UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS

USP / IFQSC / SBI

8-2-888888

OK

ESQUEMA DE CLASSIFICAÇÃO PARA TEORIAS
ESTATÍSTICAS COM SIMETRIAS NÃO USUAIS

Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz

Departamento de Física

Universidade Federal de São Carlos

*Tese apresentada ao Instituto de
Física e Química de São Carlos, da Uni
versidade de São Paulo para o concurso
de Livre Docência.*

Ao meu grande amor

Meire

À minha saudosa lembrança

J.A. Swieca

AGRADECIMENTOS

Quero registrar aqui o meu profundo agradecimento a todos que, de maneira direta ou indireta, colaboraram para que este trabalho pudesse ser realizado, e em particular:

À Lawrence Jacobs e Robert Savit que colaboraram diretamente na elaboração das idéias aqui apresentadas.

Aos colegas José Roberto Drugowich de Felício, Roland Köberle, Valério Kurak e Eduardo Cantera Marino pelas discussões e amizade que tornam São Carlos um local agradável para mim.

À Universidade Federal de São Carlos e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico pelo apoio financeiro.

À Cristina e ao José Augusto pelo excelente trabalho de datilografia.

ÍNDICE

RESUMO	001
ABSTRACT	002
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	003
CAPÍTULO II - ESQUEMA GERAL DE CLASSIFICAÇÃO	006
II.A - Definições	006
II.B - Construção de modelos com simetria $\tilde{ind}$ ce n	008
II.C - Propriedades de dualidade	010
II.D - Excitações topológicas	012
CAPÍTULO III - MODELOS COM SIMETRIA PLANAR	017
III.A - Ausência de ordem de longo alcance a d-dimensões	017
III.B - Modelos específicos	026
CAPÍTULO IV - SIMULAÇÕES MONTE CARLO	056
CAPÍTULO V - SUMÁRIO E CONCLUSÕES	073
APÊNDICE A - Desigualdade das Funções de Correlação	075
APÊNDICE B - Hamiltoniana Quântica do Modelo 24 de Fevereiro.	082
REFERÊNCIAS	087

RESUMO

Uma grande classe de teorias com simetrias não usuais é construída e discutida de uma maneira unificada. Esta classe é formada por modelos estatísticos cujas simetrias correspondem a uma interpolação entre as, comumente conhecidas, simetrias globais e locais. Estes modelos descrevem a dinâmica de variáveis $U(1)$ (ou $Z(N)$), $\exp(i\phi)$, localizadas nos sítios de uma rede de dimensão e geometria arbitrárias. Descrevemos uma classificação destas teorias baseando-nos no que chamamos de seu "Índice de simetria": O valor de n para o qual o Hamiltoniano de um sistema d -dimensional é invariante pela transformação $\phi(x_1, \dots, x_d) \rightarrow \phi(x_1, \dots, x_d) + \Lambda(x_1, \dots, x_d)$ com a função de calibre Λ satisfazendo um conjunto de n vínculos linearmente independentes. Discutimos como as propriedades críticas e a estrutura dos defeitos topológicos dos modelos pode ser determinada por d e n . Uma classe particularmente interessante corresponde ao caso $d = 3$ e $n = 2$. Mostramos de maneira geral que tais teorias não exibem ordem de longo alcance à qualquer temperatura não nula e apresentamos vários exemplos de modelos com estas propriedades, que podem ser relevantes à descrição da criticidade de sistemas físicos reais. Os resultados de nosso estudo analítico e de nossas simulações por técnica de Monte Carlo indicam que os diagramas de fases para a classe $n = 2$, a qualquer dimensão, são qualitativamente similares aos das teorias globalmente simétricas $d = n = 2$ e aos das teorias localmente invariantes $d = 4$ $n = 0$.

ABSTRACT

A large class of theories with unusual symmetries is constructed and discussed from a unified viewpoint. These are statistical models with symmetries which correspond to an interpolation between standard global and local symmetries. The models describe the dynamics of $U(1)$ (or $Z(N)$) variables, $\exp(i\phi)$, located at the sites of a lattice of arbitrary dimension and geometry. We describe a classification of these theories based on what call their "symmetry index": The value of n for which the Hamiltonian of a d -dimensional system is invariant under the transformation $\phi(x_1, \dots, x_d) \rightarrow \phi(x_1, \dots, x_d) + \Lambda(x_1, \dots, x_d)$, with the gauge function Λ satisfying a set of n linearly-independent constraints. We discuss how the critical properties and the structure of topological defects of a model are determined by d and n . A particularly interesting class of theories corresponds to the case $d = 3$ and $n = 2$. We show on general grounds that such theories have no long-range order for any non-zero temperature and present several explicit examples of models with these properties, which may be relevant in the description of real physical systems. The results of our analytical studies and our Monte Carlo simulations suggest that the phase diagram for the class with $n = 2$, for whatever dimension, are qualitatively similar to the $d = n = 2$ globally symmetric theories and to the $d = 4, n = 0$ locally invariant theories.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Os modelos mais estudados na Mecânica Estatística do equilíbrio são aqueles invariantes ou por transformações globais (tal como o modelo de Ising ou o modelo $x-y$) ou por transformações locais de calibre (tal como os modelos de calibre Z_N ou $U(1)$). Neste trabalho estudaremos modelos cujas simetrias não são aquelas usualmente estudadas mas sim intermediárias entre locais e globais. Algumas destas teorias, além de seu interesse puramente teórico, parecem serem adequadas à descrição de propriedades críticas de cristais líquidos e de magnetos helicoidais⁽¹⁻⁴⁾. Discutiremos um esquema de classificação de tais teorias e acreditamos que tal classificação tenha relação profunda com as diversas possíveis classes de universalidade. Os modelos invariantes por simetrias não usuais possuem tipicamente interações de multicorpos em sua Hamiltoniana, assim nosso esquema de classificação pode também ser tido como um procedimento para classificação das diversas teorias com interações de multicorpos.

A pedra fundamental no nosso esquema de classificação é a introdução de uma nova quantidade, n , que chamaremos por Índice de simetria da teoria. A grosso modo n é a medida da dimensão do subespaço sobre o qual a função de calibre da teoria está vinculada (subespaço em que a simetria é global).

Para sermos mais precisos consideraremos neste trabalho (a menos que se especifique onde não for o caso) teorias com simetria $U(1)$ (invariantes pelo grupo de rotações no plano) descritas por um campo simples $\exp(i\phi)$, $\phi \in (-\pi, \pi]$, associado com os sítios de uma rede hipercúbica a d dimensões. Podemos então construir teorias cujo Hamiltoniano, $H(\phi)$, seja invariante pela transformação:

$$\phi(x_1, \dots, x_d) \rightarrow \phi(x_1, \dots, x_d) + \Lambda(x_1, \dots, x_d) \quad (1.1)$$

onde $\vec{x} \equiv (x_1, x_2, \dots, x_d)$ indexa os sítios da rede. Caso Λ satisfaça um conjunto de n vínculos diferenciais independentes, a teoria será dita como possuidora de um índice de simetria n . Quando $n = 0$ ($n = d$) a teoria exibirá simetria local* (global). Para $0 < n < d$ a teoria possui simetria de um novo tipo, o qual é, de certo modo, intermediária entre local e global.

Vários diferentes tipos de vínculos diferenciais podem ser impostos sobre a função de calibre Λ . Os mais simples, contudo, são aqueles expressos por diferenciais lineares da forma $\Delta_i \Lambda = 0$, sendo Δ_i um operador diferencial de primeira ordem na direção x_i , que força Λ a ser independente de x_i . Ao longo deste trabalho trataremos explicitamente com teorias cujas funções de calibre satisfazem estes tipos de vínculos, mas a maioria de nossos resultados aplicam-se igualmente a uma classe ainda maior de teorias, conforme discutiremos nos próximos capítulos.

Na seção II-A apresentaremos nosso esquema de classificação. Introduziremos também a noção de simetria composta que ocorre nas situações em que Λ é restrita (isto é, constante) em diferentes subespaços $S_1, \dots, S_j$ (que podem possuir distintas dimensões) em um espaço d -dimensional, mas não no espaço inteiro gerado por $S_1, \dots, S_j$. Como as teorias aqui tratadas são incomuns na literatura é importante produzir-se algumas destas teorias. Na seção II-B incumbir-nos-emos desta missão construindo uma hierarquia de teorias para todo n e d . Estas teorias possuirão a função de calibre satisfazendo vínculos da forma $\Delta_i \Lambda = 0$ e serão aquelas mais simples para dados n e d . Nas seções II-C e II-D retornare-

* Na realidade parece não ser possível descrever uma teoria $n = 0$ (local) em termos de um simples campo escalar, fato este não surpreendente para aficionados em teorias de calibre.

mos ao nosso esquema geral de classificação apresentando uma discussão sobre as propriedades de dualidade e as excitações topológicas das teorias com $0 < n < d$.

No capítulo III concentrar-nos-emos na classe de teorias com $n = 2$. Primeiramente recapitulamos brevemente a generalização do teorema de Mermin-Wagner⁽⁵⁻⁸⁾, recentemente provada⁽⁹⁾, que mostra que em qualquer dimensão estas teorias não possuem ordem de longo alcance para $T > 0$. Apresentaremos três modelos tri-dimensionais possuidores de simetria $n = 2$ diferindo apenas em detalhes. Estes modelos são bastante simples e servem para elucidar aspectos gerais das teorias com simetria $n = 2$. Discutimos suas propriedades de dualidade bem como as possíveis excitações topológicas presentes nestes modelos.

No capítulo IV apresentaremos os resultados numéricos, obtidos por simulações numéricas empregando-se técnicas de Monte Carlo. Tais simulações indicam que as versões Z_N destes modelos possuem diagramas de fases qualitativamente similares aos modelos ($d=n=2$) relógios bidimensionais (globalmente simétricos).

No capítulo V resumimos nossos resultados e concluímos com algumas sugestões para trabalhos futuros. Finalmente, para um dos modelos tratados no presente trabalho, obtemos no apêndice A importantes desigualdades das funções de correlações da ordem e desordem e no apêndice B obtemos a sua formulação Hamiltoniana com tempo contínuo.

CAPÍTULO II

ESQUEMA GERAL DE CLASSIFICAÇÃO

II-A - Definições

Consideremos uma teoria descrita em termos da variável $U(1)$:

$$S(\vec{r}) = e^{i\phi(\vec{r})} \quad 0 \leq \phi(\vec{r}) < 2\pi \quad (II.1)$$

Suponhamos, por simplicidade, que $\{\vec{r}\}$ sejam os pontos que definem uma rede hipercúbica simples a d -dimensões (esta restrição não é necessária, contudo fará com que a apresentação seja mais simples). Associamos, desta forma, os spins com os sítios da rede. Estaremos interessados na discussão de teorias que não exibam explicitamente interações de longo alcance e cujos Hamiltonianos sejam invariantes mediante a transformação

$$\phi(x_1, \dots, x_d) \rightarrow \phi(x_1, \dots, x_d) + \Lambda(x_{n+1}, \dots, x_d) \quad (II.2)$$

Tais teorias possuirão um índice n de simetria. Na realidade, muitas de nossas considerações aplicar-se-ão igualmente bem a teorias em que a função de calibre Λ é uma função de todas as d -coordenadas, satisfazendo n condições da forma:

$$\mathcal{O}_j \Lambda = 0 \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (II.3)$$

sendo $\mathcal{O}_j$ combinações linearmente independentes de operadores diferenciais (ou de diferenças). Isto será discutido em detalhes mais adiante.

Como ponto de partida no estudo destas teorias é útil primeiramente perguntarmos quais seriam os modelos mais simples

em d -dimensões possuidores da simetria (II.1). Esperamos que a Hamiltoniana (ou ação) de nossas teorias possuam a forma geral

$$H(\phi) = \sum_{\vec{x}} \sum_{p=1}^s f_p \left(\sum_{j=1}^{q(p)} c_{p,j} \phi_j \right) \quad (II.4)$$

onde f_p são funções de combinações lineares de $q(p)$, campos ϕ e $c_{p,j}$ é um conjunto de coeficientes constantes. A coordenada de ϕ_j é $\vec{x} + \vec{r}_j$, e, como estamos assumindo que não existem explicitamente interações de longo alcance decorre que $|\vec{r}_j|$ deva ser finito. Embora na realidade nossas considerações sejam mais gerais, facilitar-nos-á a compreensão se pensarmos nas interações (II.4) como definidas em k -dimensional ($k \leq d$) simplexos da rede d -dimensional. Por exemplo, interações de primeiros vizinhos ao longo das ligações (1-simplexo), interações de quatro corpos ao redor das faces elementares, ou plaquetas (2-simplexo), etc.

O Hamiltoniano (II.4) contém s -termos distintos e queremos saber qual a teoria com o menor valor de s que possui um índice de simetria n de forma não trivial. Primeiramente devemos discutir em mais detalhes os possíveis tipos de simetrias que nossas teorias possam ter. Notemos, para começar, que se a teoria possui um índice de simetria n ($n \leq d$) então, a fortiori, ela possui um índice de simetria n' sendo $d \leq n' > n$. Esta simetria menor n' (um número maior de graus de liberdade é envolvido) é obtida considerando-se aquelas transformações em que Λ é função apenas de um subconjunto das coordenadas $x_{n+1}, \dots, x_d$. As teorias em que estas simetrias sejam as únicas e que existam apenas um subespaço em que (II.2) é satisfeita serão possuidoras de uma simetria simples índice n . Por outro lado, aquelas teorias em que a transformação (II.2) seja válida em diversos subespaços distintos de dimensão $d-n$, serão tidas como possuidoras de uma simetria múltipla índice $-n$. É possível que tenhamos teorias com simetria índice $-n$ (simples ou múltipla) concomitantemente com outro índice de simetria

tria distinto m (simples ou múltiplo), definidos em subespaços distintos. Tais teorias serão possuidoras de uma simetria composta.

11-B - Construção de Modelos com Simetria n

Fixemo-nos agora no caso de uma teoria com índice n de simetria. Consideraremos apenas teorias não triviais, no sentido de serem, a priori, acopladas em todo o espaço d -dimensional*. A teoria mais simples da forma (II.4) possuidora de tal simetria deve ter $s = n$. Tal teoria é então composta de n termos em (II.4) em um destes termos, as variáveis localizadas nos vértices de um elemento $(d-n+1)$ -dimensional da rede são acopladas entre si e os $(n-1)$ termos restantes são simples interações entre primeiros vizinhos. A interação $(d-n+1)$ -dimensional é definida num $(d-n+1)$ -simplexo da rede, cujos lados geram um subespaço $(d-n+1)$ -dimensional na rede d -dimensional e cada uma das $(n-1)$ interações entre vizinhos próximos ocorrem ao longo das $(n-1)$ direções ortogonais ao subespaço gerado pelo simplexo acima mencionado. As constantes C_{p_j} , em (II.4) são escolhidas de maneira a que a simetria esteja satisfeita. Nos casos simples, por exemplo, C_{p_j} podem ser escolhidos alternando entre $(+1)$ e (-1) conforme circundamos o simplexo em que a interação esteja definida.

Alguns exemplos tornarão a situação mais clara. Notemos inicialmente que este procedimento não consegue produzir teorias com índice de simetria $n = 0$ (locais). Sem incluir outros campos ao problema, parece não haver maneira de construir tal teoria. Voltando ao caso menos patológico com $n > 0$, observamos que em três dimensões podemos obter uma teoria com uma simetria múltipla in-

* Permitimos, contudo, a possibilidade das teorias serem triviais, no sentido de poderem ser transformadas num conjunto infinito de modelos não interagentes.

dice 2 incluindo em (II.4) uma interação de 4-corpos em cada plaqueta no plano (x_1, x_2) , e interações entre primeiros vizinhos ao longo da direção x_3 . É claro que H é então invariante por (II.2) com a função de calibre $\Lambda = \Lambda(x_i)$ $i=1,2$. Isto significa que, se rodarmos todas as variáveis nos planos (x_1, x_3) ou (x_1, x_2) por um ângulo fixo, a Hamiltoniana será invariante. Para se obter uma teoria com índice 1 a três dimensões, incluímos em H apenas interações de oito corpos envolvendo todos os spins dos vértices dos cubos elementares da rede e somando-se sobre todos os cubos. Com a escolha apropriada dos coeficientes, C_{1j} , em (II.4) esta teoria será portadora de uma simetria tripla com índice 1: $\Lambda = \Lambda(x_i, x_j)$; $i, j = 1, 2, 3^*$. Se analisarmos mais profundamente veremos que, em geral, uma teoria projetada pela construção acima mencionada terá uma simetria índice n com multiplicidade $(d-n+1)^{**}$. É obviamente possível construir-se teorias mais complicadas com propriedades de simetria similares ou ainda com diferentes multiplicidades do índice n , contudo o procedimento, acima exposto, produz de certo modo as teorias mais simples. Teremos a oportunidade, mais adiante, de discutir em detalhes algumas teorias mais complicadas, mas por enquanto nosso interesse se concentra nas propriedades gerais dos sistemas com simetria de índice n .

* Esta teoria na realidade é trivial no sentido de que ela pode ser desacoplada num conjunto de teorias triviais não interagentes. A razão disto é consequência do fato da teoria possuir um índice de simetria 1 com multiplicidade igual ao número de dimensões. Este ponto será analisado mais adiante no capítulo III.

** Esta afirmação ficará mais óbvia se a teoria for considerada em notação do contínuo, no qual o argumento da interação k -dimensional se torna $\partial_1, \partial_2, \dots, \partial_k \phi$, sendo $\partial_j \equiv \frac{\partial}{\partial x_j}$.

