a medida de Villain

$$d\mu_v(\phi) = e^{\frac{-\delta}{2}\sum_{x,t}\{\frac{1}{I}(\phi(x,t)-\phi(x+1,t))^2+\frac{1}{J}(\frac{\phi(x,t)-\phi(x,t+\beta/n)}{\beta/n})^2\}} D\phi \tag{6.10}$$

com $D\phi = \prod_{x,t} d\phi(x,t)$.

Estamos usando a notação de produto escalar da **seção 5.4**, com laplaciano dado por

$$-\Delta = \frac{1}{I}\partial_1^*\partial_1 + \frac{1}{J}\partial_2^*\partial_2 \tag{6.11}$$

Efetuando a integral Gaussiana (6.10), obtemos a função de partição na representação das cargas. Usamos a identidade

$$\int e^{i(\phi,q)} d\mu_v(\phi) = \int e^{-\frac{1}{2}(q,(-\Delta)^{-1}q)} \prod_{x,t} d\lambda(q(x,t)) \tag{6.12}$$

onde

$$d\lambda(q) = \sum_{m\in} \delta(q - 2\pi m)dq$$

Na representação das cargas a função de partição é

$$\mathcal{Z} = \int e^{-\frac{1}{2}(q,-\Delta^{-1}q)} \prod_{x,t} d\lambda(q(x,t)) \tag{6.13}$$

O problema está então mapeado em um problema de cargas interagentes – com neutralidade elétrical geral– através de um potencial de Coulomb.

6.3 Estimativa da Correlação entre Cargas Externas

O resultado desta seção é de mesma natureza daquele apresentado sem provas na seção 3.3 para a correlação de gases clássicos, mas claro que levando em conta os limites a serem tomados.
Dado o gás de Villain cuja função de partição é (6.13), colocamos no sistema duas cargas fracionárias, uma $+\xi$, situada na origem, outra, $-\xi$, situada em x. Na presença dessas cargas externas a função de partição passa a ser

$$\mathcal{Z}^{\xi}(x) = \int e^{-(1/2)(q_\Lambda+\rho(y,t),-\Delta^{-1}(q_\Lambda+\rho(y,t)))} \prod_{y,t} d\lambda q(y,t)$$

onde

$$\rho(y,t) = \xi(\delta_{y0} - \delta_{yx})\delta_{t0}$$

A função de correlação é dada por

$$G^{\xi}_{\Lambda}(x) = \mathcal{Z}^{-1} \int e^{-(1/2)E(q_\Lambda+\rho(y,t))} \prod_{y,t\in\Lambda} d\lambda(q(y,t))$$

onde

$$E(q_\Lambda + \rho(y,t)) = (1/2)(q_\Lambda + \rho(y,t), -\Delta^{-1}(q_\Lambda + \rho(y,t)))$$

Podemos escrever a função de correlação como

$$G^{\xi}_{\Lambda}(x) = \int e^{-(1/2)[E(q_\Lambda+\rho(y,t))-E(q_\Lambda)]} d\lambda'(q_\Lambda)$$

onde

$$d\lambda'(q_\Lambda) = Z^{-1}e^{-(1/2)E(q_\Lambda)} \prod_{y,t\in\Lambda} d\lambda(q(y,t))$$

Aplicamos a desigualdade de Jensen na variável q para obter

$$G^\xi_\Lambda(x) \geq e^{-(1/2)\int[E(q_\Lambda+\rho(y,t))-E(q_\Lambda)]d\lambda'(q_\Lambda)}$$

Expandindo o expoente $E(q_\Lambda + \rho(y,t)) - E(q_\Lambda)$, obtemos

$$G^\xi_\Lambda(x) \geq e^{-(1/2)\int d\lambda'(q_\Lambda)((q_\Lambda,(-\Delta)^{-1}\rho(y,t))+(\rho(y,t),(-\Delta)^{-1}\rho(y,t)))}$$