11-C - Propriedades de Dualidade

Analísaremos nesta seção as propriedades, mediante transformação de dualidade, das teorias estudadas neste trabalho. Esta análise pode ser mais facilmente feita se lembrarmos o seguinte resultado geral⁽¹⁰⁾: dada uma teoria Abeliana composta por um simples campo e cuja Hamiltoniana possa ser escrita em termos de uma soma de k termos distintos, a sua representação dual poderá então ser escrita como uma teoria composta de $k-1$ campos independentes. Mais ainda, este conjunto de $k-1$ campos independentes, podem ser aumentados incluindo-se um conjunto de campos de calibre dependentes, de maneira que a forma dual da teoria possua uma simetria de calibre generalizada. Após a inclusão destes campos de calibre extras, a Hamiltoniana dual pode ser escrita como uma função de um tensor antissimétrico $A_{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{k-2}}$, e será invariante mediante a transformação de calibre geral

$$A_{\mu_1, \dots, \mu_{k-2}} \rightarrow A_{\mu_1, \dots, \mu_{k-2}} + \Xi \{ \tilde{\theta}_{\mu_1}, \tilde{\omega}_{\mu_2, \dots, \mu_{k-2}} \} \quad (11.5)$$

onde $\tilde{\omega}$ é uma função de calibre composta de $k-4$ índices, $\tilde{\theta}_\mu$ são um conjunto de operadores determinados pela forma original da Hamiltoniana, e $\Xi \{ \}$ denota uma soma antissimétrica sobre todas as permutações de $\mu_1, \dots, \mu_{k-2}$.*

Algumas propriedades gerais das transformações de dualidade, que nos são familiares nas teorias mais comuns (globais ou locais)⁽¹¹⁻¹⁶⁾, surgem igualmente no presente contexto:

1. Se o grupo de simetria da teoria original for Z_N , então o grupo de simetria da teoria dual também será Z_N .

* Para detalhes da solução bem como o método de se determinar veja referência (2).

2. Caso a teoria original possua simetria $U(1)$ então a teoria dual terá simetria Z_∞ .
3. Se a Hamiltoniana da teoria original for de forma quadrática simples (isto é, da forma Villain⁽¹⁷⁾), então a teoria dual também o será.
4. As constantes de acoplamento da teoria dual serão relacionadas às da teoria original de maneira indicada pelo grupo de simetria.

Uma complicação adicional, por outro lado, pode surgir nestas teorias não usuais; é que a forma natural da rede em que a teoria dual é definida (denominaremos, embora impropriamente, rede dual) pode ser bastante complicada. Isto se deve ao fato da estrutura da rede dual não ser determinada pela geometria da rede original, mas sim por aquela associada às interações da Hamiltoniana original (simplexos).

Para iluminar a discussão geral precedente, olhemos alguns exemplos simples. Uma das classes de teorias mais interessantes, no nosso esquema de classificação, são aquelas com índice de simetria $n = 2$. Fortunadamente, o modelo mais simples com índice de simetria 2 em d -dimensões, definido pela construção (II-B), é autodual em qualquer dimensão. O procedimento para se calcular sua forma dual é exatamente paralela àquela dos modelos bidimensionais do tipo relógio ou modelos $U(1)$ x - y . Os modelos com índice de simetria 3 a d -dimensões, gerados pela construção II-B são duais a uma teoria de calibre de um simples campo vetorial A_μ , $\mu = 1, 2, 3$. Observe que, embora a teoria e sua dual vira em d -dimensões, o campo de calibre possui apenas três componentes. Claramente os exemplos mais simples de tais teorias ocorrem em três dimensões, tais como os modelos tridimensionais de Ising, Z_N ou x - y .

Como um exemplo final, queremos nos referir a uma teo-

ria que será discutida em detalhe no capítulo III. Esta teoria pertence à classe de teorias com índice 2 definidas em rede cúbica simples. Os spins nesta teoria interagem via interação de quatro corpos, definida pelo produto entre si dos quatro spins dos vértices das plaquetas elementares da rede (veja Fig. 1). Para manter a simetria global podemos escolher a convenção em que tomamos o complexo conjugado de dois dos spins em cada interação. O dual desta teoria é novamente uma teoria de calibre local de um simples campo vetorial de três componentes A_μ , $\mu=1,2,3$; contudo a rede natural para esta teoria dual é de certa forma complicada.

Fig. 1

II-D - Excitações Topológicas

Em teorias, com grupo de simetria Abelianiano, podemos separar as excitações topológicas em duas categorias. A primeira delas é composta pelas excitações associadas ao caráter discreto do

grupo (por exemplo, Z_N), e teremos então uma espécie de excitações do tipo parede, separando diferentes domínios. Um exemplo delas ocorre no modelo relógio Z_N simétrico a três dimensões em que domínios de diferentes orientações são separados por paredes (tipo de Block). A segunda categoria é formada por aquelas excitações associadas ao caráter compacto do grupo de simetria. São desta espécie, por exemplo, as cordas de vórtices que aparecem no modelo tridimensional x-y (com invariância global $n = 3$ $U(1)$).

Nesta seção teceremos alguns comentários sobre este último tipo de excitação, pois esperamos que tais excitações sejam relevantes para as teorias com grupo de simetria Z_N ($N > 3$)⁽¹⁶⁾ ou simplesmente nas teorias cujo grupo de simetria seja $U(1)$. É claro que pode existir ainda excitações do tipo parede, caso a simetria seja discreta. Estas usualmente interagem não trivialmente com aquelas excitações topológicas geradas pela compactividade do grupo. Esta complicação adicional é que pode aumentar grandemente a riqueza da estrutura de fases quando passamos de teorias com grupo de simetria contínuo $U(1)$ para o grupo discreto Z_N^* .

Consideremos uma teoria com simetria $U(1)$ índice -n. A natureza das excitações topológicas^(10,14) é relacionada com a forma da teoria dual, o qual depende sensivelmente do número de termos (potenciais) distintos da Hamiltoniana original. Se a teoria original for uma teoria de um simples campo $U(1)$ e contiver k termos distintos na Hamiltoniana, então neste caso será possível escrever a teoria em termos de excitações topológicas (k-2)-dimensionais. Por exemplo, o modelo x-y bidimensional ($k = 2$) pode ser descrito em termos de vórtices enquanto que o mesmo modelo a três dimensões ($k = 3$) pode ser descrito em termos de cordas de vórtices interagentes.

* Nas referências (11-16) você encontrará uma discussão bastante extensa a cerca do modelo relógio bidimensional.

Devido ao fato das excitações topológicas dependerem do número de termos distintos da Hamiltoniana original, elas não são apenas determinadas pelo índice de simetria n , ou pela dimensão espacial. Podemos dizer contudo que dada uma teoria (não trivial) com um índice de simetria n , suas excitações topológicas devem ser objetos pelo menos $(n-2)$ -dimensionais. Conforme já o dissemos na seção II-B, as teorias mais simples com índice de simetria n possuem n termos distintos na Hamiltoniana, e estas teorias possuem consequentemente excitações topológicas $(n-2)$ -dimensionais. Assim, por exemplo, as teorias com simetria simples índice 2 em d -dimensões terão como excitações vórtices pontuais contidos num espaço d -dimensional. Por outro lado, a teoria de índice 2 descrita na última seção, e cujo Hamiltoniano é a soma das interações de quatro corpos ao longo das plaquetas elementares, terão como excitações topológicas objetos unidimensionais do tipo cordas. Nos casos mais estudados, na literatura, do modelo x - y a duas e três dimensões existem vínculos de conservação de suas excitações topológicas. A duas dimensões (dependendo das condições de contorno) os vínculos podem tomar a forma de uma condição de neutralidade de cargas; o qual implica que a soma dos vórtices (vorticidade) deva ser nula. Em três dimensões os vínculos de conservação forçam a divergência da corrente de cordas de vórtices a se anular, isto é, eles forçam $\nabla_\mu J_\mu = 0$, onde J_μ é a corrente (possui valores inteiros) representando a corda de vórtices e ∇_μ é um operador de diferenças finitas⁽¹⁸⁾. Nos casos mais gerais, abrangidos no presente trabalho, existirão vínculos associados com as excitações topológicas, mas estes podem não possuir forma tão simples como aquela discutida acima. Revendo, no caso do modelo x - y tridimensional, a derivação que conduz ao vínculo da divergência da corrente das cordas⁽¹⁸⁾, vemos que o fato do operador linear ∇_μ aparecer na equação de vínculos está intimamente relacionado ao

fato dos operadores que definem a Hamiltoniana também serem ∇_μ . Nos casos gerais, em que os operadores que definem as interações no Hamiltoniano original são distintos dos simples operadores de diferenças, aparecerão então outros operadores na equação dos vínculos das excitações topológicas. Por exemplo, se a teoria $U(1)$ original for da forma (II.4) com $s = 3$, então as suas excitações topológicas que são do tipo de cordas, J_μ , $\mu = 1, 2, 3$, satisfarão vínculos da forma $\mathcal{D}_\mu J_\mu = 0$, onde $\mathcal{D}_\mu$ são operadores de diferenças finitas. Estes operadores $\mathcal{D}_\mu$ (quando atuados sobre o campo ϕ_j) produzem exatamente as combinações lineares dos ϕ que ocorrem em cada um dos argumentos de f_μ em (II.4) (observe que, em geral, μ não se refere à direção espacial, mas é simplesmente relacionado ao índice p em (2.2)). Deixaremos para o capítulo III a descrição das leis de conservação topológicas para teorias com índice de simetria 2, onde trataremos de alguns exemplos destas teorias.

A formulação das excitações topológicas acima apresentadas, embora bastante elegante e útil, pode não ser a formulação mais apropriada em alguns casos específicos. As correntes topológicas que satisfazem leis de conservação do tipo $\mathcal{D}_\mu J_\mu = 0$ (para o caso $s = 3$), podem em geral serem reescritas em termos de um outro conjunto de campos (por exemplo no x - y tridimensional⁸, $(J_\mu = \epsilon_{\mu\nu\lambda} \nabla_\nu B_\lambda)$). Pode ser vantajoso, em determinados casos considerar a teoria descrita em termos deste novo conjunto de variáveis ao invés dos J_μ . Isto é particularmente verdade nos casos considerados neste trabalho, para os quais os operadores que aparecem na Hamiltoniana são mais complicados que simples operadores de diferenças finitas (ou diferencial). Em tais casos é frequentemente difícil termos uma interpretação simples das excitações topológicas em termos dos graus de liberdade originais da teoria. Este problema não ocorre no modelo x - y . Nesta teoria, o Hamiltoniano inclui apenas termos com interação entre vizinhos

próximos de forma que fica claro que o vórtice representa a parte inteira de um ângulo, conforme caminhamos de um sítio ao seu vizinho próximo seguindo um caminho fechado na rede. Com interações mais complicadas tal interpretação simples não é sempre possível, e dependendo da teoria, um exame mais profundo pode conduzir a um conjunto mais intuitivo de variáveis, funções dos J_μ . Esta situação é precisamente a que ocorre no modelo estudado por Amit et al⁽³⁾, Naquele modelo o conjunto matemático natural de excitações topológicas seriam vórtices pontuais em três dimensões, mas do ponto de vista físico, o conjunto mais natural é aquele formado por excitações do tipo corda.

CAPÍTULO III

MODELOS COM SIMETRIA PLANAR

III-A - Ausência de Ordem de Longo Alcance em d-dimensões

Nesta seção faremos uma extensão sobre o índice n de simetria definido em (II.2) e teceremos algumas considerações sobre as possibilidades de quebra espontânea de simetria nestes modelos não usuais.

A generalização do índice de simetria n é feita estendendo-se a função de calibre Λ em (II.2). Permitimos agora que Λ seja uma função de todas as d -coordenadas espaciais, mas que satisfaça os n vínculos

$$\Delta_1 \Lambda = \Delta_2 \Lambda = \dots = \Delta_n \Lambda = 0 \quad (\text{III.1})$$

onde Δ_i é o operador de diferença finita na direção x_i . Tal conjunto de condições pode ainda ser generalizado para

$$\Theta_1 \Lambda = \Theta_2 \Lambda = \dots = \Theta_n \Lambda = 0 \quad (\text{III.2})$$

onde Θ_i é um conjunto de n operadores de diferenças (ou na linguagem do contínuo, diferenciais) linearmente independentes. Em geral, as teorias mais simples consistentes com as condições (III.2) possuirão interações definidas em simplexes mais complicados que simples hipercubos.

A classe de teorias com dada simetria estendida índice n terá muitas das mesmas propriedades das teorias com simetria índice n ordinárias. Entre estas propriedades a mais importante é a ausência de ordem de longo alcance (para teorias $U(1)$) para $n = 1$ ou 2 . Mostrou-se recentemente⁽⁹⁾ que teorias com índice de simetria $n = 1$ ou $n = 2$ não possuem ordem de longo alcance para qual-

quer $T > 0$. Reveremos, o menos pedante possível, os principais aspectos deste resultado. A prova é uma extensão do teorema de Mermin-Wagner⁽⁵⁻⁸⁾ e se baseia no uso da desigualdade de Bogoliubov^(19,20) para limitar superiormente o parâmetro de ordem do sistema (por exemplo, a magnetização, no caso em que a simetria for global).

Consideremos um modelo com variáveis definidas nos sítios de uma rede hipercúbica d -dimensional e cuja Hamiltoniana seja dada por (II.4). Para se analisar a estrutura de simetria de tal modelo seguimos o procedimento geral, empregado na prova do teorema de Mermin-Wagner, usando-se a desigualdade de Bogoliubov:

$$\frac{1}{2}\beta \langle \{A, A^\dagger\} \rangle \langle [C, H], C^\dagger \rangle \geq |\langle [C, A] \rangle|^2 \quad (\text{III.3})$$

onde a adaga denota o Hermitiano conjugado, e $[,]; \{, \}$ denotam respectivamente os comutadores e anticomutadores. $\langle \sigma \rangle$ representa a média térmica do operador σ à temperatura $T = \beta^{-1}$. Denotamos por $|\phi(\vec{x})\rangle$ o estado (ou configuração) do sistema, definido pelo conjunto $\{\phi(\vec{x})\}$ para todos os pontos $\vec{x}$ da rede. Podemos encontrar operadores A e C tais que pela sua ação nestes estados nos conduza a limites superiores da magnetização do sistema. Um conjunto destes operadores é dado por:

$$C_{\vec{k}} |\phi(\vec{x})\rangle = |\phi(\vec{x}) - \delta\phi \cos \vec{k} \cdot \vec{x}\rangle + |\phi(\vec{x}) - \delta\phi \sin \vec{k} \cdot \vec{x}\rangle \quad (\text{III.4})$$

e

$$A_{\vec{k}} |\phi(\vec{x})\rangle = \sum_{\vec{y}} \cos \vec{k} \cdot \vec{y} \sin \phi(\vec{y}) |\phi_1(\vec{x})\rangle + \sum_{\vec{y}} \sin \vec{k} \cdot \vec{y} \sin \phi(\vec{y}) |\phi_2(\vec{x})\rangle \quad (\text{III.5})$$

onde $|\phi_1(\vec{x})\rangle \equiv |\phi(\vec{x}) + \delta\phi \cos \vec{k} \cdot \vec{x}\rangle,$

$$|\phi_2(\vec{x})\rangle \equiv |\phi(\vec{x}) + \delta\phi \sin \vec{k} \cdot \vec{x}\rangle \quad (\text{III.6})$$

Nas expressões acima $\delta\phi$ é um campo constante pequeno e $\vec{k}$ são vetores de onda pertencentes à primeira zona de Brillouin.

Consideremos o caso $n = 2$. Para se estudar a possibilidade de quebra espontânea de simetria global, consideramos a Hamiltoniana da forma (II.4), com um termo adicional que quebre esta simetria explicitamente. Escolhemos este termo como sendo a interação do sistema com um campo magnético externo:

$$H = H_0(\phi) - h \sum_{\vec{x}} \cos \phi(\vec{x}) \quad (\text{III.7})$$

onde H_0 é a antiga Hamiltoniana (II.4). Assumimos que não haja explicitamente interações de longo alcance, isto é $|\vec{r}_j|$ deve ser finito. Assumimos também que as funções f_p em (II.4) possam ser expandidas, em série de Taylor, em torno do zero de seu argumento.

$$f_p(z) = f_p(0) + f'_p(0)z + \frac{1}{2} f''_p(0)z^2 + \dots \quad (\text{III.8})$$

Usamos agora (III.4) e (III.5) para calcular (III.3). Para pequenos incrementos $\delta\phi$ teremos

$$\langle [C_k, A_k] \rangle = \delta\phi \langle \sum_{\vec{x}} \cos \phi(\vec{x}) \rangle = m N \delta\phi \quad (\text{III.9})$$

onde N é o número de sítios da rede e m é a magnetização do sistema. Obtemos ainda que

$$\sum_{\vec{k}} \frac{1}{2} \langle \{A_{\vec{k}}, A_{\vec{k}}^{\dagger}\} \rangle \leq \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{x}, \vec{x}'} \cos \vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}') \leq N^2 \quad (\text{III.10})$$

e que

$$\langle \phi(\vec{x}) | [[C_E, H], C_E^+] | \phi(\vec{x}) \rangle =$$

$$(\delta\phi)^2 \sum_{\vec{x}} \left\{ h \cos \phi(\vec{x}) + \sum_{p=1}^S f_p'' \sum_{i,j=1}^{q(p)} C_{p_i} C_{p_j} \cos \vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right\} \quad (\text{III.11})$$

onde as constantes C_{p_i} foram introduzidas em (II.4).

Assumimos que a média térmica $\langle f_p'' \rangle \leq \gamma$ para todo p , onde γ é real positivo. Tomando-se a média térmica de (III.11) obtemos*

$$\langle [[C_E, H], C_E^+] \rangle \leq (\delta\phi)^2 N \left[hm + \gamma \sum_p \sum_{i,j=1}^{q(p)} C_{p_i} C_{p_j} \cos \vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right] \quad (\text{III.12})$$

Usando-se as Equações (II.9-12) em (III.3) obtemos a desigualdade

$$m^2 \leq \beta N \left| \sum_{\vec{k}} \frac{1}{r \sum_p \epsilon_p + hm} \right|^{-1} \quad (\text{III.13})$$

onde a soma em $\vec{k}$ é sobre a primeira zona de Brillouin e

$$\epsilon_p = \left[\sum_{i=1}^{q(p)} C_{p_i} \cos \vec{k} \cdot \vec{r}_i \right]^2 + \left[\sum_{i=1}^{q(p)} C_{p_i} \sin \vec{k} \cdot \vec{r}_i \right]^2 \quad (\text{III.14})$$

Mostraremos a seguir que se H_0 for invariante pela transformação

$$\phi(x_1, \dots, x_d) \rightarrow \phi(x_1, \dots, x_d) + \Delta(x_3, \dots, x_d) \quad (\text{III.15})$$

então a soma sobre k em (III.13) divergirã no limite termodinâmico à medida que h tenda a zero, implicando que a magnetização deva ser nula neste limite.