Como a nova medida $d\lambda'(q_\Lambda)$ é simétrica e normalizada, obtemos simplesmente

$$G^\xi_\Lambda(x) \geq e^{-(1/2)(\rho(y,t),(-\Delta)^{-1}\rho(y,t))}$$

Temos

$$(\rho(y,t),(-\Delta)^{-1}\rho(y,t)) = 2\xi^2(C(0,0) - C(x,0))$$

No **Apêndice B** calculamos exatamente a diferença entre as funções de Green acima, obtendo

$$C(0,0) - C(x,0) \sim \sqrt{\frac{IJ}{4\pi^2}} \ln|x|$$

Então

$$G^\xi_\Lambda(x) \geq C_\xi e^{-\xi^2\sqrt{\frac{IJ}{4\pi^2}}\ln|x|}$$

com $0 < C_\xi < \infty$. 2 .

6.4 O Operador de Desordem

Na seção 6.1 a transformação de dualidade foi aplicada à função de partição da forma

$$f(\theta) = F_n(\theta)e^{-\frac{V(\theta)}{n}}$$

onde $F_n(\theta)$ é dada por (5.7), e $V(\theta)$ foi definida implicitamente por (6.2). Passamos, então, à representação da funcao de partição no espaço dual (6.5). Note que é também possível obter a função de correlação no espaço dual realizando a transformação de dualidade a uma função convenientemente

escolhida.
Seja ω uma trajetória qualquer de 0 a x. Se definirmos a função

$$f_{x,y}(\theta) = f(\theta)exp[-\imath\chi_{xy}\xi\theta]$$

onde $\chi_{xy} = 1$ se (x, y) é um par de vizinhos mais próximos contidos em ω, orientado de acordo com ω, e $\chi_{xy} = 0$, caso contrário, e a ela aplicarmos a transformação de dualidade, vamos obter a função de correlação $\langle e^{\imath\xi(\theta_0-\theta_x)}\rangle$ na representação de *sine*-Gordon.
A transformação de dualidade nos leva às variáveis duais correspondentes a (6.4)[5]

$$l_{x,t} + \xi\chi_{xy} = \phi(x,t) - \phi(x+1,t)$$

e

$$k_{x,t} + \xi\chi_{xy} = \phi(x,t) - \phi(x,t+1)$$

A função de correlação (5.9) entre os pontos $(y, s) = (0, 0)$ e $(y', s') = (N, 0)$ no espaço dual é então dada por

$$\langle e^{\imath\xi(\theta_0-\theta_N)}\rangle = \sum_{\phi=\{\phi(x,t)\}} \prod_{x,t} e^{-\frac{f(\partial_x\phi+\xi\hat{\chi}_{xy})}{\pi}} g_n(\partial_t\phi + \xi\hat{\chi}_{xy}) \qquad (6.14)$$

onde $\hat{\chi}_{xy} = 1$ quando (x, y) é um par ordenado de vizinhos mais próximos em Λ^*, dual ao um *bond* na trajetória ω, e $\hat{\chi}_{x,y} = 0$ nos outros casos.
Tomando a trajetória ω entre os pontos 0 e N ao longo do eixo x, o valor esperado da correlação para o modelo de Villain pode ser posto em função do valor esperado do operador de desordem:

$$\langle e^{\imath\xi(\theta_0-\theta_N)}\rangle = \langle D^{\xi}_{0N}\rangle$$

onde D^{ξ}_{0N} é o operador de desordem, aqui dado por

$$\hat{D}^{\xi}_{0N}(\phi) = \frac{v(\partial_2\phi + \xi)}{v(\partial_2\phi)}$$

com

$$v(\partial_2\phi) = e^{-\frac{\xi}{2J}\sum_{x,t}(\frac{\phi(x,t)-\phi(x,t+\xi)}{\xi})^2} \qquad (6.15)$$

[5]Deixamos de usar o asterisco para indicar as variáveis do espaço dual.