Conforme discutimos no capítulo II, H_0 deve ser escrito

* Observe que estamos lidando com uma teoria clássica, "bras" e "kets" são vetores linhas e colunas no espaço $\vec{x}$ e os operadores são matrizes que agem neste espaço.

na forma (II.4), em que cada função f_p é invariante separadamente por (III.15). Mais ainda, os coeficientes C_p para cada potencial deve satisfazer:

$$\sum_{j \in \alpha} C_{p_j} = 0 \quad (\text{III.16})$$

onde α representa o conjunto de todos os índices de spins pertencentes ao plano $(x_1, x_2)^*$. Como $\epsilon_p = 0$ para $k_1 = 0 = k_2$ podemos expandir ϵ_p em série de Taylor no entorno de seu zero, e teremos:

$$\epsilon_p = k_1^2 U_p(\vec{k}) + k_2^2 V_p(\vec{k}) + k_1 k_2 W_p(\vec{k}) \quad (\text{III.17})$$

onde U_p, V_p, W_p são funções finitas de $\vec{k}$. Considere agora uma rede de dimensão linear L muito grande. Definindo-se

$U(\vec{k}) \equiv \gamma \sum_p U_p(\vec{k})$; etc. e trocando-se a soma sobre $\vec{k}$ por uma integral, a desigualdade (III.13) nos dará

$$m^2 \leq \frac{2\pi^2 \beta}{I_d(L, h; m)} \quad (\text{III.18})$$

onde

$$I_d = \int_{\frac{1}{L}} d^d k [k_1^2 U + k_2^2 V + k_1 k_2 W + h m]^{-1} \quad (\text{III.19})$$

como $\epsilon_p \geq 0$ para cada p , olhando a região de integração onde k_1 e k_2 são próximos de $\frac{1}{L}$ é claro que I_d divergirá pelo menos como $\ln L$ no limite $h \rightarrow 0$. Portanto, no limite termodinâmico $m^2 \rightarrow 0$ conforme $h \rightarrow 0$ e o sistema não exibirá ordem de longo alcance, isto é, a simetria global não poderá ser quebrada espontaneamente.

* Na notação do contínuo isto é equivalente à afirmação que H_0 depende apenas de ϕ através de $\partial_1 \phi$ e $\partial_2 \phi$. Isto permite que tenhamos, em H_0 , termos do tipo $(\partial_3 \partial_2 \phi)^2$, mas não podemos ter termos do tipo, por exemplo, $(\partial_3 \phi)^2$.

Contrastando os argumentos acima mencionados com aqueles usados na prova usual do teorema de Mermin-Wagner⁽⁵⁻⁸⁾, vemos claramente que o fato essencial que nos conduz à ausência de ordem de longo alcance não é a dimensionalidade do sistema, mas sim a dimensionalidade do espaço, suporte sobre o qual a simetria é global. É trivial aplicar-se os argumentos acima explicitados para provar que também não pode existir ordem de longo alcance para teorias com um índice de simetria $n = 1$. Para isto basta notar, que quando $n = 1$, ϵ_p pode ser escrito da mesma forma que (III.17), com $V_p = W_p = 0$, o que implicará que a divergência de I_d , no limite termodinâmico, será no mínimo linear.

Mostraremos a seguir que para as teorias com índices de simetria $n = 1$ e $n = 2$, não apenas a simetria global não pode ser espontaneamente quebrada, mas de fato, todas as simetrias semi-locais de índice 1 e 2 não podem ser espontaneamente quebradas nestas teorias. Concentrar-nos-emos novamente no caso $n = 2$, pois é simples construir argumentos similares para o caso $n = 1$.

Para se testar a possibilidade de quebra espontânea da simetria semiglobal $n = 2$, precisamos acoplar em H_0 , um potencial que apenas quebre tal simetria, deixando as demais subsimetrias da simetria índice 2, particularmente a global, intactas. Como H_0 é invariante por (III.15) podemos facilmente concluir que o objeto relevante para se testar a quebra da simetria $n = 2$ é a função de dois pontos, definida por:

$$\Gamma_{\vec{M}} \equiv \cos(\phi(\vec{x}) - \phi(\vec{x} + \vec{M})) \quad (\text{III.20})$$

onde $\vec{M}$ é um vetor deslocamento qualquer na rede, com projeção não nula no plano (x_1, x_2) . É claro que $\sum_{\vec{M}} \Gamma_{\vec{M}}$ possui simetria global, embora não possua a simetria $n = 2$. Consideremos portanto a Hamiltoniana:

$$H = H_0 - h_{\vec{M}} \sum_{\vec{x}} \Gamma_{\vec{M}}(\vec{x}) \quad (\text{III.21})$$

O parâmetro de ordem associado à simetria índice 2 será dado por:

$$m_{\vec{M}} \equiv \left\langle \sum_{\vec{x}} \Gamma_{\vec{M}}(\vec{x}) \right\rangle \quad (\text{III.22})$$

Assim como fizemos no caso da simetria global, testaremos a possibilidade de quebra da simetria semi-global $n = 2$ calculando-se (III.22), usando a Hamiltoniana (III.21), e então tomaremos o limite $h_{\vec{M}} \rightarrow 0$. Caso $m_{\vec{M}}$ seja não nulo, em tal limite, teríamos a quebra espontânea da simetria semi-global. A fim de construir-se um limite superior para $m_{\vec{M}}^2$ usamos novamente a desigualdade de Bogoliubov (III.3) com o operador $C_{\vec{k}}$ definido por (III.4) e

$$\begin{aligned} A_{\vec{k}} |\phi(\vec{x})\rangle &\equiv \sum_{\vec{y}} [\cos \vec{k} \cdot \vec{y} - \cos \vec{k} \cdot (\vec{y} - \vec{M})] \Delta_{\vec{M}}(\phi(\vec{y})) |\phi_1(\vec{y})\rangle \\ &+ \sum_{\vec{y}} [\sin \vec{k} \cdot \vec{y} - \sin \vec{k} \cdot (\vec{y} - \vec{M})] \Delta_{\vec{M}}(\phi(\vec{y})) |\phi_2(\vec{y})\rangle \end{aligned} \quad (\text{III.23})$$

onde, da mesma forma que no caso global

$$\begin{aligned} \phi_1(\vec{x}) &\equiv |\phi(\vec{x}) + \delta\phi \cos \vec{k} \cdot \vec{x}\rangle \\ \phi_2(\vec{x}) &\equiv |\phi(\vec{x}) + \delta\phi \sin \vec{k} \cdot \vec{x}\rangle \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

e

$$\Delta_{\vec{M}}(\phi(\vec{y})) \equiv \sin(\phi(\vec{y}) - \phi(\vec{y} + \vec{M})) \quad (\text{III.24})$$

Efetuando-se cálculos análogos àqueles realizados para se obter (III.13), obteremos a desigualdade

$$m_{\vec{M}}^2 \leq \frac{(2\pi)^d \beta}{4} \left[\int_{\frac{1}{L}}^d d\vec{k} \frac{\sum_{\vec{M}}^2(\vec{k})}{k_1^2 u(\vec{k}) + k_2^2 v(\vec{k}) + k_1 k_2 \omega(\vec{k}) + \sum_{\vec{M}}(\vec{k}) h_{\vec{M}} m_{\vec{M}}} \right]^{-1} \quad (\text{III.25})$$

$$\chi_{\vec{M}} = 1 - \cos \vec{k} \cdot \vec{M} \quad (\text{III.26})$$

Como $\vec{M}$ possui componentes fora do plano (x_1, x_2) , o numerador do integrando de (III.25) não é nulo quando $k_1=k_2=0$. Devido à positividade do integrando em (III.25) a análise prossegue da mesma forma que em (III.19). A integral diverge, no limite termodinâmico, devido à contribuição do integrando nas imediações de $k_1=k_2=0$. A divergência é pelo menos com $\ln L$ conforme $h_M \rightarrow 0$. Consequentemente $\chi_{\vec{M}}^2 = 0$ no limite termodinâmico e portanto a simetria índice 2 não pode ser espontaneamente rompida.

É interessante observar que essencialmente os mecanismos responsáveis à ausência de quebra de simetria são os mesmos, em ambos os casos analisados. São as mesmas excitações de "fônons" de grande comprimento de onda (associada ao caráter contínuo do grupo $U(1)$) que induzem à desordem, em ambas as simetrias. Podemos aplicar argumentos similares para se testar a quebra de simetria usando-se, ao invés da função de correlação $\chi_{\vec{M}}$, funções de correlação de multicorpos*.

Fecharemos esta seção com uma discussão sobre possíveis extensões ao teorema acima. A primeira extensão corresponde a simetrias semi-locais da forma geral (III.2), isto é, a situação em que a função de calibre Λ é função de todas as d coordenadas, mas sujeita a n vínculos da forma

$$\theta_1 \Lambda = \theta_2 \Lambda = \dots = \theta_n \Lambda = 0 \quad (\text{III.2})$$

sendo θ_i um conjunto de n operadores de diferenças linearmente independentes. Não é difícil estender-se os resultados acima demonstrados, para esta simetria índice n mais geral. Lembremos que no

* Um exemplo de uma teoria cuja simetria semiglobal é associada à função de correlação de 4 corpos foi estudada previamente na literatura⁽⁴⁾ e será brevemente analisada na próxima seção.

caso restrito de transformação do tipo (III.15) todos os termos em H_0 dependem de ϕ apenas por meio de $\partial_1\phi$ e $\partial_2\phi$, o que implicava que o inverso do propagador, no espaço dos momentos, deveria ter a forma (III.17). Do mesmo modo, existe uma grande classe de operadores O_1 e O_2 , tal que a simetria geral (III.2) em H_0 implica que ele deva depender de ϕ por meio de $O_1\phi$ e $O_2\phi$. Isto implicará que ϵ_p terá uma estrutura similar a (III.17), em que o papel de k_1^2 e k_2^2 serão desempenhado por outras combinações quadráticas dos momentos, refletindo a forma dos operadores O_1 e O_2 . É possível portanto, em muitos casos, estabelecer um limite para o quadrado da magnetização (ou alguma função de m pontos) da mesma forma da-quele encontrado anteriormente em (III.18) ou (III.25) indicando a ausência de quebra espontânea de simetria global ou índice 2 (planar). É interessante, embora não o fizemos, descobrir precisamente as condições gerais necessárias para que os operadores O_i nos conduza a tal conclusão*.

Outras generalizações possíveis de nosso teorema são com respeito a teorias com simetrias não Abelianas, e com teorias com mais de um campo. É claramente razoável acreditar que resultados similares possam ser provados no caso de simetrias não Abelianas, pois geralmente esperamos que a desordem é mais facilmente gerada conforme o número de graus de liberdade, por ponto da rede, cresce. No caso de teorias com mais de um campo escalar elementar, a generalização de nosso teorema nos deve permitir discutirmos a ausência de quebra de simetria numa vasta variedade de teorias, indo de teorias globalmente simétricas a duas dimensões até teorias com invariança local em qualquer dimensão.

* Na próxima seção veremos um exemplo de uma teoria com índice de simetria $n=2$ invariante pela transformação geral (III.2), e que não exhibe quebra espontânea de simetrias.

III-B - Modelos Específicos

A maioria das propriedades relevantes das teorias com simetrias não usuais, que estamos tratando neste trabalho, podem ser encontradas em modelos bastante simples. Nesta seção discutiremos algumas destas teorias e enumeraremos suas peculiaridades. O modelo mais simples dentre os três será tratado, por completudeza, com detalhes pedânticos.

Dois dos modelos que discutiremos são autoduais, no sentido geral descrito na seção (II-C) e um terceiro, batizado por modelo de três plaquetas, é de fato dual a uma teoria de calibre (local). Incluimos este terceiro exemplo para ilustrar o fato de que autodualidade não é um ingrediente essencial na determinação das propriedades críticas desta classe de teorias.

Antes de prosseguirmos para exemplos específicos, gostaríamos de definir os tipos gerais de interações que usaremos na construção de nossos modelos. No contexto de uma rede hipercúbica simples com spins $U(1)$ localizado em seus sítios, definimos uma interação r -dimensional multiplicando-se entre si os 2^r spins pertencentes aos vórtices dos elementos r -dimensionais da rede. A fim de manter-se a simetria global, a interação é definida tomando-se o complexo conjugado da metade dos spins em cada termo da interação. Em geral, portanto, os tipos de interações que estamos interessados são da seguinte forma:

$$\begin{aligned} I_r(i; x_1, x_2, \dots, x_r) &\equiv \frac{1}{2} S(i) S^+(i+\hat{x}_1) S^+(i+\hat{x}_2) \dots \\ &\dots S^+(i+\hat{x}_r) S(i+\hat{x}_1+\hat{x}_2) S(i+\hat{x}_1+\hat{x}_3) \dots \\ &\dots S^+(i+\sum_{j=1}^r \hat{x}_j) + \text{C.C.} \end{aligned} \quad (\text{III.27})$$

onde i indexa o sítio da rede e x_j é a coordenada do vizinho pró-

ximo ao sítio i na direção especificada por $\hat{x}_j$.

Vemos na figura 2, abaixo, exemplos numa rede hipercúbica das interações $I_1(i; x_1)$, $I_2(i; x_1, x_2)$ e $I_3(i; x_1, x_2, x_3)$.

Fig. 2

Conforme já adiantamos na seção (II-B), podemos construir a Hamiltoniana de uma teoria com índice de simetria n , a d dimensões, tomando uma interação da forma (III.27) com $r = d-n+1$ e $(n-1)$ interações de dois corpos, entre vizinhos próximos, ($r=1$) ao longo das $(n-1)$ direções ortogonais ao subespaço $(d-n+1)$ -dimensional da rede, gerado pelo simplexo que define I_{d-n+1} , isto é:

$$-H_{nd} = \sum_{j=d-n+1}^d J_j \sum_i I_1(i; x_j) + k \sum_i I_{d-n+1}(i; x_1, \dots, x_{d-n+1}) \quad (\text{III.28})$$

A Hamiltoniana acima é claramente invariante pela transformação

$$\phi(\vec{r}) \rightarrow \phi(\vec{r}) + \sum_{i=1}^{d-n+1} \Delta_i(x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_{d-n+1}) \quad (\text{III.29})$$

onde $\vec{r}$ denota o sítio da rede cujas coordenadas são $(x_1, x_2, \dots, x_d)$ e Δ_i são funções arbitrárias de seus argumentos.

O primeiro, e mais simples, modelo que trataremos é um modelo com índice de simetria $n=2$ em três dimensões, o qual denominamos modelo 24 de Fevereiro*. Seu Hamiltoniano é dado por:

$$-H = J \sum_i I_1(i; z) + k \sum_i I_2(i; x, y) \quad (\text{III.30})$$

onde I_1 e I_2 são definidos por (III.27) e os spins $S(\vec{r})$ são variáveis pertencentes ao grupo $U(1)$,

$$S(\vec{r}) = \exp(i\phi(\vec{r})) \quad 0 \leq \phi(\vec{r}) < 2\pi \quad (\text{III.31})$$

* Tal denominação se deve ao fato do modelo ser composto por interações de 2 e 4 corpos e coincidentemente ter sido inventado no dia 24 de fevereiro.

ou do grupo Z_N

$$S(\vec{r}) = \exp\left(\frac{i2\pi}{N}p(\vec{r})\right) \quad p(\vec{r})=0,1,\dots,N-1. \quad (III.32)$$

As interações são portanto de dois corpos na direção $\hat{z}$ e de quatro corpos ao longo da plaqueta elementar no plano $x-y$ (veja Fig. 3). É fácil ver que esta teoria é invariante mediante a transformação

$$\phi(x,y,z) \rightarrow \phi(x,y,z) + \lambda_1(x) + \lambda_2(y) \quad (III.33)$$

sendo λ_1 e λ_2 funções arbitrárias. Existem para este modelo, duas simetrias distintas com índice de simetria $n=2$: H é invariante por uma rotação uniforme de todos os spins num plano qualquer $x-z$ ou $y-z$. Como $\lambda_1(x) + \lambda_2(y)$ não é função arbitrária de x e y , a teoria não possui simetria índice -1.

Fig. 3

No caso em que os spins pertençam ao grupo Z_N , podemos reescrever a Hamiltoniana (III.30) na forma

$$-H = J \sum_S \cos \Delta_2 p(\vec{r}) + k \sum_P \cos \Delta_4 p(\vec{r}) \quad (\text{III.34})$$

onde

$$\Delta_2 p(\vec{r}) \equiv \frac{2\pi}{N} (p(\vec{r} + \hat{z}) - p(\vec{r})) \quad (\text{III.35a})$$

e

$$\Delta_4 p(\vec{r}) \equiv \frac{2\pi}{N} [p(\vec{r}) - p(\vec{r} + \hat{x}) + p(\vec{r} + \hat{x} + \hat{y}) - p(\vec{r} + \hat{y})] \quad (\text{III.35b})$$

sendo $\hat{x}$, $\hat{y}$ e $\hat{z}$ vetores unitários e $p(\vec{r}) = 0, 1, \dots, N-1$. A primeira soma em (III.34) é sobre os sítios (S) enquanto que a segunda é sobre todas as plaquetas elementares (p) da rede no plano x-y. Por simplicidade nos concentraremos, daqui por diante, ao caso isotrópico $J = k$ e assumiremos que a teoria esteja definida numa rede finita de dimensão linear L e sujeita a condições de contorno periódicas.

O modelo (III.34) é autodual no sentido geral, isto é, sua formulação Gaussiana periódica (ou formulação Villain⁽¹⁷⁾) é autodual (veja seção II-C). Mais ainda, o Hamiltoniano dual possui a mesma forma que (III.34), incluindo contudo, harmônicos extras no Hamiltoniano original⁽¹²⁻¹⁵⁾. A generalização da teoria (III.34) que inclui tais harmônicos será então autodual no sentido usual^(12-15, 21-25).

A função de partição para a versão Gaussiana periódica de (III.34) é dada por

$$Z_V(\beta) = \sum_{\{p(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{k_p=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{k_z=-\infty\}}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \left\{ \sum_S [\Delta_2 p(\vec{r}) - 2\pi k_z]^2 + \sum_P [\Delta_4 p(\vec{r}) - 2\pi k_p]^2 \right\} \right\}. \quad (\text{III.36})$$

onde foram introduzidos os campos inteiros k_z e k_p definidos* respectivamente nas ligações z e nas plaquetas dos planos $x-y$. A fim de efetuar a transformação de dualidade, usamos as fórmulas de soma de Poisson:

$$\sum_{k_z=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} (\Delta_2 p - 2\pi k_z)^2 \right\} = (\sqrt{2\pi\beta}) \sum_{l_z=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{l_z^2}{2\beta} + i l_z \Delta_2 p \right\} \quad (\text{III.37a})$$

e

$$\sum_{k_p=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} (\Delta_4 p - 2\pi k_p)^2 \right\} = (\sqrt{2\pi\beta}) \sum_{l_p=-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{l_p^2}{2\beta} + i l_p \Delta_4 p \right\} \quad (\text{III.37b})$$

e obtemos

$$Z_V(\beta) = C(\beta) \sum_{\{l_z=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{l_p=-\infty\}}^{\infty} \exp -\frac{1}{2\beta} \left\{ \sum_S l_z^2 + \sum_P l_p^2 \right\}.$$

$$\cdot \sum_{\{P(\vec{r})=0\}}^{N-1} \exp i \left\{ \sum_S l_z \Delta_2 p(\vec{r}) + \sum_P l_p \Delta_4 p(\vec{r}) \right\} \quad (\text{III.38})$$

onde $C(\beta)$ é uma constante multiplicativa (não singular) sem importância. Os campos l_z e l_p são definidos nas ligações e nas plaquetas $x-y$, respectivamente; por conveniência podemos escrevê-los em termos de quatro outros campos:

$$l_z(\vec{r} + \frac{\hat{z}}{2}) = N k_z(\vec{r} + \frac{\hat{z}}{2}) + u_z(\vec{r} + \frac{\hat{z}}{2}) \quad (\text{III.39a})$$

$$l_p(\vec{r} + \frac{\hat{z}}{2}) = N k_p(\vec{r} + \frac{\hat{z}}{2}) + u_p(\vec{r} + \frac{\hat{z}}{2}) \quad (\text{III.39b})$$

* O objetivo da introdução de tais campos é a restauração da periodicidade N da Hamiltoniana que é perdida numa simples aproximação Gaussiana.

com

$$-\infty < k_z, k_p < \infty \text{ e } 0 \leq u_z, u_p \leq N-1 \quad (\text{III.39c})$$

e então (III.38) toma a forma:

$$Z_V(\beta) = \sum_{\{u_z=0\}}^{N-1} \sum_{\{k_z=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{u_p=0\}}^{N-1} \sum_{\{k_p=-\infty\}}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta} \left[\sum_S (Nk_z + u_z)^2 + \sum_P (Nk_p + u_p)^2 \right] \right\} \cdot \sum_{\{p(\vec{r})=0\}}^{N-1} \exp i \left\{ \sum_S u_z \Delta_2 p(\vec{r}) + \sum_P u_p \Delta_4 p(\vec{r}) \right\}. \quad (\text{III.40})$$

A fim de efetuar-se a soma sobre $p(\vec{r})$ devemos primeiramente isolar $p(\vec{r})$, o que pode ser feito pela integração por partes:

$$\sum_S u_z \Delta_2 p(\vec{r}) = - \sum_S p(\vec{r}) \Delta_2 u_z(\vec{r} - \frac{\hat{z}}{2}) \quad (\text{III.41a})$$

e

$$\sum_P u_p \Delta_4 p(\vec{r}) = \sum_P p(\vec{r}) \Delta_4 u_p(\vec{r} - \frac{\hat{x} + \hat{y}}{2}) \quad (\text{III.41b})$$

A última soma em (III.40) pode ser escrita como

$$\prod_{\vec{r}} \sum_{p(\vec{r})=0}^{N-1} \exp \left\{ i \frac{2\pi}{N} p(\vec{r}) \cdot \left[\frac{N}{2\pi} \Delta_4 u_p(\vec{r} - \frac{\hat{x} + \hat{y}}{2}) - \frac{N}{2\pi} \Delta_2 u_z(\vec{r} - \frac{\hat{z}}{2}) \right] \right\}. \quad (\text{III.42})$$

Como Z_V é periódica em $A_p = \frac{N}{2\pi} \Delta_4 u_p$ e em $A_z = \frac{N}{2\pi} \Delta_2 u_z$ com período N , podemos redefinir as variáveis A_p e A_z como variáveis modulo N , e a soma (III.42) nos dará um produto de deltas de Kronecker, associados aos pontos da rede:

$$\prod_{\vec{r}} N \cdot \delta \left(\Delta_4 u_p(\vec{r} - \frac{\hat{x} + \hat{y}}{2}) - \Delta_2 u_z(\vec{r} - \frac{\hat{z}}{2}) \right) \quad (\text{III.43})$$

Para satisfazer os vínculos

$$\Delta_4 u_p(\vec{r} - \frac{\hat{x} + \hat{y}}{2}) = \Delta_2 u_z(\vec{r} - \frac{\hat{z}}{2}) \quad \forall \vec{r} \quad (\text{III.44a})$$

$$0 \leq u_p, u_z \leq N-1 \quad \forall p, z \quad (\text{III.44b})$$

introduzimos o campo dual $\psi(\vec{r})$, definido na rede dual:

$$\vec{r} \equiv \vec{r} + (\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})/2 \quad (\text{III.45})$$

Para satisfazer (III.44) o campo dual deve ser um campo inteiro, $0 \leq \psi(\vec{r}) \leq N-1$, tal que:

$$u_z(\vec{r} + \frac{\hat{z}}{2}) = \frac{N}{2\pi} \Delta_4 \psi(\vec{r} - \hat{x} - \hat{y}) \quad (\text{mod } N) \quad (\text{III.46a})$$

e

$$u_p(\vec{r} + \frac{\hat{x} + \hat{y}}{2}) = \frac{N}{2\pi} \Delta_2 \psi(\vec{r} - \frac{\hat{z}}{2}) \quad (\text{mod } N) \quad (\text{III.46b})$$

É fácil inverter-se as equações (III.46) de modo a obtermos $\psi(\vec{r})$ em termos de u_z e u_p . Uma possível solução é dada pela linha de variáveis u_p :

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\eta=0}^{\infty} u_p(\vec{r} + \frac{\hat{x} + \hat{y}}{2} - \eta \hat{z}) \quad (\text{III.47})$$

repare que os vínculos (III.44) nos permite transformações locais de calibre ao longo da linha de (III.47), de maneira que existem um número infinito (discreto) de soluções equivalentes.

Em suma, para cada configuração das variáveis u_z, u_p podemos construir uma configuração correspondente das variáveis duais $\psi(\vec{r})^*$, ou inversamente, dado um conjunto de campos duais as equações (III.46) nos permite construir uma configuração de va

* Na realidade para cada configuração de variáveis u_z, u_p existem G configurações equivalentes de $\psi(\vec{r})$, onde G é a degenerescência do estado fundamental da Hamiltoniana. Veja refs. (21-25) para detalhe deste ponto.

riáveis u_z, u_p que satisfaçam aos vínculos (III.44).

Assim, substituindo-se os traços sobre o conjunto u_z, u_p em termos do traço sobre $\psi(\vec{r})$ e usando-se (III.46) em (III.40) obtemos a forma dual de Z_v

$$Z_v(\beta) = \tilde{C}(\beta) \sum_{\{\psi(\vec{r})=0\}}^{N-1} \sum_{\{k_p=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{k_z=-\infty\}}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{\beta^*}{2} \left\{ \sum_{\vec{s}} \left(\Delta_z \psi(\vec{r}) - 2\pi k_z \right)^2 + \sum_{\vec{p}} \left(\Delta_p \psi(\vec{r}) - 2\pi k_p \right)^2 \right\} \right\} \quad (\text{III.48})$$

onde $\tilde{C}(\beta)$ é uma constante multiplicativa e $\vec{s}$ e $\vec{p}$ referem-se aos sítios e plaquetas x-y da rede dual, respectivamente, e

$$\beta^* = \frac{N^2}{4\pi^2\beta} \quad (\text{III.49})$$

Comparando-se (III.49) com (III.36) chegamos ao importante resultado

$$Z_v(\beta) = \tilde{C}(\beta) Z_v(\beta^*) \quad (\text{III.50})$$

o que prova a autodualidade da teoria. Este fato nos garante que caso o modelo exiba uma única transição de fase, esta deve ocorrer no ponto autodual $\beta = \beta^* = N/2\pi$.

No apêndice B construímos, por completeza, a transformação de dualidade na versão Hamiltoniana quântica^(26,27) (tempo contínuo) de (III.30). Nesta versão mostramos que o modelo, assim como na versão clássica Villain, é autodual para todo N.

Conforme mencionamos previamente, escolhemos a forma Gaussiana periódica em (III.36) somente por razões de simplicidade. Poderíamos igualmente ter utilizado a Hamiltoniana geral^(12-15,24) que possui as mesmas propriedades de simetria que (III.34) ou (III.36).

$$-H = \sum_{\alpha=1}^{[N]} J_{\alpha} \left\{ \sum_S (\cos \alpha A_2 p(\vec{r}) - 1) + \sum_P (\cos \alpha A_4 p(\vec{r}) - 1) \right\}, \quad (\text{III.51})$$

onde $[N]$ significa a parte inteira de $\frac{N}{2}$. Os possíveis valores dos pesos de Boltzmann, referentes às interações nas ligações e plaquetas são:

$$\chi_{\zeta} = \exp \sum_{\alpha=1}^{[N]} J_{\alpha} \left(\cos \frac{2\pi}{N} \alpha \zeta - 1 \right), \quad \zeta = 0, 1, \dots, N-1 \quad (\text{III.52})$$

Para efetuarmos a transformação de dualidade expandimos os pesos de Boltzmann, referentes a cada ligação z e a cada plaqueta $(x-y)$, em série de Fourier no grupo Z_N .

$$\chi_{\zeta} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \chi_{\alpha}^* \exp i \frac{2\pi}{N} \alpha \zeta, \quad \zeta = 0, 1, \dots, N-1 \quad (\text{III.53})$$

onde as constantes χ_{α}^* , $\alpha = 0, 1, \dots, N-1$ são funções dos acoplamentos $J_1, J_2, \dots, J_{[N]}$ e podem ser obtidas invertendo-se (III.53)

$$\chi_{\zeta}^* = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \chi_{\alpha} \exp i \frac{2\pi}{N} \alpha \zeta, \quad \zeta = 0, 1, \dots, N-1 \quad (\text{III.54})$$

o que implica que $\chi_{\ell} = \chi_{N-\ell}$; $\chi_{\ell}^* = \chi_{N-\ell}^*$, $\ell = 0, 1, \dots, N-1$.

Devemos portanto ter apenas cossenos na expansão de Fourier:

$$\ln \chi_{\zeta}^* = \sum_{\alpha=0}^{[N]} J_{\alpha}^* \left[\cos \frac{2\pi}{N} \alpha \zeta - 1 \right], \quad \zeta = 0, 1, \dots, N-1 \quad (\text{III.55})$$

e exponenciando-se a expressão acima, temos:

$$\chi_{\zeta}^* = \exp \sum_{\alpha=0}^{[N]} J_{\alpha}^* \left[\cos \frac{2\pi}{N} \alpha \zeta - 1 \right]; \quad \zeta = 0, 1, \dots, N-1 \quad (\text{III.56})$$

onde J_α^* são funções dos acoplamentos originais $J_1, J_2, \dots, J_{[N]}$. Usando-se (III.53) e (III.56) na função de partição referente à Hamiltoniana geral (III.51), obtemos:

$$Z\{J_\alpha\} = \sum_{\{u_z=0\}}^{N-1} \sum_{\{u_p=0\}}^{N-1}$$

$$\exp \sum_{\alpha=0}^{[N]} J_\alpha^* \left\{ \sum_S (\cos \frac{2\pi}{N} \alpha u_z - 1) + \sum_P (\cos \frac{2\pi}{N} \alpha u_p - 1) \right\}.$$

$$\sum_{\{p(\vec{r})=0\}}^{N-1} \exp i \left\{ \sum_S u_z \Delta_2 p(\vec{r}) + \sum_P u_p \Delta_4 p(\vec{r}) \right\}. \quad (\text{III.57})$$

onde u_z e u_p são variáveis definidas nas ligações. De forma idêntica ao que fizemos em (III.41) isolamos as variáveis $p(\vec{r})$ e efetuamos as somas sobre $p(\vec{r})$, obtendo para o último termo de (III.57) os vínculos

$$\prod_{\vec{r}} N \delta \left(\Delta_4 u_p \left(\vec{r} - \frac{\hat{x} + \hat{y}}{2} \right) - \Delta_2 u_z \left(\vec{r} - \frac{\hat{z}}{2} \right) \right) \quad (\text{III.43})$$

Para satisfazer estes vínculos introduzimos, como anteriormente (III.44-47), mutatus mutantis, o campo dual $0 \leq \psi(\vec{r}) \leq N-1$ definido nos sítios da rede dual e reescrevemos a função de partição

$$Z\{J_\alpha\} = \tilde{D}(J_\alpha) \sum_{\{\tilde{\psi}(\vec{r})=0\}}^{N-1} \exp \sum_{\alpha} J_\alpha^* \left[\sum_S (\cos \alpha \Delta_2 \tilde{\psi} - 1) + \sum_P (\cos \alpha \Delta_4 \tilde{\psi} - 1) \right] \quad (\text{III.58})$$

onde $\tilde{D}(J_\alpha)$ é uma constante. Desta forma obtemos o importante resultado:

$$Z\{J_\alpha\} = \bar{D} Z\{J_\alpha^*\} \quad (\text{III.59a})$$

ou em termos dos fatores de Boltzmann

$$Z\{\chi_\alpha\} = \bar{D} Z\{\chi_\alpha^*\} \quad (\text{III.59b})$$

Este resultado é a generalização da autodualidade de Kramer Wannier⁽²⁸⁾ para um espaço com mais de um acoplamento. A superfície autodual é aquela superfície fixa (com respeito à transformação de dualidade) dada pelas equações:

$$\chi_z^* = \chi_z \quad z = 0, 1, \dots, [N] \quad (\text{III.60})$$

Repare que estes resultados são exatamente análogos àqueles conhecidos do modelo global Z_N a duas dimensões, e modelo de calibre Z_N a quatro dimensões^{(12,13)*}. A versão Potts⁽²⁹⁾ de nosso modelo corresponde a termos $J_1 = J_2 = \dots = \frac{1}{2} (1 - (-1)^N) J_{[N]}$ e esta é autodual para todo N com ponto de autodualidade.

$$\chi_1 = \chi_2 = \dots = \chi_{[N]} = \frac{1}{\sqrt{N+1}} \quad (\text{III.61})$$

enquanto a versão relógio (III.34) que corresponde a $J = J\delta_{\alpha,1}$ em (III.51) é autodual para $N = 2, 3$ e 4 com pontos de autodualidade

* Em geral, a estrutura de dualidade para todas as teorias autoduais de um dado grupo de simetria, deve ser idêntica, independente da dimensionalidade do espaço^(12-15, 21-25). É importante ressaltar o fato de que a autodualidade (III.50) e (III.59) não é determinada pelos operadores particulares que definem a Hamiltoniana do modelo, ou pela dimensão espacial da rede, ou pelo índice de simetria do modelo. Existem modelos tridimensionais, com índice de simetria $n=2$, que não são autoduais (um exemplo destes modelos será descrito mais adiante). A autodualidade destes modelos é consequência do fato de termos exatamente dois tipos de interações por campo elementar^(10, 21) (ou por ponto da rede, neste caso) e qualquer teoria que satisfaça esta condição será autodual no sentido acima descrito.

$$\left\langle \cos \sum_{i=1}^m \frac{2\pi}{N} \psi(\tilde{\mathbf{r}}_i) \right\rangle_N \leq \left\langle \cos \sum_{i=1}^m \frac{2\pi}{N} \psi(\tilde{\mathbf{r}}_i) \right\rangle_{U(1)} \quad (\text{A.2})$$

As desigualdades (A.1) e (A.2) expressam os argumentos intuitivos de que, a uma temperatura β^{-1} fixa, a desordem aumenta à medida que o número de elementos do grupo, N , cresce.

A primeira destas desigualdades envolve as funções de correlação de m -variáveis originais (comumente denominadas de variáveis de ordem) enquanto a segunda diz respeito às funções de correlação de m -variáveis duais (comumente chamadas de variáveis de desordem).