e $\xi(x,t) = \xi f^N(x,t)$ onde f^N é definida por

$$f^N(x,t) = \begin{cases} 1, & \text{if } 1 \leq x \leq N, \quad t = 0; \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{6.16}$$

de maneira análoga a (2.4), exceto que agora estamos levando em conta o espaçamento δ na direção temporal.
Desenvolvendo (6.15), temos

$$\hat{D}^{\xi}_{0N}(\phi) = e^{-\frac{\delta}{2J}\xi^2 N} e^{-\frac{\xi}{J}\sum_{x=1}^{N}(\phi(x,0)-\phi(x,-\delta))}$$

O valor esperado do operador de desordem é

$$\begin{aligned} \langle \hat{D}^{\xi}_{0N} \rangle &= \int \prod_{x,t} [1 + z(x,t)\cos(2\pi\phi(x,t)q(x,t))] \hat{D}^{\xi}_{0x}(\phi) d\mu_v(\phi) \\ &= e^{-\frac{\delta}{2J}\xi^2|N|} \int \prod_{x,t} [1 + z(x,t)\cos(2\pi\phi(x,t)q(x,t))] e^{\frac{\xi}{J}\xi(\phi,\partial_2 f^N)} d\mu_v(\phi) \end{aligned}$$

onde usamos que

$$(\phi, \partial_2 f^N) = \sum_{x=1}^{N} \frac{\phi(x,-\delta) - \phi(x,0)}{\delta}$$

Efetuamos a translação real $\phi \to \phi + \sigma$, onde $\sigma(x,t) = \frac{\xi}{J}(-\Delta^{-1})\partial_2 f^N(x,t)$. O motivo dessa escolha vai ficar óbvio adiante.
Com a mudança de variável, a medida gaussiana muda para

$$d\mu(\phi + \sigma) = d\mu_v(\phi) e^{-\delta(\phi,-\Delta\sigma) - \frac{\delta}{2}(\sigma,-\Delta\sigma)},$$

enquanto que

$$(\phi + \sigma, \partial_2 f^N) = (\phi, \partial_2 f^N)(\sigma, \partial_2 f^N)$$

Com a translação escolhida, o termo $-(\phi, -\Delta\sigma)$ da medida cancelasse a exponencial de ϕ no integrando do valor esperado:

$$-(\phi, -\Delta\sigma) + \frac{\xi}{J}(\phi, \partial_2 f^N) = 0$$

Quanto ao termo que sobra na medida gaussiana:

$$-\frac{\delta}{2}(\sigma, -\Delta\sigma) = -\frac{\delta\xi}{2J}(\sigma, \partial_2 f^N)$$

Combinado com o fator da exponencial obtemos

$$\langle \hat{D}^{\xi}_{0N} \rangle = e^{-\frac{\delta}{2J}\xi^2|N| + \frac{\delta\xi}{2J}(\sigma, \partial_2 f^N)} \int \prod_{x,t} \{1 + z(x,t)\cos[2\pi(\phi(x,t) + \sigma(x,t))q(x,t)]\} d\mu_v(\phi)$$

Mas

$$\begin{aligned} \frac{\delta\xi}{2J}(\sigma, \partial_2 f^N) &= \frac{\delta\xi}{2J} \sum_{x,t} \sigma(x,t)(\partial_2 f^N)(x,t) \\ &= \frac{\delta\xi}{2J} \sum_{x=1}^{N} \frac{\sigma(x,-\delta) - \sigma(x,0)}{\delta} \end{aligned} \tag{6.17}$$

Temos

$$\begin{aligned} \sigma(x,t) &= \frac{\xi}{J} \sum_{y,s} C(x-y, t-s)(\partial_2 f^N)(y,s) \\ &= \frac{\xi}{J}\frac{1}{\delta} \sum_{y=1}^{N} (C(x-y, t+\delta) - C(x-y,t)) \end{aligned}$$

Logo,

$$\sigma(x,-\delta) - \sigma(x,0) = \frac{\xi}{J}\frac{1}{\delta} \sum_{y=1}^{N} (2C(x-y,0) - C(x-y,\delta) - C(x-y,-\delta))$$

Substituindo a diferença acima em (6.17), obtemos

$$\frac{\delta\xi}{2J}(\sigma, \partial_2 f^N) = \frac{\delta\xi^2}{2J^2} \sum_{x,y=1}^{N} \frac{1}{\delta^2}(2C(x-y,0) - C(x-y,-\delta) - C(x-y,\delta))$$