Caso o modelo $U(1)$ exiba uma única transição de fase à temperatura β_0^V , sabemos que, pelo teorema demonstrado na seção anterior, ambas as fases devem ser desordenadas, e consequentemente as suas fases deverão ser distinguidas mediante a diferença no decaimento de alguma função de correlação de m -pontos (que preserve a simetria índice 2 (III.33))^{*}. A desigualdade (A.1) e a autodualidade da versão Gaussiana periódica implica que para $N > 2\pi\beta_0^V$ o modelo Z_N deva possuir três fases. Pela desigualdade (A.1) a fase intermediária pode ser ordenada ou desordenada. Devido à autodualidade do modelo, a fase intermediária deve ser autodual^{**}, e consequentemente a fase intermediária deve ser desordenada, pois caso contrário a desigualdade (A.2) seria não satisfeita. Em suma, caso a versão $U(1)$ possua uma transição β_0 então o modelo Z_N , com N suficientemente grande ($N > N_c = 2\pi\beta_0^V$) deve exibir além da fase desordenada de altas temperaturas e da fase ordenada de baixas temperaturas (característica do caráter discreto do grupo) uma fase

* Esperamos que aqui ocorra qualitativamente o mesmo que ocorre no modelo x - y bidimensional.

** O sistema permanece na mesma fase, após a transformação de dualidade.

intermediária desordenada, provavelmente com decaimento polinomial em suas funções de correlação (fase mole).

Pelo exposto acima, uma análise mais profunda da teoria $U(1)$ pode nos informar das características desta fase intermediária.

Na teoria $U(1)$ os campos elementares são ângulos $0 \leq \phi(\vec{r}) < 2\pi$ e a função de partição da formulação Villain é dada por

$$Z_V^{U(1)} = \sum_{\{k_p = -\infty\}}^{\infty} \sum_{\{k_z = -\infty\}}^{\infty} \int D\phi(\vec{r}) \exp - \frac{\beta}{2} \left\{ \sum_s \left[\frac{N}{2\pi} \Delta_s \phi(\vec{r}) - 2\pi k_z \right]^2 + \sum_P \left[\frac{N}{2\pi} \Delta_P \phi(\vec{r}) - 2\pi k_p \right]^2 \right\}. \quad (III.63)$$

onde, como antes, $\{k_z\}$ e $\{k_p\}$ são variáveis auxiliares definidas respectivamente nas ligações z e plaquetas x - y da rede. A transformação de dualidade em (III.63) segue por passos similares aos da dedução de (III.48):

$$Z_V^{U(1)}(\beta) = \tilde{D}(\beta) \sum_{\{\tilde{\psi}(\vec{r}) = -\infty\}}^{\infty} \exp - \frac{1}{2\beta} \left\{ \sum_s \left(\frac{N}{2\pi} \Delta_s \tilde{\psi}(\vec{r}) \right)^2 + \sum_P \left(\frac{N}{2\pi} \Delta_P \tilde{\psi}(\vec{r}) \right)^2 \right\} \quad (III.64)$$

onde $\tilde{D}(\beta)$ é uma constante. Repare que o campo dual $-\infty < \tilde{\psi}(\vec{r}) < \infty$, $(\tilde{\psi}(\vec{r}) \in \mathbb{Z})$, contrariamente ao caso Z_N , não pertence ao grupo de invariância $U(1)$ original da teoria e consequentemente (III.63) não é autodual.

É conveniente, para prosseguirmos em nossa análise, escrevermos (III.64) em termos de variáveis contínuas. Para isto, usamos as identidades de Poisson

$$\sum_{\psi(\vec{r})=-\infty}^{\infty} F[\hat{\psi}(\vec{r})] = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta \delta(\eta-l) F(\eta)$$

$$= \sum_{m(\vec{r})=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\eta F[\eta] e^{i2\pi m\eta} \quad (\text{III.65})$$

e obtemos

$$Z_V^{(1)} = \sum_{\{m(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \int D\psi \exp -H[\psi] \quad (\text{III.66a})$$

onde

$$-H[\psi] = \sum_{\vec{r}} \left[-\frac{1}{2\beta} \left(\frac{N}{2\pi} \Delta \psi \right)^2 - \frac{1}{2\beta} \left(\frac{N}{2\pi} \Delta \psi \right)^2 + 2\pi i m(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \right] \quad (\text{III.66b})$$

Como as integrais em (III.66) são todas Gaussianas podemos calculá-las. Usando-se o resultado geral

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} ds_n \exp -\frac{1}{2} s_i A_{ij} s_j - H_i s_i$$

$$= (2\pi)^{n/2} (\det A)^{-1/2} \cdot \exp \left(\frac{1}{2} H_i \Delta_{ij} H_j \right), \quad (\text{III.67a})$$

onde Δ é o operador inverso de A

$$\Delta_{ik} A_{kj} = \delta_{ij}, \quad (\text{III.67b})$$

obteremos:

$$Z_V^{(1)}(\beta) = Z_0 \sum_{\{m(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \exp -2\beta\pi^2 \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} m(\vec{r}) G(\vec{r}-\vec{r}') m(\vec{r}') \quad (\text{III.68a})$$

onde Z_0 é um fator independente de campos e a função de Green na rede deve satisfazer a equação:

$$6G(\vec{r}) - \sum_{\vec{r}_1} G(\vec{r}-\vec{r}_1) - 2 \sum_{\vec{r}_2} G(\vec{r}-\vec{r}_2) + \sum_{\vec{r}_3} G(\vec{r}-\vec{r}_3) = \delta_{\vec{r},0} \quad (\text{III.68b})$$

onde a primeira, segunda e terceira somas são respectivamente sobre vizinhos próximos na direção z , no plano $x-y$ e segundos vizinhos no plano $x-y$. Explorando-se o fato de $G(\vec{r})$ ser periódica na rede, podemos escrever

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k} \in B_2} G(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{III.69})$$

onde N é o número de pontos da rede e a soma é sobre os vetores recíprocos pertencentes à primeira zona de Brillouin. Substituindo-se (III.69) em (III.68b) obtemos a função de Green:

$$G(\vec{r}) = v \int_{\Omega} \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{D(\vec{k})} \quad (\text{III.70a})$$

$$D(\vec{k}) = 6 - 4\cos k_x - 4\cos k_y - 4\cos k_x \cos k_y - 2\cos k_z \quad (\text{III.70b})$$

onde Ω é o volume da primeira zona de Brillouin e v o volume da célula unitária da rede.

Observemos que $D(\vec{k})$ possui zeros no interior da primeira zona de Brillouin (veja Fig. 4)

$$k_x = k_z = 0 \quad \forall k_y \in [-\pi, \pi] \quad (\text{III.71a})$$

$$k_y = k_z = 0 \quad \forall k_x \in [-\pi, \pi] \quad (\text{III.71b})$$

Fig. 4

A existência destes polos é consequência das simetrias da Hamiltoniana. Caso a simetria fosse global, teríamos apenas um polo na origem, as duas linhas contínuas de polos surgem devido à simetria planar dupla índice -2^* . Devemos portanto excluir as configurações de $m(\vec{r})$ para os quais $D(\vec{r})$ se anula, isto traduzir-se-á em condições de neutralidade para as cargas $m(\vec{r})$. Estas condições serão

* Na aproximação Gaussiana simples o propagador que surge é idêntico a (III.70) e vemos claramente que os polos em (III.71) são necessários para manter-se as simetrias do modelo (a teoria é livre nesta aproximação).

$$\sum_{\vec{r}} e^{i\gamma k_y} m(\vec{r}) = 0 \quad \forall k_y \quad (\text{III.72a})$$

$$\sum_{\vec{r}} e^{ix k_x} m(\vec{r}) = 0 \quad \forall k_x \quad (\text{III.72b})$$

Estas condições implicam que as configurações contribuintes são aquela em que a soma das cargas topológicas, $\sum_{\vec{r}} m(\vec{r})$, é nula em cada plano principal x - z e y - z *. Consequentemente, obtemos finalmente

$$Z_V(\beta) = Z_0 \sum_{\{m(\vec{r})\}}^* \exp -2\beta\pi^2 \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} m(\vec{r}) G^*(\vec{r}-\vec{r}') m(\vec{r}') \quad (\text{III.73})$$

onde a soma é sobre as configurações $\{m(\vec{r})\}$ permitidas e $G^*(\vec{r})$ é a parte finita de $G(\vec{r})$. A forma explícita do propagador $G^*(\vec{r})$ pode ser obtida aproximadamente considerando-se as contribuições dos minantes em (III.70a) ao redor das linhas singulares dadas por (III.71). O resultado é:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') \sim \ln|\Delta x| \ln|\Delta y| - \frac{(\Delta z)^2}{2(\Delta x)^2(\Delta y)^2} \quad (\text{III.74})$$

onde Δ_μ é a componente de $\vec{r} - \vec{r}'$ na direção μ .

É grande a semelhança entre (III.73) e a representação do modelo x - y bidimensional em termos de um gás com interações logarítmicas. Isto sugere que, assim como as cargas pontuais no modelo x - y são as excitações topológicas (vórtices) do modelo, as cargas $m(\vec{r})$ são as excitações (de algum tipo) topológicas da teoria presente. É simples a interpretação das cargas pontiformes, no modelo x - y com simetria global, como representantes dos vários

* Em geral as condições de neutralidade para uma teoria $U(1)$ com índice n de simetria é expressa por soma de cargas topológicas em um subespaço n -dimensional.

possíveis "windings" dos spins $U(1)$ ao redor dos contornos fechados. O mesmo infelizmente não é verdade para o caso presente. Utilizando-nos da identidade (III.65) em (III.63) é possível após uma certa álgebra ver que:

$$m(\vec{\tilde{r}}) \equiv -\Delta_2 k_p + \Delta_4 k_z. \quad (\text{III.75})$$

Vemos então que $m(\vec{\tilde{r}})$ são combinações particulares dos campos inteiros k_p e k_z introduzidos para manter-se a periodicidade da Hamiltoniana ao irmos da versão relógio para a versão Villain. Isto é idêntico à origem das cargas pontiformes correspondentes no modelo x - y . Contudo neste caso é difícil dizer quais são as configurações da teoria definida por meio de (III.63) que nos conduzem a valores não nulos de m . É conveniente salientar que, conforme mencionamos na seção (II.D), o fato da Hamiltoniana ser mais facilmente expressa em termos de cargas pontuais (que é o caso) não necessariamente significa que a geometria das excitações topológicas são mais simplesmente entendidas nesta representação. É bem possível que $m(\vec{\tilde{r}})$ esteja relacionado a algum objeto diferente (por exemplo, pontos finais de cordas), de forma que um completo entendimento das excitações topológicas só pode ser atingido pela análise de tais objetos.

O segundo modelo simples na classe de simetria $n = 2$ que mencionaremos no presente trabalho é governado pela Hamiltoniana

$$H = - \sum_i \left[k_1 I_2(i; x, z) + k_2 I_2(i; y, z) \right] \quad (\text{III.76})$$

onde a notação é a mesma que em (III.27), isto é, a teoria descreve interações de quatro corpos ao redor das plaquetas elementares nos planos x - z e y - z (veja Fig. 5 abaixo). Esta teoria é invariante

Fig. 5

te mediante a transformação:

$$\phi(x, y, z) \rightarrow \phi(x, y, z) + \lambda_1(x, y) + \lambda_2(z) \quad (\text{III.77})$$

onde λ_i são funções obrigatórias de seus argumentos. A teoria possui portanto uma simetria composta com índices de simetria $n=2$ e $n=1$. É interessante notar que a simetria $n=1$ deste modelo permite-nos executar rotações (globais) independentes, ao longo da direção z . Podemos fixar o calibre impondo que em determinado plano $y-z$ todos os spins estejam em fase.

O aparecimento de uma simetria, com índice $n=1$ traz consequências radiais. Não é difícil ver que, devido a esta simetria,

tipo linha, a teoria se desacopla em um conjunto de modelos bidimensionais não interagentes entre si. De fato, para o caso de spins $U(1)$, (III.76) é um conjunto de modelos x - y bidimensionais desacoplados. Esta é uma propriedade geral das teorias com índice de simetria $n=1$; tais teorias desacoplar-se-ão ao longo da direção definida pelo eixo de simetria*. Tal fatorização é obtida mediante uma transformação não local do tipo da de Jordan-Wigner.

O argumento pode ser estendido para provar que qualquer teoria* com índice $n=1$ em d -dimensões desacoplar-se-á em um conjunto de teorias não interagentes $(d-1)$ -dimensionais. Contudo, a fim de ilustração, é intuitivo ver como funciona tal prova no modelo de Ising unidimensional, que é uma teoria simples com simetria de índice $n=1$.

Considere o modelo de Ising unidimensional numa rede unidimensional finita de N spins, com condições livres de contorno. A função de partição para este modelo será dada por

$$Z = \sum_{S_1} \sum_{S_2} \dots \sum_{S_N} e^{-\beta \sum_i S_i S_{i+1}} \quad (\text{III.78})$$

onde $S_i = \pm 1$ é um spin de Ising localizado no sítio $i=1, 2, \dots, N$. Por meio de uma transformação não local, definimos novos spins $\sigma_i = \pm 1$ tais que

$$S_m = \prod_{i=1}^m \sigma_i, \quad m=1, \dots, N \quad (\text{III.79a})$$

ou invertendo-se (III.79a)

* Tal afirmação é válida somente se as interações envolvidas na Hamiltoniana estiverem definidas nos simplexos elementares da rede, e não em simplexos compostos tais como: ligações de segundos vizinhos, plaquetas retangulares, etc.

$$\sigma_1 = S_1 \quad (\text{III.79b})$$

$$\sigma_m = S_m S_{m-1} \quad m=2, \dots, N \quad (\text{III.79c})$$

e conseqüentemente (III.78) pode ser escrita em termos das variáveis $\{\sigma_i\}$

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} e^{-\beta \sum_{i=2}^N \sigma_i} \quad (\text{III.80})$$

mostrando-se explicitamente o desacoplamento num conjunto de sistemas $d-1 = 0$ dimensionais. Se fizermos a soma em (III.80), obtemos

$$Z = 2 (2 \cosh \beta)^{N-1} \quad (\text{III.81})$$

que é a solução exata do modelo. É um simples exercício ver que uma transformação inteiramente análoga pode ser aplicada em (III.76) ao longo do eixo $n=1 (\bar{z})$ para mostrar que esta é equivalente a um conjunto de sistemas bidimensionais com interações de dois corpos.

Repare que em (III.80) não aparece a spin σ_1 , o que implica, devido a (III.79a) que $\langle S_m \rangle = 0$; isto é o sistema é desordenado para qualquer temperatura. Este fato pode ser estendido para uma teoria qualquer com simetria discreta ou contínua $n=1$ de dimensionalidade arbitrária. A Hamiltoniana, quando expressa em termos das variáveis obtidas por uma transformação análoga $\bar{a}$ (III.79), não possui as variáveis pertencentes a um determinado espaço d -dimensional (aquele tomado por referência na transformação análoga $\bar{a}$ (III.79)). Consequentemente é fácil ver que todas as funções de correlações ao longo do espaço $(d-1)$ -dimensional (não invariantes pela simetria $n=1$) serão nulas. Isto significa que a simetria $n=1$

não pode ser rompida espontaneamente para um grupo de simetria qualquer, discreto ou contínuo*.

O terceiro modelo que apresentaremos é, pelo menos superficialmente, similar ao último apresentado. Seu Hamiltoniano é o seguinte:

$$-H = \sum_i \left[k_1 I_2(i; x, z) + k_2 I_2(i; y, z) + k_3 I_2(i; x, y) \right] \quad (\text{III.82})$$

onde usamos a mesma notação que em (III.27). O modelo descreve portanto, interações de quatro corpos entre os vizinhos situados nos vértices das plaquetas elementares dos planos x - z , y - z e x - y (veja Figura 1). Esta teoria é invariante pela transformação:

$$\phi(x, y, z) \rightarrow \phi(x, y, z) + \lambda_1(x) + \lambda_2(y) + \lambda_3(z) \quad (\text{III.83})$$

possuindo uma simetria triplíce $n=2$. Devido ao último termo em (III.83) a Hamiltoniana não possui a simetria $n=1$ exibida por (III.76).

Seria bastante tedioso fazer-se para este modelo a mesma análise realizada no modelo 24 de Fevereiro. Não é difícil ver de que forma estes modelos diferem entre si ao fazermos a transformação de dualidade. O simplexo fundamental em (III.83) são plaquetas, correspondentemente (pois $d=3$) o modelo dual terá por simplexo fundamental ligações, isto é, as variáveis duais v_μ estarão associadas às ligações. A cada plaqueta na teoria original corresponderá uma ligação, na rede dual, que passe pelo centro da referida plaqueta. Os vínculos da função delta (análogo à III.43) provenientes da integração sobre as variáveis $\phi(\vec{h})$ originais, obrigam que a

* Este resultado generaliza o resultado obtido na seção (III.A) para teorias $U(1)$ com índice de simetria $n=1$.

soma das variáveis* U_μ , definidas nas 12 plaquetas que possuem um vértice comum, deve ser nula. Estes vínculos são resolvidos introduzindo-se os campos duais v_μ tal que:

$$U_x = \nabla_x (\nabla_y v_y - \nabla_z v_z) \quad (\text{III.84})$$

e equações análogas para as outras direções. Vemos então que os campos duais v_μ vivem nas ligações de uma rede que formam cruces** perpendiculares ao correspondente U_μ . Definindo-se $\delta_z = \Delta_x \Delta_y$, etc, o Hamiltoniano pode ser escrito na forma

$$-H = k \sum F_{\mu\nu}^2 \quad (\text{III.85a})$$

$$F_{\mu\nu} = \delta_\mu v_\nu - \delta_\nu v_\mu \quad (\text{III.85b})$$

onde fizemos em (III.82) $K_1=K_2=K_3=K$. Repare que a Hamiltoniana $\bar{H}$ é invariante pela transformação:

$$v_\mu \rightarrow v_\mu + \delta_\mu \Lambda(\vec{r}) \quad (\text{III.86})$$

o que significa que a teoria dual $\bar{H}$ é uma teoria local de calibre. A razão principal para a apresentação deste exemplo é que, embora este modelo de três plaquetas pareça fundamentalmente distinto do modelo 24 de Fevereiro, a estrutura de fases de ambas as teorias são basicamente as mesmas. Mais ainda, este fato nos deixa claro que a autodualidade de um modelo não é um ingrediente fundamental na determinação de suas propriedades críticas.

* Estes campos, definidos nas plaquetas ortogonais à direção μ são aqueles introduzidos na formulação Villain.

** Eles vivem nas ligações de primeiros vizinhos de duas redes cúbicas de faces centradas, interpenetradas.

Para finalizar esta seção gostaríamos ainda de apresentar dois modelos ^(3,4,30-32) nesta classe de teorias, que de certa forma motivou a pesquisa aqui apresentada.

O primeiro destes modelos é uma simples teoria de spins z_N , e $\frac{i2\pi}{N} p(\vec{r})$ definidas nos sítios de uma rede cúbica de face centrada ^(4,30-32). O modelo é descrito pela Hamiltoniana:

$$H = -J \sum_{\tau} \cos \Delta_{\tau} p(\vec{r}) \quad (\text{III.87a})$$

onde

$$\Delta_{\tau} p(\vec{r}) \equiv \frac{2\pi}{N} (p(\vec{r}_1) + p(\vec{r}_2) - p(\vec{r}_3) - p(\vec{r}_4)) \quad (\text{III.87b})$$

a soma em (III.87a) é sobre os tetraedros elementares da rede e as variáveis $p(\vec{r}_i)$ $i = 1, 2, 3, 4$ são localizadas nos quatro vértices de um dado tetraedro. (Veja Figura 6).

A Hamiltoniana (III.87) possui uma simetria composta $n=2$ do tipo (II.2) e é autodual, no sentido geral empregado neste trabalho. No limite $N \rightarrow \infty$, $U(1)$, por análise similar àquela feita para o modelo 24 de Fevereiro, vemos que (III.87) possui excitações topológicas pontiformes, com interações que são basicamente logarítmicas. Para N finito existem também excitações do tipo paredes (ou domínios). A estrutura de fase deste modelo ⁽⁴⁾, da mesma forma que o modelo 24 de Fevereiro, é bastante similar ao dos modelos relógios bidimensionais z_N ^(11-15,21-25) e teorias de calibre $Z(N)$ a quatro dimensões*. Para N menor que um certo valor crítico N_c o modelo exibe uma única transição de fase de primeira ordem separando a fase ordenada da desordenada (a transição corres

* De fato, somos tentados a conjecturar, que todos os modelos z_N (com N suficientemente grande) e índice de simetria $n=2$ terão estrutura de fases semelhantes.

pondente na teoria quadridimensional de calibre Z_N $\bar{e}$ também de primeira ordem, enquanto os correspondentes dos modelos relógios bidimensionais são de segunda ordem). Para $N > N_c$ esta transição

Fig. 6

se bifurca em duas, aparecendo uma fase intermediária com ausência de ordem de longo alcance. No limite $N \rightarrow \infty$, onde o modelo possui a simetria $U(1)$, a transição de fase que ocorre a temperaturas mais baixas T_c^{II} se move para $T = 0$ como ⁽⁴⁾

$$T_c^{II} = \frac{1}{\gamma} (1 - \cos 2\pi/N) \sim N^{-2} \quad (III.88)$$

onde $\gamma \cong 0.63$, e a fase em que a simetria $\bar{e}$ espontaneamente quebra da desaparece, de forma coerente com o teorema da seção (III.A).

Para este modelo, bem como para o modelo 24 de Fevereiro, relógio bidimensional e calibre $Z(N)$ quadridimensional N_C parece ser próximo de 5. Outro exemplo, bastante similar a (III.87), é obtido tomando-se na Hamiltoniana (III.87) os sítios da rede hexagonal compacta. Este modelo é também autodual e os aspectos gerais deste modelo são essencialmente idênticos àqueles dos modelos acima descritos.

O último modelo que gostaríamos de mencionar aqui é um exemplo de uma teoria que exhibe uma simetria da forma geral (III.2). Esta teoria é descrita pela Hamiltoniana*:

$$H = - \sum_{\vec{r}} \left[J S(\vec{r}) S(\vec{r} + \hat{z}) + K S(\vec{r} - \hat{x}) S(\vec{r} + \hat{x}) S(\vec{r} - \hat{y}) S(\vec{r} + \hat{y}) S(\vec{r}) + c.c. \right] \quad (III.89)$$

onde $S(\vec{r}) = e^{i \frac{2\pi}{N} p(\vec{r})}$ $p(\vec{r}) = 0, 1, \dots, N-1$ são spins $Z(N)$. (Veja Figura 7). Na versão Gaussiana periódica, a função de partição do modelo toma a forma⁽³⁾

$$Z_V = \sum_{\{p(\vec{r})=0\}}^{N-1} \sum_{\{m(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{n(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \exp \left\{ - \frac{2\pi^2}{N^2} \left[-J (\nabla_p^2 p(\vec{r}) - N n(\vec{r}))^2 - K (\nabla_z p(\vec{r}) - N m(\vec{r}))^2 \right] \right\} \quad (III.90a)$$

onde $\vec{r}$ são os sítios da rede cúbica e

$$\nabla_p^2 p(\vec{r}) \equiv p(\vec{r} - \hat{x}) + p(\vec{r} + \hat{x}) + p(\vec{r} - \hat{y}) + p(\vec{r} + \hat{y}) - 4p(\vec{r}) \quad (III.90b)$$

$$\nabla_z p(\vec{r}) \equiv p(\vec{r}) - p(\vec{r} - \hat{z}) \quad (III.90c)$$

sendo $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ os versores da rede. O campo inteiro $n(\vec{r})$ é associado com as cruzes elementares no plano x-y enquanto que o campo $m(\vec{r})$

* Observe que para $N=2$ e $N=4$ estes modelos nada mais são que dois modelos 24 de Fevereiro desacoplados com $N=2$ e $N=4$ respectivamente.

$\bar{e}$ é associado às ligações ao longo da direção z . (Veja Figura 7)

Fig. 7

O Hamiltoniano (III.90), considerado como uma função de $p(\vec{r})$ (isto é, após somar-se sobre $n(\vec{r})$ e $m(\vec{r})$) é invariante pela transformação (III.2) com índice de simetria $n = 2$ e $O_1 = \nabla_p^2$ e $O_2 = \nabla_z^2$. O diagrama de fases deste modelo é similar àqueles dos modelos anteriores com a diferença que N_C não é 5 neste caso. Uma análise preliminar da simulação por Monte Carlo neste modelo parece ser consistente com $N_C \approx 11$. Talvez tenha alguma significação o fato de todos os modelos conhecidos com índice de simetria $n = 2$ do tipo (III.15) tenha o mesmo valor de N_C , ao passo que o modelo (III.89), que não pertence àquela categoria, mas possui a simetria índice 2 mais geral do tipo (III.2), exiba um valor diferente de N_C .

CAPÍTULO IV

SIMULAÇÕES MONTE CARLO

Realizamos uma análise numérica mais ou menos extensiva para todos os modelos mencionados na seção III.B. Detalhes dos procedimentos usados em nossas simulações foram já discutidos na literatura^(33-35,4), contudo, recapitularemos neste capítulo a estratégia geral empregada em nossa análise. Em nossas simulações as configurações das variáveis foram mudadas utilizando-se, dependendo do caso, do algoritmo de Metrópolis⁽³⁶⁾, Metrópolis melhorado⁽³⁵⁾ ou banho térmico^(35,37).

Uma vista geral da estrutura de fases dos modelos foi obtida fazendo-se simulação em ciclo térmicos, em que a energia média por spin (assim como os parâmetros de ordem) são medidos. Em tal simulação iniciamos com o sistema em uma configuração completamente ordenada (estado fundamental a $T = 0$) a temperatura inversa β_0 , o ciclo térmico é então simulado realizando-se uma sucessão de interações* de Monte Carlo do sistema, sendo que a temperatura inversa é diminuída ($\beta \rightarrow \beta - \Delta\beta$) antes de se iniciar uma nova iteração. Este procedimento (aquecimento) é repetido até atingir-se $\beta = 0$ (sistema totalmente desordenado) e então é revertido o processo (esfriamento) até novamente atingir-se $\beta = \beta_0$. Embora em tal experimento numérico o sistema nunca esteja realmente no equilíbrio, ele estará geralmente perto do equilíbrio, caso a temperatura não esteja nas proximidades da região onde ocorre a transição de fase. Na vizinhança da transição, contudo, a distância da situação de equilíbrio aumenta; e as quantidades físicas medidas no ciclo térmico exibirão ciclos de histerese. Realizamos tais experi

* Uma iteração de M.C. é feita ao varreremos, questionando os spins quanto a sua possível mudança, todos os pontos da rede uma única vez.

mentos nas versões $Z(N)$ dos modelos introduzidos no capítulo anterior. Resultados para o modelo $Z(N)$ FCC encontram-se já publicados⁽⁴⁾. Ciclos térmicos para o modelo 24 de Fevereiro* com $N = 2 - 9$ são mostrados nas Figs. (8a-i), em que a energia média normalizada $0 \leq \langle E \rangle \leq 1$ (energia média por número de interações da Hamiltoniana) é colocada como função da temperatura inversa β . Vemos claramente que para $N \leq 4$ existe apenas um ciclo de histerese pronunciado, indicando portanto a existência de uma única transição de fase. O fato do ciclo de histerese ser relativamente alto é indicativo que tais transições provavelmente sejam descontínuas. Repare que, devido à autodualidade do modelo, os ciclos de histerese ocorrem ao redor dos pontos de autodualidade dos modelos:

$$\beta_{N=2}^c = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2}+1) \simeq 0.44068 \quad (\text{IV.1a})$$

$$\beta_{N=3}^c = \frac{2}{3} \ln(\sqrt{3}+1) \simeq 0.670035 \quad (\text{IV.1b})$$

$$\beta_{N=4}^c = \ln(\sqrt{2}+1) \simeq 0.881374 \quad (\text{IV.1c})$$

As retas graficadas nas Figs. (8a.I) é o resultado obtido em primeira ordem em β , na expansão de altas temperaturas.

$$\beta = 1 - \beta + \sigma(\beta^2) \quad , N=2 \quad (\text{IV.2a})$$

$$\beta = 1 - \frac{1}{2}\beta + \sigma(\beta^2) \quad , N \neq 2 \quad (\text{IV.2b})$$

Vemos para $N > 5$ a existência de uma região intermediária entre dois ciclos de histerese, indicando a existência de duas

* Tais simulações foram efetuadas usando-se a formulação relógio do modelo.

Figura 8 (a) - (i) - Energia média (normalizada), obtida por meio de ciclo térmico, contra a temperatura inversa para o modelo 24 de Fevereiro com $N = 2-9$ e $N = 20$. O tamanho da rede é $15 \times 15 \times 15$ e a variação de β no ciclo térmico é $\Delta\beta = 0,002$ na expansão de altas temperaturas ($\langle E \rangle = 1 - \beta$ para $N = 2$ e $\langle E \rangle = 1 - \beta/2$ nos demais casos). A outra linha contínua que aparece para $N = 9, 20$ é dada pela aproximação de ondas de spin $\langle E \rangle = 1/(4\beta)$.

transições de fase. Graficamos também no caso $N = 9$ e $N = 20$ o primeiro termo na expansão por ondas de spin:

$$\langle E \rangle_{SP} \sim \frac{1}{4\beta} \quad (IV.3)$$

O acordo entre a simulação e (IV.3) é forte indicativo que a fase intermediária seja desordenada e não massiva (decaimento polinomial das funções de correlação), em perfeito acordo com a discussão realizada no capítulo anterior. Mais ainda, vemos que à medida que N cresce uma das transições (fase desordenada $\leftrightarrow$ fase intermediária) permanece aproximadamente fixa $\beta \approx 1$, enquanto a outra transição (fase intermediária $\leftrightarrow$ fase ordenada) vai a zero, $\beta_{II} \rightarrow 0$, à medida que N cresce. Tal fato mostra que a fase intermediária que aparece para $N > 5$ é a versão discreta da fase de baixas temperaturas do modelo $U(1) (N \rightarrow \infty)$. O caso $N = 5$ é um caso intermediário, onde não é claro, pela Fig. (8d), que exista uma ou duas transições de fase.

Mostramos também nas Figs. (9a-b) os ciclos térmicos obtidos para o modelo descrito pela Hamiltoniana (III.82) (com simetria $Z(N)$ índice 2) com $N = 6$ e $N = 8$. Vemos também neste caso de maneira, análoga às Figs (8e e 8g) duas transições de fase.

Este esquema geral é precisamente confirmado para todos os modelos com simetria índice 2, introduzidos no capítulo anterior; acima de um certo N_C^* aparecem duas transições de fase, sendo a fase intermediária a versão discreta da fase de baixas temperaturas do modelo $U(1)$.

Uma vez determinada a região onde ocorre a transição de fase é possível determinar-se com razoável precisão a localização destas transições por meio de experimentos que descreveremos a se

* $N_C = 5$ para as Hamiltonianas (III.30), (III.82) e (III.87) enquanto que $N_C \approx 11$ para a Hamiltoniana (III.89).

Figura 9(a) - (b) - O mesmo que na Figura 8, para a Hamiltoniana (III.82) com $N = 6$ e $N = 9$.

guir.

Quando a transição for de primeira ordem a energia interna $\bar{E}$ é descontínua na temperatura crítica. Isto permite, nestes casos, uma determinação bastante precisa da temperatura. Preparamos um estado inicial do sistema em que metade da rede está ordenada e a outra metade completamente desordenada. Efetuamos então simulações num conjunto de temperaturas na região de histerese, observando então a evolução temporal* do estado inicial. Mostramos nas Figs. (10a-c) estas experiências, para os casos $N = 2, 3, 4$ do modelo 24 de Fevereiro, sendo tais evoluções temporais, efetuadas em temperaturas ao redor das temperaturas de autodualidade (IV.1).

Na temperatura crítica, numa transição de primeira ordem, cada metade da rede evoluirá para um estado estável distinto, e o valor por exemplo da energia média, permanecerá grosseiramente constante no tempo. Às temperaturas distintas da crítica, contudo, o sistema rapidamente evolui para um único estado estável. Vemos então nas Fig. (10a-c) que os pontos críticos ocorrem aproximadamente nos pontos de autodualidade (IV.1) dos modelos.

No caso de transições contínuas tal determinação é bem menos precisa. O que vemos neste caso é que na temperatura crítica ocorre uma variação mais rápida da energia média do estado final $\langle E(B) \rangle$ (obtida pela evolução temporal acima descrita) em função da temperatura. Estimamos desta forma as temperaturas referentes aos modelos com simetria $Z(N)$ índice 2, com $N > N_c$, introduzidos no capítulo anterior. Obtivemos que para todos os modelos a primeira transição, à medida que N cresce, rapidamente se satura a $\beta_1 \approx 1.0$ enquanto que a segunda transição deparece com N ; na forma geral

* A unidade de tempo, neste caso, é a iteração de Monte Carlo.

Figura 10 - Evolução do estado misto (discutido no texto) para temperatura acima e abaixo dos pontos autoduais (IV.1), para o modelo 24 de Fevereiro com $N = 2, 3, 4$). Começando-se dos pontos mais baixos das figuras as temperaturas inversas usadas nas simulações foram: a) $Z(2) - \beta = 0.46, 0.45, 0.44, 0.43, 0.42$; b) $Z(3) - \beta = 0.69, 0.68, 0.67, 0.66, 0.65$; c) $Z(4) - \beta = 0.90, 0.89, 0.88, 0.87, 0.86$.

$$\beta_{\pi} = \gamma / (1 - \cos \frac{2\pi}{N}) \quad (IV.4)$$

com o valor de γ dependendo dos detalhes do modelo específico. Para o modelo descrito pela Hamiltoniana (III.87) $\gamma \approx 0.63^{(4)}$ enquanto para o modelo 24 de Fevereiro $\gamma \approx 0.78$. O comportamento exibido em (IV.4) é fisicamente esperado, já que $[1 - \cos(\frac{2\pi}{N})]$ é o preço que deve ser pago, pelo banho térmico, a fim de frustrar-se uma interação elementar da Hamiltoniana. Esperamos que (IV.4) seja correta para todos modelos com simetria $Z(N)$, $N > N_c$, índice 2 à qual quer dimensão.

Uma vez tendo-se uma boa estimativa das temperaturas críticas dos modelos é possível distinguir-se, de forma não ambígua, entre transição de primeira ordem ou transição contínua (2ª ordem ou superior). Para isto observamos a evolução temporal da simulação, à temperatura crítica estimada, para dois estados iniciais do sistema: um completamente ordenado e outro completamente desordenado. Nas Fig.(11a-d) mostramos tais experimentos para o modelo 24 de Fevereiro com $N = 2, 3, 4$ e 9 . As temperaturas usadas nos modelos $N = 2, 3, 4$ são as autoduais (IV.1) e no modelo $N = 9$ usamos a estimativa $\beta_c = 1.0$. Numa transição contínua, após um período de relaxação os valores da energia de ambos estados devem coincidir. Por outro lado, numa transição de primeira ordem, a energia dos dois estados evoluirá para dois estados distintos, demonstrando a existência de calor latente. Das Figs.(9a,b,c) vemos então que a transição que ocorre no modelo 24 de Fevereiro para $N \leq 4$ são de primeira ordem ao passo que a transição que ocorre em $N = 9$ (e muito provavelmente para $N > 5$) é contínua*. Estes mesmos resultados foram obtidos para os modelos (III.82) e (III.87).

* Nenhum esforço foi dispendido no sentido de se determinar inequivocamente a ordem destas transições contínuas.

Figura 11(a) - (d) - Evolução temporal de um estado desordenado (pontos mais altos) nas temperaturas autoduais do modelo 24 de Fe vereiro com $N = 2, 3, 4$ e em $\beta = 1.0$ para o modelo com $N = 9$.