Usando que (6.11), podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{\delta\xi}{2J}(\sigma, \partial_2 f^N) &= \frac{\delta\xi^2}{2J^2}\{JN \\ &+ \frac{J}{I} \sum_{x,y=1}^{N} (C(x-y+1,0) - 2C(x-y,0) + C(x-y-1,0))\} \end{aligned}$$

A soma acima se reduz à diferença entre os dois pontos $x-1, N$:

$$\frac{\delta\xi}{2J}(\sigma, \partial_2 f^N) = \frac{\delta\xi^2}{2J^2}\{JN - 2\frac{J}{I}(C(0,0) - C(N,0))\}$$

Finalmente,

$$\langle \hat{D}^{\xi}_{0N} \rangle = e^{G(N)} Z(\sigma)$$

onde $G(N)$ é a contribuição de ondas de *spin* ao valor esperado do operador de desordem:

$$G(N) = -\frac{\delta \xi^2}{IJ}(C(0,0) - C(N,0))$$

e

$$Z(\sigma) = \int \prod_{x,t} [1 + z(x,t)\cos(2\pi(\phi(x,t) + \sigma(x,t))q(x,t))] d\mu_v(\phi) \qquad (6.18)$$

6.4.1 Comentários

Partindo da fórmula (6.18), gostaríamos de derivar uma expressão para a função de partição como combinação convexa de estados que descrevem gáses diluídos de multipolos neutros, com a qual poderíamos estimar o valor esperado do operador de desordem. Como vimos no **Capítulo 4**, cada passo do processo consiste em construir ensembles esparsos, o que significa diminuir a densidade do gás. Sabemos que uma alteração na densidade provoca uma mudança na atividade do gás. No caso, estaremos aumentando a atividade. Esse é o custo entrópico do processo. Por outro lado, para que a medida de probabilidade na variável ϕ seja positiva, a atividade do gás não poderá ser maior do que 1. Logo o custo entrópico é compensado pela extração da auto-energia das cargas de cada ensemble, a qual tem de superar o aumento de entropia resultante do agrupamento de cargas em blocos esparsos.
É justamente aqui que o processo falha para o gás de Villain obtido acima. Uma translação complexa $\phi \to \phi + \imath a$ na variável de integração em $Z(\sigma)$ altera a medida para

$$d\mu_v(\phi + \imath a) = d\mu_v(\phi) e^{-\imath \frac{\beta}{n}(\phi, -\Delta a)} e^{-\frac{\delta}{2}(a, -\Delta a)}$$

e a exponencial para

$$e^{\imath(\phi + \imath, q)} = e^{\imath(\phi, q) - (a, q)}$$

Assim

$$Z(\sigma) = e^{-E(a)} \int \prod_{x,t} [1 + z(x,t)\cos(2\pi q(x,t)(\phi(x,t) + \sigma(x,t)))] d\mu_v(\phi)$$

onde

$$E(a) = -(a, q) + \frac{\beta}{2n}||\Delta||(a, a).$$

A maximização de $E(a)$ em relação a a leva ao valor ótimo desse parâmetro

$$a = \frac{n}{\beta||\Delta||}q,$$

para o qual

$$E(a) = \frac{\beta J}{2n}(q, q)$$

onde fizemos $||\Delta|| = \frac{1}{J}(\frac{n}{\beta})^2$.
No caso gaussiano o fator de decaimento é exatamente a função de Green do laplaciano calculada em $(0, 0)$. A dependência em n é

$$C(0, 0) = \int_{-n\pi/\beta}^{n\pi/\beta} \frac{1}{p^2 + q^2} \approx \frac{\beta}{n}$$

Esse fator não gera nenhum decaimento.
Já o custo entrópico de formação de blocos cresce com n. Isso provém do cálculo do número de pontos em um bloco de lado L em um plano cujo espaçamento é unitário na direção horizontal e vale β/n na direção vertical. O número de pontos no interior do bloco é simplesmente

$$\frac{n}{\beta}L^2$$

Logo, para que o método empregado no **capítulo 4** seja funcional, é necessário que a competição energia-entropia se realize favoravelmente da seguinte forma

$$\frac{n}{\beta}L^2 e^{-\frac{\beta J}{2n}(q,q)} < 1$$

para algum J suficientemente grande, porém independente de n, o que não acontece aqui.

6.5 Conclusão

Vale aqui um cometário sobre a utilização da expansão de cluster para obter estimativas de correlação e provar a transição de fase de Kosterlitz-Thouless em outros modelos além do gás de dipolos.

Primeiramente nos parece razoável repetir os resultados existentes para os gases de Coulomb, a fim de nos assegurarmos do método. É claro que nesses gases também chegaremos a uma expressão do tipo (3.20) para a função que deverá ser expandida. No *capítulo 3* essa função envolvia o termo real $\gamma_\alpha(j)$. Nos gases de Coulomb podemos ter funções reais ou imaginárias, dependendo da escolha da própria função de partição ou do operador de desordem para o cálculo do valor esperado da correlação .

A maior diferença, porém, está relacionada com as cargas dos gases de Coulomb, especialmente as do gás de Villain, que podem assumir qualquer valor. Isso afetará as estimativas (3.13), (3.14) que nos dipolos são bem simples por envolver a diferença entre as funções de Green calculadas em dois pontos apenas x e $x+L$, onde L é o comprimento do dipolo. Nos gases de Coulomb teremos a interação entre todos os pontos da rede.

Quanto à busca de novos resultados, ainda recentemente ficamos sabendo da proposta de T. Spencer de provar a transição de fase de Kosterlitz-Thouless em uma versão dos modelos s-o-s. A transição de fase no modelo s-o-s foi provada pelo próprio Spencer com os métodos expostos nesta tese. Nessa versão do modelo a função de partição na representação de *sine*-Gordon a medida é função de ϕ, mas essa variável é restrita de modo a só poder dar *saltos* unitários entre sítios. Achamos que a utilização da representação das cargas pode ser proveitosa aqui, visto que na *sine*-Gordon, nem mesmo Spencer tem uma pista de como proceder.

Apêndice A

A Desigualdade Eletrostática

Obter a desigualdade eletrostática é um simples exercício de completar quadrados no peso de Gibbs. Vamos demonstrá-la para o caso restrito de transformação de cargas. Assim, seja U um subconjunto de cargas do gás a que aplicaremos a deslocamento

$$\bar{q}_\Lambda = q_\Lambda + \frac{1}{8}\Delta(\chi_u q_\Lambda)$$

onde

$$\chi_u = \begin{cases} 1 \text{ se } u \in U \\ 0 \text{ se } u \in U \end{cases}$$

Por substituição direta

$$\begin{aligned}
(\bar{q}_\Lambda, (-\Delta)^{-1}\bar{q}_\Lambda) &= (q_\Lambda + \frac{1}{8}\Delta\chi_u q_\Lambda, (-\Delta)^{-1}q_\Lambda + \frac{1}{8}\Delta\chi_u q_\Lambda) \\
&= (q_\Lambda, (-\Delta)^{-1}q_\Lambda) + \frac{1}{8}(\chi_u q_\Lambda, -\chi_u q_\Lambda) \\
&+ \frac{1}{8}(\Delta\chi_u q_\Lambda, (-\Delta)^{-1}\chi_u q_\Lambda) + \frac{1}{64}(\Delta\chi_u q_\Lambda, \chi_u q_\Lambda).
\end{aligned}$$

Agrupando os termos iguais

$$(q_\Lambda, (-\Delta)^{-1}q_\Lambda) = (\bar{q}_\Lambda, (-\Delta)^{-1}\bar{q}_\Lambda) + \frac{1}{4}(\chi_u q_\Lambda, -\chi_u q_\Lambda) - \frac{1}{64}(\Delta\chi_u q_\Lambda, \chi_u q_\Lambda).$$