Finalmente para finalizar este capítulo, gostaríamos de mencionar que fizemos análises detalhadas⁽⁴⁾ para se determinar a natureza da fase intermediária e os resultados são consistentes com a ausência de ordem de longo alcance na fase intermediária e portanto com a ausência de ordem de longo alcance no limite $U(1)$, em concordância com a predição do teorema demonstrado no capítulo III. A existência de ondas de spin na fase de baixas temperaturas do modelo $U(1)$ pode ser percebida por um fato peculiar à simulação por Monte Carlo. Consideremos uma simulação em que o estado inicial do sistema esteja completamente desordenado ($\beta = 0$) e esquentamos o sistema vagorosamente até atingirmos a temperatura crítica $\beta_T \approx 1.0$ passando para a fase de baixas temperaturas. Tanto na ordenada como na fase de ondas de spin o parâmetro de ordem $\langle \cos \frac{2\pi}{N} n \rangle$ (magnetização média) deve anular-se, pois as variáveis assumem todos os valores entre 0 e 2π , e conseqüentemente $\langle n \rangle = 0.5$. Contudo as distribuições locais dos ângulos $\frac{2\pi}{N} n$, $n = 0, 1, \dots, N$, na fase desordenada é bem diferente daquela esperada numa fase com ondas spins. Enquanto na primeira delas os vizinhos próximos de dado spin central assume com probabilidade alta qualquer dos seus possíveis valores, na segunda fase, na média, estes vizinhos tomarão valores próximos do spin central, pois em tal fase predominarão flutuações de grande comprimento de onda. Em tal simulação, portanto, a existência das ondas de spin serão detectadas pela súbita ausência de grandes flutuações em pequenos intervalos de temperatura, assim que o sistema passar da fase de baixas temperaturas para a fase de ondas de spin. Na Fig. (12) mostramos tal experimento⁽⁴⁾, realizado com o modelo descrito por (III.87), onde vemos claramente o efeito acima descrito; indicando a existência de ondas de spins na fase de baixas temperaturas da versão $U(1)$ de tal modelo.

Figura 12 - Flutuações do ângulo médio da Hamiltoniana (III.87) com simetria $U(1)$ na temperatura inversa $\beta = 1$ (O modelo $U(1)$ é bem aproximado, nesta temperatura, pelo modelo $Z(29)$, mostrado na Figura). Conforme explicado no texto, o desaparecimento das flutuações para pequenas variações em β evidenciam a existência de excitações tipo ondas de spin.

CAPÍTULO V

SUMÁRIO E CONCLUSÕES

Neste trabalho introduzimos; de forma sistemática, uma nova classe de teorias estatísticas cuja simetria não é nem global e nem local, mas intermediária entre as duas. Estas teorias são caracterizadas pelo índice de simetria n , que representa o número de vínculos que devem ser satisfeitos pela função de calibre.

Após definirmos estas teorias em termos gerais, discutimos de forma sistematizada como construir modelos com simetrias específicas e descrevemos algumas das propriedades que seriam esperadas para estes modelos. Neste contexto, foi feita uma discussão geral das propriedades de dualidade, bem como da natureza das excitações topológicas que são esperadas nestas teorias. Provamos então um teorema que implica que, para $n \leq 2$, em qualquer dimensão, estas teorias (quando o grupo de simetria for $U(1)$) não possuem ordem de longo alcance e discutimos as possíveis generalizações deste resultado. Este teorema mostra que não é a dimensionalidade do sistema que importa na determinação de suas propriedades críticas, mas sim, a dimensionalidade do subespaço, sobre o qual a simetria é efetivamente global. Uma análise de uma série de modelos na classe de índice $n = 2$ foi apresentada. Os resultados analíticos e numéricos desta análise nos leva a conjecturar que todos os modelos com simetria $Z(N)$ de índice $n = 2$, para N suficientemente grande ($N > N_c$), deva exibir além da fase ordenada de baixas temperaturas e a fase desordenada de altas temperaturas, uma fase desordenada intermediária com excitações não massivas (funções de correlações com decaimento polinomial).

Acreditamos que os resultados apresentados no presente trabalho seja um início de uma classificação de um novo conjunto de teorias, que além de serem estatisticamente ricas podem ser

relevantes às descrições de sistemas físicos interessantes. Conforme mencionamos na introdução deste trabalho e discutido na literatura⁽¹⁻⁴⁾, é possível que os modelos com índice de simetria $n = 2$ sejam relevantes ao problema do ponto de Lifshitz em vários sistemas. Para saber se determinado sistema físico pode ser descrito por modelos, como os estudados no presente trabalho, é necessário antes de tudo saber se a dimensionalidade e as simetrias do modelo são adequadas a tal descrição. É sabido, por exemplo, que a linha de transições A-C, que separam as fases A-esmética e C-nemática em cristais líquidos, (nas vizinhanças do ponto de Lifshitz) devem ser descritas por uma teoria tridimensional com grupo $U(1)$, e que seja não massiva ao longo de determinada região^(1,2). Pelo exposto no presente trabalho, esperamos que qualquer teoria $U(1)$ com índice de simetria $n = 2$ sirva em princípio para tal descrição. A forma específica dos propagadores destes modelos, na fase não massiva, é que vai decidir quais entre estes modelos, seriam os mais adequados à descrição física da linha A-C e do ponto de Lifshitz de determinado sistema físico.

Alguns aspectos importantes das teorias apresentadas neste trabalho não foram tratados em detalhes. Por exemplo, é quase certo que nosso esquema de classificação esteja relacionada com as possíveis classes de universalidade. Desta forma, uma análise mais completa das propriedades críticas destes sistemas é necessária. Para tal análise, torna-se imperativo o conhecimento dos seus expoentes críticos, os quais podem, em princípio, serem obtidos por transformação de escala para sistemas finitos (F.S.S.)⁽³⁸⁾. Faz-se também necessária uma análise mais profunda das funções de correlação na fase de baixas temperaturas dos modelos com simetria planar $U(1)$. Esperamos que no futuro tais pontos possam ser atacados.

APÊNDICE A

DESIGUALDADES DAS FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO

Neste apêndice provaremos as seguintes desigualdades para a função de correlação de m-pontos das variáveis ordem $\phi(\vec{r}) = \frac{2\pi}{N} p(\vec{r})$ e das variáveis desordem $\rho(\vec{r}) = \frac{2\pi}{N} \psi(\vec{r})$:

$$\left\langle \cos \left(\sum_{i=1}^m \phi(\vec{r}_i) \right) \right\rangle_{Z_N} \geq \left\langle \cos \left(\sum_{i=1}^m \phi(\vec{r}_i) \right) \right\rangle_{U(1)} \quad (\text{A.1})$$

$$\left\langle \cos \left(\sum_{i=1}^m \rho(\vec{r}_i) \right) \right\rangle_{Z_N} \leq \left\langle \cos \left(\sum_{i=1}^m \rho(\vec{r}_i) \right) \right\rangle_{U(1)} \quad (\text{A.2})$$

As médias de ambos os lados das desigualdades são efetuadas à mesma temperatura β^{-1} e com a função de partição do modelo 24 de Fevereiro em sua versão Villain (III.33) e (III.63).

Estas desigualdades expressam o argumento intuitivo de que, a uma dada temperatura, a desordem deve crescer à medida que o grupo de simetria aumenta. No capítulo III utilizamos a autodualidade da versão Villain do modelo (III.33) e as desigualdades (A.1) e (A.2) para provar o seguinte: caso a teoria $U(1)$ possua uma transição de fase em β_0^V (o que esperamos que ocorra pela nossa análise analítica feita nos capítulos III e IV), então o modelo $Z(N)$ com $N > 2\pi\beta_0^V$ deve ter além da fase de baixas e altas temperaturas, uma fase intermediária desordenada (nas variáveis ordem e desordem).

Para provarmos (A.1) e (A.2) definimos inicialmente a função de correlação de m-pontos das variáveis de ordem:

$$O_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_m) \equiv \left\langle \cos \left(\sum_{i=1}^m \phi(\vec{r}_i) \right) \right\rangle \quad (\text{A.3})$$

Na aproximação Gaussiana periódica obtemos

$$Q_N^V = \frac{1}{Z_N^V} \sum_{\{p(\vec{r})=0\}}^{N-1} \sum_{\{k_p=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{k_z=-\infty\}}^{\infty}$$

$$\exp \cdot \frac{\beta}{2} \left\{ \sum_s [\Delta_2 p(\vec{r}) - 2\pi k_z]^2 + \sum_p [\Delta_4 p(\vec{r}) - 2\pi k_p]^2 \right\}$$

$$\exp i \frac{2\pi}{N} \sum_s q(\vec{r}) Q(\vec{r}) \quad (\text{A.4a})$$

onde Z_N^U é a função de partição (III.36) e

$$Q(\vec{r}) \equiv \sum_{i=1}^m \delta_{\vec{r}, \vec{r}_i} \quad (\text{A.4b})$$

Usando as fórmulas de Poisson (III.37), isolando-se as variáveis $p(\vec{r})$ por meio de (III.41) e efetuando-se o traço sobre as variáveis $p(\vec{r})$ obtemos:

$$Q_N^V = \frac{1}{Z_N^V} \sum_{\{l_z=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{l_p=-\infty\}}^{\infty} \exp -\frac{1}{2\beta} \left\{ \sum_s l_z^2 + \sum_p l_p^2 \right\}.$$

$$\prod_{\{\vec{r}\}} \delta_k^N \left(\Delta_4 l_p(\vec{r} - \frac{\hat{x} + \hat{y}}{2}) - \Delta_2 l_z(\vec{r} - \frac{\hat{z}}{2}) + Q(\vec{r}) \right) \quad (\text{A.5})$$

onde δ_k^N é um delta de Kronecker, módulo N . Podemos então escrever:

$$\prod_{\{\vec{r}\}} \delta_k^N (\Delta_4 l_p - \Delta_2 l_z + Q) = \sum_{\{m(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \prod_{\{\vec{r}\}} \delta(\Delta_4 l_p - \Delta_2 l_z + Nm) \quad (\text{A.6})$$

onde agora o delta de Kronecker que aparece é o normal. Substituindo-se (A.6) em (A.5) obtemos

$$O_N^V = \frac{1}{Z_N^V} \sum_{\{l_z=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{l_p=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{m=-\infty\}}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta} \left\{ \sum_S l_z^2 + \sum_P l_p^2 \right\} \right\} \cdot \prod_{\{\vec{r}\}} \delta(\Delta_4 l_p - \Delta_2 l_z + Q). \quad (\text{A.7})$$

Da mesma forma obtemos no limite $N \rightarrow \infty, U(1)$.

$$O_{U(1)}^V = \frac{1}{Z_{U(1)}^V} \sum_{\{l_z=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{l_p=-\infty\}}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta} \left\{ \sum_S l_z^2 + \sum_P l_p^2 \right\} \right\} \cdot \prod_{\{\vec{r}\}} \delta(\Delta_4 l_p - \Delta_2 l_z + Q). \quad (\text{A.8})$$

Definimos agora a função de correlação generalizada^(11,22,24)

$$O_H^V = \frac{1}{Z_H^V} \sum_{\{l_z=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{l_p=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{m(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta} \left[\sum_S l_z^2 + \sum_P l_p^2 \right] - \frac{1}{H} \sum_{\vec{r}} m^2(\vec{r}) \right\} \cdot \prod_{\{\vec{r}\}} \delta(\Delta_4 l_p - \Delta_2 l_z + Q + Nm) \quad (\text{A.9})$$

onde Z_H^V é o numerador fazendo-se $Q = 0$. É simples ver que no limite $H \rightarrow 0$ apenas o termo $m(\vec{r}) = 0$ (para todo $\vec{r}$) sobrevive e temos $U(1)$ ($O_H^V \xrightarrow{H \rightarrow 0} O_{U(1)}^V$), enquanto que no limite $H \rightarrow \infty$ todos os valores de $m(\vec{r})$ continuam igualmente e teremos o limite $Z_N(O_H^V \xrightarrow{H \rightarrow \infty} O_N^V)$. Desta forma (A.1) estará provada se provarmos que $\frac{\partial O_H^V}{\partial H} \geq 0$ para todo $H > 0$, é isto que faremos a seguir.

Se derivarmos O_H^V com respeito a H obtemos

$$\frac{\partial O_H^Y}{\partial H} = \frac{1}{(H Z_H^Y)^2} \sum_{\{l_z, l_p, m\}} \sum_{\{l'_z, l'_p, m'\}}$$

$$\cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2\beta} \sum_S (l_z^2 + l_z'^2) - \frac{1}{2\beta} \sum_P (l_p^2 + l_p'^2) - \frac{1}{H} \sum_{\vec{r}} (m^2(\vec{r}) + m'^2(\vec{r})) \right\} \cdot \sum_{\vec{r}} (m^2(\vec{r}) - m'^2(\vec{r}))$$

$$\prod_{\{\vec{r}\}} \delta(\Delta_4 l_p + \Delta_2 l_z + Q + N m(\vec{r})) \delta(\Delta_4 l'_p + \Delta_2 l'_z + N m'(\vec{r})). \quad (A.10)$$

Definimos agora novas variáveis

$$\alpha_z(\vec{r}) \equiv l_z(\vec{r}) + l'_z(\vec{r}) \quad (A.11a)$$

$$\alpha'_z(\vec{r}) \equiv l_z(\vec{r}) - l'_z(\vec{r}) \quad (A.11b)$$

$$\alpha_p(\vec{r}) \equiv l_p(\vec{r}) + l'_p(\vec{r}) \quad (A.11c)$$

$$\alpha'_p(\vec{r}) \equiv l_p(\vec{r}) - l'_p(\vec{r}) \quad (A.11d)$$

associadas às ligações z e plaquetas x-y, e as variáveis

$$\mu(\vec{r}) \equiv m(\vec{r}) + m'(\vec{r}) \quad (A.11e)$$

$$\mu'(\vec{r}) \equiv m(\vec{r}) - m'(\vec{r}) \quad (A.11f)$$

associadas aos sítios da rede. Vemos que os vínculos impostos pelos deltas de (A.8) exigem que:

$$K \equiv \Delta_4 \alpha_p - \Delta_2 \alpha_z + Q + N \mu = \Delta_4 \alpha'_p - \Delta_2 \alpha'_z + Q + N \mu' \equiv K' = 0 \quad (A.12)$$

Repare que as variáveis α_z e α'_z não são independentes, visto que elas devem possuir a mesma paridade (devem ser simultaneamente pares ou ímpares). O mesmo acontece para as variáveis α_p e α'_p e para $\mu(\vec{r})$ e $\mu'(\vec{r})$. Para somarmos independentemente sobre α_z , α'_z , α_p , α'_p , μ , μ' adicionamos em (A.10) um fator $\frac{1}{2} [1 + (-1)^{\alpha_z + \alpha'_z}]$ para

cada ligação z , um fator $\frac{1}{2}[1+(-1)^{\alpha_p+\alpha'_p}]$ para cada plaqueta $x-y$ e um fator $\frac{1}{2}[1+(-1)^{\mu+\mu'}]$ para cada ponto da rede. Podemos então agora reescrever (A.10) em termos das novas variáveis, obtendo

$$\frac{\partial O_H^V}{\partial H} = \frac{1}{(H Z_H^V)^2} \sum_{\{\alpha_p, \alpha_z, \mu\}} \sum_{\{\alpha'_p, \alpha'_z, \mu'\}} \prod_{\{\vec{r}\}} \{\delta_{k,0} \delta_{k',0}\}.$$

$$\exp \left\{ -\frac{1}{4\beta_S} \sum \alpha_z^2 - \frac{1}{4\beta_P} \sum \alpha_p^2 - \frac{1}{2H} \sum_{\vec{r}} \mu^2(\vec{r}) \right\} \cdot \sum_{\vec{r}} \mu(\vec{r}) \mu'(\vec{r}).$$

$$\exp \left\{ -\frac{1}{4\beta_S} \sum \alpha_z^2 - \frac{1}{4\beta_P} \sum \alpha_p^2 - \frac{1}{2H} \sum_{\vec{r}} \mu^2(\vec{r}) \right\}.$$

$$\prod_{\{z\}} \frac{1}{2} (1 + (-1)^{\alpha_z + \alpha'_z}) \cdot \prod_P \frac{1}{2} (1 + (-1)^{\alpha_p + \alpha'_p}) \cdot \prod_{\vec{r}} \frac{1}{2} (1 + (-1)^{\mu + \mu'}). \quad (A.13)$$

Podemos expandir os últimos produtórios em (A.13) obtendo um conjunto de L pontos da rede, L_z ligações (na direção z) e L_p plaquetas $x-y$ e obtemos:

$$\frac{\partial O_H^V}{\partial H} = \frac{1}{(Z_H^V H)^2} \cdot \sum_L \sum_{L_z} \sum_{L_p} \left\{ \sum_{\alpha_z, \alpha_p, \mu} \left(\prod_{\vec{r}} \delta_{k(\vec{r}),0} \right) \mu(\vec{r}) \right\}.$$

$$\exp \left[-\frac{1}{4\beta_S} \sum \alpha_z^2 - \frac{1}{4\beta_P} \sum \alpha_p^2 - \frac{1}{2H} \sum_{\vec{r}} \mu^2(\vec{r}) \right].$$

$$\exp \left[i\pi \sum_{\vec{r} \in L} \mu(\vec{r}) + i\pi \sum_{z \in L_z} \alpha_z + i\pi \sum_{p \in L_p} \alpha_p \right] \cdot \left. \right\}^2 \geq 0 \quad (A.14)$$

provando, portanto (A.1).