A desigualdade surge quando aproximamos o Laplaciano aplicado à carga pela própria carga, usando que $|\Delta| = 8$

$$(q_\Lambda, (-\Delta)^{-1}q_\Lambda) \geq (\bar{q}_\Lambda, (-\Delta)^{-1}\bar{q}_\Lambda) + \frac{1}{4}(\chi_u q_\Lambda, -\chi_u q_\Lambda) - \frac{1}{64}8(\chi_u q_\Lambda, \chi_u q_\Lambda).$$

Da substituição no peso de Gibbs resulta

$$\exp\{-\frac{\beta}{2}(q_\Lambda,(-\Delta)^{-1}q_\Lambda)\} \leq \exp\{-\frac{\beta}{2}(\bar{q}_\Lambda,(-\Delta)^{-1}\bar{q}_\Lambda) - \frac{\beta}{16}(\chi_u q_\Lambda, -\chi_u q_\Lambda)\}$$

obtendo o fator de auto-energia

$$\bar{z}_y = z_y \, exp\left\{-\frac{\beta}{16}\sum_{u\in U}\rho_y^2(u)\right\}.$$

Apêndice B

A Função de Green

A função de Green (5.11) para os rotores, obtida na *seção 5.4*, com todos os parâmetros (N, n, β) explícitos, foi

$$C(x,t) = \frac{1}{2N+1}\frac{1}{\beta}\sum_{p,q}\frac{e^{\imath(px+qt)}}{\frac{2-2\cos p}{I}+\frac{2-2\cos q\delta}{J\delta^2}} \tag{B.1}$$

com $\delta = \beta/n$ e

$$p = \frac{2\pi}{2N+1}m_1, \qquad -N \leq m_1 \leq N$$

e

$$q = \frac{2\pi}{\beta}m_2, \qquad -\frac{n}{2} \leq m_2 \leq \frac{n}{2}$$

Para obter a função de Green no limite do contínuo, devemos fazer $N \to \infty$, depois $n \to \infty$, e por fim tomar $\beta \to \infty$. A ordem dos dois últimos limites é consequência da fórmula de Trotter.
Quando $N \to \infty$, (B.1) se torna

$$C(x,t) = \frac{1}{\beta}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dp}{2\pi}\sum_{q=-\pi/\delta}^{-\pi/\delta}\frac{e^{\imath(px+qt)}}{\frac{2-2\cos p}{I}+\frac{2-2\cos q\delta}{J\delta^2}}. \tag{B.2}$$

Em seguida, ao fazermos $n \to \infty$, o que corresponde a $\delta \to 0$, e $C(x,t)$ passa a ser dada pela integral

$$C(x,t) = \frac{1}{\beta}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{dp}{2\pi}\sum_{q=-\infty}^{\infty}\frac{e^{\imath(px+qt)}}{\frac{2-2\cos p}{I}+\frac{q^2}{J}}$$

onde fizemos a aproximação $2 - 2\cos q\delta \approx q^2\delta^2$.
Finalmente fazemos $\beta \to \infty$. Chegamos a

$$C(x,t) = \frac{1}{2\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi} dp \int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{e^{i(px+qt)}}{\frac{2-2\cos p}{I} + \frac{q^2}{J}}.$$

Nossos resultados dependem da diferença $C(x,t) - C(0,0)$. Vamos calculá-la para o caso particular em que $t = 0$. Nesse caso a integral em q pode ser facilmente calculada pela substituição de variável $q = \sqrt{(J/I)(2-2\cos p)}\tan\theta$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{1}{\frac{2-2\cos p}{I} + \frac{q^2}{J}} = \pi\sqrt{IJ}\frac{1}{\sqrt{2-2\cos p}}$$

Temos então

$$C(x,0) - C(0,0) = \frac{1}{4\pi}\sqrt{IJ}\int_{-\pi}^{\pi} dp \frac{e^{ipx}-1}{\sqrt{2-2\cos p}}.$$

É mais conveniente escrever

$$C(x,0) - C(0,0) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{IJ}\int_{0}^{\pi} dp \frac{\cos px - 1}{\sqrt{2-2\cos p}}. \tag{B.3}$$

onde usamos que $2cosx = e^x + e^{-x}$.
Para calcular a integral (B.3), dividimos o intervalo de integração em duas partes

$$C(x,0) - C(0,0) = \frac{1}{2\pi}\sqrt{IJ}\int_{0}^{1} dp \frac{\cos px - 1}{\sqrt{2-2\cos p}} + \frac{1}{2\pi}\sqrt{IJ}\int_{1}^{\pi} dp \frac{\cos px - 1}{\sqrt{2-2\cos p}}$$

A segunda integral pode ser estimada por uma constante independente de x. Quanto à primeira integral, no intervalo $[0,1]$ podemos aproximar $2-2\cos p \approx p^2$. Logo,

$$C(x,0) - C(0,0) \sim \frac{1}{2\pi}\sqrt{IJ}\int_{0}^{1} dp \frac{\cos px - 1}{p}$$

A mudança de variável $\xi = px$, leva a (para $x > 0$)

$$C(x,0) - C(0,0) \sim \frac{1}{2\pi}\sqrt{IJ}\int_{0}^{x} d\xi \frac{\cos\xi - 1}{\xi}$$

No intervalo $[0,1)$ expandimos $\cos\xi - 1 \approx -(1/2)\xi^2$. A contribuição dessa região se integra para uma constante. No intervalo $[1,x]$ usamos integração por partes:

$$\int_1^x d\xi \frac{\cos\xi - 1}{\xi} = \frac{\sin\xi - \xi}{\xi}\Big|_1^x + \int_1^x d\xi \frac{\sin\xi - \xi}{\xi^2}$$

É fácil ver que o valor assintótico é

$$C(x,0) - C(0,0) \approx -\sqrt{\frac{IJ}{4\pi^2}} \ln|x|$$

mesmo quando $x < 0$.

Bibliografia

[1] L. Onsager: "Crystal Statistics I: A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition" *Phys.Rev.* 65, 117 (1944)

[2] F. Spitzer: "Principles of Random Walk", van Nostrand, Princeton (1964)

[3] L.Kadanoff: "Scaling Laws for Ising Models near T_c" *Physics.* **2**, 263 (1965)

[4] N.D.Mermin, H.Wagner: "Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Heisenberg Models." *Phys.Rev.Lett.* **17**, 1133 (1966)

[5] H.E.Stanley, T.A.Kaplan: "Possibility of a Phase Transition for the Two-Dimensional Heisenberg Model." *Phys.Rev.Lett.* **17**, 913 (1964)

[6] L.P.Kadanoff, W.Gotze, D.Hamblen, R.Hecht, E.A.S.Lewis, V.V.Palciauskas, M.Rayl, J.Swift, D.Aspen, J.Kane: "Static Phenomena Near Critical Points: Theory and Experiment" *Rev.Mod.Phys.* **1** 1967

[7] D.W.Robinson: "A Proof of the Exisitence of Phase Transition in the Anisotropic Heisenberg Model." *Commun.Math.Phys.* **14**, 195 (1969)

[8] L.P. Kadanoff, H. Ceva: "Determination of an Operator Algebra for the Two-Dimensional Ising Model" *Phys. Rev.* **B 3**, 3918 (1971)

[9] F. Wegner: "Duality in Generalized Ising Models and Phase Transitions without Order Parameters" *J.Math. Phys.* **12**, 2259 1971

[10] M. Reed, B. Simon *Methods of Modern Mathematical Physics* vol. I, Academic Press, NY (1972)

[11] J.M.Kosterlitz, D.J.Thouless: "Ordering, Metastability and Phase Transition in Two-Dimensional Systems." *J.Phys.C* **6**, 1181 (1973)

[12] J.Villain: "Theory of One- and Two-Dimensional Magnets With An Easy Magnetization Plane". *J.Phys.* (Paris) **32**, 581 (1975)

[13] J.Fröhlich, B.Simon, T.Spencer: "Infrared Bounds, Phase Transition and Continuous Symmetry Breaking." *Commun.Math.Phys.* **50**, 79 (1976)

[14] T.Blanks, R.Myerson, J.Kogut: "Phase Transition in Abelian Lattice Gauge Theories.", *Nucl. Phys. B* **129**, 493 (1977).