Para provarmos (A.2), definimos a função de correlação de m -pontos para a variável desordem:

$$D_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_m) \equiv \left\langle \cos \left(\sum_{i=1}^m \frac{2\pi}{N} g(\vec{r}_i) \right) \right\rangle \quad (A.15)$$

Na versão Villain podemos escrever:

$$D_N^V = \frac{1}{Z_V^N} \sum_{\{\varphi(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{k_z=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{k_p=-\infty\}}^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi}{N} \sum_{\vec{r}} Q(\vec{r}) \varphi(\vec{r})\right) \exp\left\{-\frac{\beta^*}{2} \left[\sum_S (\Delta_2 \varphi - 2\pi k_z)^2 + \sum_P (\Delta_4 \varphi - 2\pi k_p)^2 \right]\right\}. \quad (A.16a)$$

onde $Q(\vec{r})$ é dado por (A.4b) e

$$\beta^* = N^2/4\pi^2\beta \quad (A.16b)$$

enquanto que no caso $U(1)$ temos:

$$D_{U(1)}^V = \frac{1}{Z_V^{U(1)}} \sum_{\{\varphi(\vec{r})=-\infty\}}^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi}{N} \sum_{\vec{r}} Q(\vec{r}) \varphi(\vec{r})\right) \exp\left[-\frac{\beta^*}{2} \left[\sum_S (\Delta_2 \varphi)^2 + \sum_P (\Delta_4 \varphi)^2 \right]\right]. \quad (A.17)$$

Da mesma forma que em (A.9) definimos a função extrapola da

$$D_H^V = \frac{1}{Z_H^V} \sum_{\{\varphi\}} \sum_{\{k_z=-\infty\}}^{\infty} \sum_{\{k_p=-\infty\}}^{\infty} \cos\left(\frac{2\pi}{N} \sum_{\vec{r}} Q(\vec{r}) \varphi(\vec{r})\right) \exp\left[-\frac{\beta^*}{2} \sum_S (\Delta_2 \varphi - 2\pi k_z)^2 - \frac{\beta^*}{2} \sum_P (\Delta_4 \varphi - 2\pi k_p)^2\right] \exp\left\{-\frac{1}{H} \left[\sum_S k_z^2 + \sum_P k_p^2 \right]\right\}. \quad (A.18)$$

onde é claro que $D_H^V \xrightarrow{H \rightarrow 0} D_N^V$ e $D_H^V \xrightarrow{H \rightarrow \infty} D_{U(1)}^V$. Portanto para provar mos (A.2) basta que demonstremos que $\partial D_H^V / \partial H \leq 0$ para todo $H > 0$.

Derivando-se (A.18) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_H^V}{\partial H} &= \frac{1}{(H Z_H^V)^2} \sum_{\{\psi, k_z, k_p\}} \sum_{\{\psi', k'_z, k'_p\}} \cos \frac{2\pi}{N} \sum_{\vec{r}} Q(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \\ &\cdot \exp \left\{ -\frac{\beta^*}{2} \sum_S [(\Delta_2 \psi - 2\pi k_z)^2 + (\Delta_2 \psi' - 2\pi k'_z)^2] \right\} \\ &\cdot \exp \left\{ -\frac{\beta^*}{2} \sum_P [(\Delta_4 \psi - 2\pi k_p)^2 + (\Delta_4 \psi' - 2\pi k'_p)^2] \right\} \\ &\cdot \exp \left\{ -\frac{1}{H} \left[\sum_S (k_z^2 + k_z'^2) + \sum_P (k_p^2 + k_p'^2) \right] \right\} \\ &\cdot \left[\sum_S (k_z^2 - k_z'^2) + \sum_P (k_p^2 - k_p'^2) \right]. \end{aligned} \quad (A.19)$$

Esta expressão pode ser simetrizada em termos das variáveis (ψ, k_z, k_p) e (ψ', k'_z, k'_p) . Como (A.19) é antissimétrica na troca $(k_z, k_p) \rightarrow (k'_z, k'_p)$ podemos substituir o primeiro termo em (A.19) por:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \left(\cos \frac{2\pi}{N} \sum_{\vec{r}} Q(\vec{r}) \psi(\vec{r}) - \cos \frac{2\pi}{N} \sum_{\vec{r}} Q(\vec{r}) \psi'(\vec{r}) \right) \\ &= -\sin \left[\frac{\pi}{N} \sum_{\vec{r}} Q(\vec{r}) (\psi(\vec{r}) + \psi'(\vec{r})) \right] \sin \left[\frac{\pi}{N} \sum_{\vec{r}} Q(\vec{r}) (\psi(\vec{r}) - \psi'(\vec{r})) \right]. \end{aligned} \quad (A.20)$$

Substituindo-se (A.20) em (A.19) definimos, assim como o fizemos em (A.11), novas variáveis pela soma e diferença das variáveis antigas. Introduzindo fatores análogos àqueles introduzidos em (A.13) conseguimos fazer os traços nas novas variáveis de maneira independente. Finalmente separando-se as somas em (A.14) obtemos que (A.19) pode ser escrito como quadrado. O sinal negativo proveniente de (A.20) implica então que $\partial D_H^V / \partial H \leq 0$ e consequentemente provamos (A.2).

APÊNDICE B

HAMILTONIANA QUÂNTICA DO MODELO 24 DE FEVEREIRO

Entendemos, neste apêndice, o estudo realizado no capítulo III sobre o modelo 24 de Fevereiro. Obteremos sua matriz de transferência, sua Hamiltoniana de tempo contínuo e por fim exibiremos os operadores ordem e desordem mostrando neste contexto a autodualidade do modelo.

Consideremos o Hamiltoniano clássico (III.30) e pensemos que a direção z defina a direção temporal (Euclidiana). O Hamiltoniano é também definido na rede cúbica de lado L , cujos pontos são dados por $(\vec{r}, t)$ onde $\vec{r} = (x, y)$ e sujeito a condições periódicas de contorno. Estamos interessados em construir o operador $\hat{H}$ que descreverá a evolução temporal de uma configuração no tempo t àquela no tempo $t' = t + z$ (onde z é o espaçamento da rede na direção temporal). Como as variáveis pertencem ao grupo Z_N .

$$S(\vec{r}, t) = e^{i \frac{2\pi}{N} p(\vec{r}, t)} \quad p=0, 1, \dots, N-1. \quad (B.1)$$

o sistema, para cada tempo, pode estar em N^{L^2} estados.

O Hamiltoniano clássico (III.30) pode ser escrito como

$$H = \sum_t [h_1(t) + h_2(t)] \quad (B.2a)$$

onde

$$h_1(t) = \sum_{\vec{r}} -\frac{J}{2} [S(\vec{r}, t) S^+(\vec{r}, t+z) + c.c.] \quad (B.2b)$$

e

$$h_2(t) = \sum_{\vec{r}} -\frac{k}{2} \left\{ s(\vec{r};t) s^+(\vec{r}+\vec{x};t) s(\vec{r}+\vec{x}+\vec{y};t) s^+(\vec{r}+\vec{y};t) + \text{c.c.} \right\} \quad (\text{B.2c})$$

Queremos construir a matriz de transferência $\hat{T}$, tal que a função de partição do modelo possa ser escrita como

$$Z = \text{Tr} [\hat{T}^L] \quad (\text{B.3})$$

Denotando por $|p\rangle$ a configuração do sistema no tempo t , e por $|p'\rangle$ aquela do tempo t' , podemos escrever

$$\langle p' | \hat{T} | p \rangle = \langle p' | \hat{T}_1 | p \rangle \cdot \langle p | \hat{T}_2 | p \rangle \quad (\text{B.4a})$$

onde

$$\langle p' | \hat{T}_1 | p \rangle = e^{-\beta h_1(t)} \quad (\text{B.4b})$$

e

$$\langle p | \hat{T}_2 | p \rangle = e^{-\beta h_2(t)} \quad (\text{B.4c})$$

Podemos pensar em $S(\vec{r},t)$ como o autovalor do operador $\hat{S}(\vec{r},t)$ que age no espaço das configurações.

$$\hat{S}(\vec{r},t) |p\rangle = e^{i\frac{2\pi}{N} p(\vec{r},t)} |p\rangle \quad (\text{B.5})$$

Como $\hat{T}_2$ é diagonal, ele pode ser escrito simplesmente em termos de $\hat{S}$. Para construirmos a parte não diagonal de $\hat{T}$, isto é $\hat{T}_1$, notemos que em termos de $p(\vec{r},t)$ podemos escrever^(12,13)

$$\begin{aligned}
 \langle p' | T_1 | p \rangle &= \delta_{|p-p'|,0} \exp[\beta J] + \delta_{|p-p'|,1} \exp\left[\beta J \cos \frac{2\pi}{N}\right] + \\
 &+ \dots + \delta_{|p-p'|,N-1} \exp\left[\beta J \cos \frac{2\pi(N-1)}{N}\right].
 \end{aligned}
 \tag{B.6}$$

Como o conjunto de estados $\{|n\rangle\}$ é completo, podemos escrever (B.6) em termos dos operadores $\hat{R}(\vec{k})$, que são os conjugados aos operadores $\hat{S}(\vec{k})$.

$$\langle p' | \hat{R} | p \rangle = \delta_{p', p+1} \pmod{N}
 \tag{B.7}$$

Segue então de (B.5) e (B.7) que os operadores $\hat{S}$ e $\hat{R}$ devem satisfazer a álgebra Z_N :

$$\hat{S}(\vec{r}) \hat{R}(\vec{r}) = e^{i\frac{2\pi}{N}} \hat{R}(\vec{r}) \hat{S}(\vec{r})
 \tag{B.8a}$$

$$[\hat{S}(\vec{r}), \hat{R}(\vec{r})] = 0 \quad \text{se } \vec{r} \neq \vec{r}'
 \tag{B.8b}$$

$$\hat{S}^N = \hat{R}^N = 1
 \tag{B.8c}$$

Podemos então escrever

$$\hat{T}_1 = \prod_{\vec{r}} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{R}^k(\vec{r}) \exp\left[\beta J \cos \frac{2\pi}{N} k\right]
 \tag{B.9}$$

O operador Hamiltoniano (tempo contínuo) pode então ser obtido considerando-se o limite^(26,27)

$$\hat{H} = \lim_{\tau \rightarrow 0^+} -\frac{1}{\tau} \ln \hat{T}
 \tag{B.10}$$

Não é difícil identificarmos o espaçamento temporal como

$$\tau = \exp \left[\beta J \left(\cos \frac{2\pi}{N} - 1 \right) \right] \quad (\text{B.11})$$

O limite (B.10), para nos dar uma Hamiltoniana fisicamente razoável, deve ser feito tomando-se $J \rightarrow 0$ e $K \rightarrow \infty$ de forma que $\lambda = \frac{\beta K}{\tau}$ seja fixo (λ fará o papel da temperatura no Hamiltoniano $\hat{H}$). É fácil ver que neste limite somente sobreviverá em (B.9) os primeiros dois termos da soma e por (B.10) prontamente tiramos o operador Hamiltoniano:

$$\hat{H} = -\lambda \sum_{\vec{r}} \frac{1}{2} \left[\hat{S}(\vec{r}) \hat{S}^+(\vec{r}+\hat{x}) \hat{S}(\vec{r}+\hat{x}+\hat{y}) \hat{S}^+(\vec{r}+\hat{y}) + h.c. \right] - \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}} \left[\hat{R}(\vec{r}) + \hat{R}^+(\vec{r}) \right] \quad (\text{B.12})$$

Os operadores duais a $\hat{S}$ e $\hat{R}$ podem ser obtidos facilmente:

$$\hat{\mu}(\vec{r}) = \hat{S}(\vec{r}) \hat{S}^+(\vec{r}+\hat{x}) \hat{S}(\vec{r}+\hat{x}+\hat{y}) \hat{S}^+(\vec{r}+\hat{y}) \quad (\text{B.13a})$$

e

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \prod_{n_x=0}^{\infty} \prod_{n_y=0}^{\infty} \hat{R}(\vec{r} + n_x \hat{x} + n_y \hat{y}) \quad (\text{B.13b})$$

onde $\vec{r} = \vec{r} + \frac{\vec{x}+\vec{y}}{2}$ são os sítios da rede dual (quadrada neste caso). É simples exercício verificar que estes operadores satisfazem a mesma álgebra Z_N (B.8)

$$\hat{\rho}(\vec{r}) \hat{\mu}(\vec{r}) = e^{i \frac{2\pi}{N}} \hat{\mu}(\vec{r}) \hat{\rho}(\vec{r}) \quad (\text{B.14a})$$

$$[\hat{\rho}(\vec{r}), \hat{\mu}(\vec{r})] = 0 \quad \text{se } \vec{r} \neq \vec{r}' \quad (\text{B.14b})$$

$$\hat{\rho}^N(\vec{r}) = \hat{\mu}^N(\vec{r}) = 1 \quad (\text{B.14c})$$

e que o operador $\hat{R}$ pode ser escrito como

$$\hat{R}(\vec{r} + \vec{x} + \vec{y} + \vec{z}) = \hat{\rho}(\vec{r}) \hat{\rho}^+(\vec{r} + \vec{x}) \hat{\rho}(\vec{r} + \vec{x} + \vec{y}) \hat{\rho}^+(\vec{r} + \vec{y}) \quad (\text{B.15})$$

Portanto a Hamiltoniãna $\hat{H}$ em termos dos operadores duais será:

$$\begin{aligned} H = -\lambda \left\{ \sum_{\vec{r}} \frac{1}{2\lambda} [\hat{\rho}(\vec{r}) \hat{\rho}^+(\vec{r} + \vec{x}) \hat{\rho}(\vec{r} + \vec{x} + \vec{y}) \hat{\rho}^+(\vec{r} + \vec{y}) + h.c.] \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \sum_{\vec{r}} [\mu(\vec{r}) + \mu^+(\vec{r})] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Vemos então que de (B.16) e (B.12) se segue que:

$$\hat{H}(\lambda) = \lambda \hat{H}(1/\lambda) \quad (\text{B.17})$$

o que demonstra a autodualidade do operador Hamiltoniano. O acoplamento dual $\bar{\lambda} = 1/\lambda$ e o ponto de autodualidade $\bar{\lambda} = \lambda = 1$ para todo N .

Reparemos que enquanto o modelo clássico (III.30) não era autodual para $N \geq 5$, uma das virtudes do limite do tempo contínuo $\bar{\lambda}$ é restaurar a autodualidade para todo N .

REFERÊNCIAS

- 1 - GRINSTEIN, G., J. Phys. A 13, L 201 (1980).
- 2 - GRINSTEIN, G., Phys. Rev. B 23, 4615 (1981).
- 3 - AMIT, D., ELITZUR, S., RABINOVICI, E. and SAVIT, R., Nucl. Phys. B 210 [FS6], 69 (1982).
- 4 - ALCARAZ, F.C., JACOBS, L. and SAVIT, R., J. Phys. A 16, 175 (1982).
- 5 - MERMIN, N.D. and WAGNER, H., Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1966).
- 6 - WEGNER, F., Zeit. Phys. 206, 465 (1967).
- 7 - MERMIN, N.D., Phys. Rev. 176, 250 (1968).
- 8 - COLEMAN, S., Comm. Math. Phys. 31, 259 (1973).
- 9 - ALCARAZ, F.C., JACOBS, L. and SAVIT, R., Phys. Rev. Lett. 51, 435 (1983).
- 10 - SAVIT, R., Nucl. Phys. B 200 [FS4] 233 (1982).
- 11 - ELITZUR, S., PEARSON, R. and SHIGEMITU, J., Phys. Rev. D19, 3698 (1979).
- 12 - ALCARAZ, F.C. and KÖBERLE, R., J. Phys. A 13, L153 (1980).
- 13 - ALCARAZ, F.C. and KÖBERLE, R., J. Phys. A 14, 1169 (1981).
- 14 - SAVIT, R., Rev. Mod. Physics 52, 453 (1980).
- 15 - ALCARAZ, F.C. and TSALLIS, C., J. Phys. A 15, 587 (1982).
- 16 - EINHORN, M., RABINOVICI, E. and SAVIT, R., Nucl. Phys. B 170 [FS1], 16 (1980).
- 17 - VILLAIN, J., J. Physique 36, 581 (1975).
- 18 - SAVIT, R., Phys. Rev. B 17, 1340 (1978).
- 19 - BOGOLIUBOV, N.N., Physik. Abhandl. Sowjetunion 6, 1, 113, 229 (1962).
- 20 - WAGNER, H., Zeit. Phys. 195, 273 (1966).

- 21 - ALCARAZ, F.C., J. Phys. A. 15 L 495, (1982).
- 22 - ALCARAZ, F.C., CARDY, J. and OSTLUND, S., J. Phys. A 16, 159 (1983).
- 23 - ALCARAZ, F.C. and JACOBS, L., J. Phys. A. 15, L357 (1982).
- 24 - ALCARAZ, F.C. and JACOBS, L., Nucl. Phys. B [FS4]
- 25 - ALCARAZ, F.C. and CARDY, J., J. Phys. A. 15, 3815 (1982).
- 26 - FRADKIN E. and SUSSKIND, L., Phys. Rev. D 17, 2637 (1978).
- 27 - KOGUT, J., Rev. Mod. Phys. 51, 659 (1979).
- 28 - KRAMERS, H.A. and WANNIER, G.H., Phys. Rev. 60, 252 (1941).
- 29 - POTTS, R.B., Proc. Camb. Soc. 48, 106 (1952).
- 30 - ALCARAZ, F.C., JACOBS, L. and SAVIT, R., Phys. Lett. 89 A , 49 (1982).
- 31 - LIEBMANN, R., Phys. Lett. 85 A, 59 (1981).
- 32 - PEARCE, P. and BAXTER, R., Phys. Rev. B 24, 5295 (1981).
- 33 - CREUTZ, M., JACOBS, L. and REBBI, C., Phys. Rev. D 20, 1915 (1979).
- 34 - CREUTZ, M., JACOBS, L. and REBBI, C., Phys. Rep. 95, 201 (1983).
- 35 - CREUTZ, M., JACOBS, L. and REBBI, C., Phys. Rev. Lett. 42, 1390 (1979).
- 36 - METROPOLIS, N. ROSENBLUTH, A.W., ROSENBLUTH, M.N. and TELLER, A.H., J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953).
- 37 - BINDER, K., "Monte Carlo Methods in Statistical Physics" (K. Binder Ed), Springer-Verlag, Berlin (1979).
- 38 - BARBER, M., "Phase transition and Critical Phenomena" Vol. 8 (Ed. C. Domb and J.L. Lebowitz) Academic Press (1983).
- 39 - KOSTERLITZ, J.M. and THOULESS, D.J., J. Phys. C 6, 1181 (1973).