[15] O.A.McBryan, T.Spencer: "On the Decay of Correlations in S0(n)- Symmetric Ferromagnets" *Commun. Math. Phys.* **53**, 299 (1977)

[16] F.Dyson, E.H.Lieb, B.Simon: "Phase Transition in Quantum Spin Sysytems with Isotropic and Nonisotropic Interaction." *J. Stat. Phys.* **18**, 335 (1978)

[17] J.Fröhlich, E.H.Lieb: "Phase Transition in Anisotropic Lattice Spin Systems." *Commun. Math. Phys.* **60**, 233 (1978)

[18] V.A.Malyshev: "Phase Transition in Classical Heisenberg Ferromagnets with Arbitrary Parameter of Anisotropy." *Commun.Math.Phys.* **40**, 75 (1978)

[19] P.M.Bleher, E.Zalys: "Existence of Long-Range Order in the Migdal Recursion Equations" *Commun.Math.Phys.* **67**, 17 (1979)

[20] J.Kogut: "An Introduction to Lattice Gauge Theory and Spin Systems." *Rev. Mod. Phys.* **51**, 659 (1979)

[21] D.Brydges, P.Federbush: "Debye Screening", *Commun.Math.Phys.* **73** p.197 (1980).

[22] J.Frohlich, T. Spencer: "Phase Diagram and Critical Properties of (Classical) Coulomb Systems" Erie Lectures (1980)

[23] J.Fröhlich, C. Pfister: "On the Absence of Spontaneous Symmetry Breaking and of Crystalline Ordering in Two-Dimensional Systems" *Commun.Math.Phys.* **81**, 277 (1981)

[24] J.Fröhlich, T.Spencer: " On the Statistical Mechanics of Classical Coulomb and Dipole Gases." *J.Stat.Phys.* **24**, 4 (1981)

[25] J.Fröhlich, T.Spencer: "The Kosterlitz-Thouless Transition in Two-Dimensional Abelian Spin Systems and the Coulomb Gas." *Commun.Math.Phys.* **81**, 527 (1981)

[26] J.Glimm and A.Jaffe, "Quantum Physics – A Functional Integral Point of View", Springer-Verlag (1981)

[27] J.Fröhlich, T.Spencer: *The Berezinski–Kosterlitz–Thouless Transition (energy-entropy arguments and renormalization in efect gases* in *Progress in Physics* Vol. **7** (1983)

[28] D.Brydges, *A Short Course on Cluster Expansions* In: Critical Phenomena, Random Systems Gauge Theories. Osterwalder, K. Stora, R. (eds.) Amsterdam: Elsevier, 1986

[29] W.S.Yang: "Debye Screening for Two-Dimensional Coulomb Systems at High Temperature." *J.Stat.Phys.* **49**, 1 (1987)

[30] D.H.U.Marchetti, A.Klein, J.Fernando Perez: "Power-Law Falloff In The Kosterlitz–Thouless Phase Of a Two-Dimensional Lattice Coulomb Gas." *J.Stat.Phys.* **60**, 137 (1990)

[31] J.Dimock, T.R.Hurd: "A Renormalization Group Analysis of the Kosterlitz–Thouless Phase." *Comm.Math.Phys.* **137**, 263

[32] D.H.U.Marchetti, A.Klein: "Power-Law Falloff In Two-Dimensional Coulomb Gases At Inverse Temperature $\beta > 8\pi$." *J.Stat.Phys.* **64**, 135 (1991)

[33] A.Klein, J.Fernando Perez: "Localization in the Ground State of a Disordered Array of Quantum Rotators." *Commun.Math.Phys.* **147**, 241 (1992)

[34] D.H.U.Marchetti: "Upper Bound on the Truncated Connectivity in One-Dimensinal $\beta/|x-y|^2$ Percolation Models at $\beta > 1$". *Rev. Math.Phys.* **7**, 723 (1995)