

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Fases anisotrópicas em sistemas com interações competitivas.

Anisotropic phases in systems with competing interactions. *

Alejandro Mendoza Coto

Tese realizada sob orientação do Dr. Daniel A. Stari-
olo e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em
preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção
do título de Doutor em Ciências.

Porto Alegre

Setembro, 2015

*Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Fases anisotrópicas em sistemas com interações competitivas.

Anisotropic phases in systems with competing interactions. †

DATA: 9 de Setembro de 2015

NOME: Alejandro Mendoza Coto

Tese aprovada pelos 4 membros da banca examinadora como requisito parcial para obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Banca examinadora: _____ Presidente

†Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Resumo

Nesta Tese de Doutorado se apresenta um estudo teórico das fases anisotrópicas (faixas) em sistemas isotrópicos com interações competitivas. Focamos nosso trabalho em sistemas que apresentam uma interação de curto alcance atrativa e uma interação de longo alcance repulsiva. Sistemas com estas características abundam na natureza, por exemplo: filmes magnéticos ultrafinos, sistemas de elétrons fortemente correlacionados e sistemas de copolímeros, só para mencionar alguns.

No segundo capítulo estudamos numericamente as propriedades de dois modelos com competição. Mostramos que além de algumas características óbvias em comum, os dois modelos apresentam propriedades bem diferentes na fase de baixa temperatura, contrário ao que normalmente se assume na literatura. Mediante uma análise de campo médio e campo médio mais pequenas flutuações estudamos os perfis das soluções de faixas. O que permite caracterizar magnitudes como o comprimento de modulação e a amplitude do parâmetro de ordem, em função da temperatura. É importante mencionar como a inclusão das flutuações muda dramaticamente os diagramas de fase, levando a transição da fase de faixas à fase desordenada de contínua, em campo médio, a fortemente descontínua quando consideramos flutuações. Também é estudado neste capítulo as propriedades elásticas do sistema de faixas, via o cálculo do módulo de compressibilidade das faixas. Foi observada uma anomalia na compressibilidade para baixas temperaturas em ambos sistemas o que, como é explicado no texto, parece indicar um mecanismo mais geral para a anomalia do módulo de Young.

Devido às fortes flutuações presentes em duas dimensões não se observa ordem posicional de longo alcance no limite termodinâmico em sistemas formadores de faixas. No entanto, frequentemente nestas condições se percebe uma certa ordem orientacional das estruturas moduladas. Assim, o terceiro capítulo é dedicado ao estudo da fase nemática em sistemas de faixas com interações competitivas. Aplicamos a Self Consistent Screening Approximation a um modelo genérico com competição e mostramos como a solução nemática aparece em sistemas isotrópicos. Assim também é obtido que para temperaturas menores que uma dada temperatura crítica a solução nemática tem menor energia livre que a solução desordenada. Isto estabelece à fase nemática como a fase termodinamicamente estável para $T < T_c$.

No capítulo 4 esclarecemos e generalizamos alguns dos resultados discutidos até esse momento nesta Tese. O mesmo é dedicado a estudar quais tipos de interações presentes no sistema dão lugar ao estabelecimento de uma fase nemática estável em duas dimensões, no limite termodinâmico. Generalizamos a teoria padrão da fusão (melting) em sistemas de faixas e mostramos que é possível mapear o problema

original no estudo de um modelo XY generalizado. Desta forma, considerando resultados prévios da literatura foi possível estabelecer as propriedades críticas do comprimento de correlação orientacional e do parâmetro de ordem nemático. No que se refere à ordem posicional do padrão de faixas é mostrado que, independente do alcance das interações, uma fase com ordem posicional de longo ou quase longo alcance, é proibida em duas dimensões.

O capítulo final desta Tese estuda o problema da fusão de sistemas quânticos de faixas. Para isso se generalizam resultados obtidos no capítulo prévio, e novamente é possível mostrar que se pode mapear o problema original em um sistema de rotores quânticos. Tal mapeamento permite, utilizando resultados prévios e outros obtidos pela primeira vez nesta Tese, deduzir a forma qualitativa dos diagramas de fases para a ordem orientacional nos diferentes casos possíveis. Em particular discutem-se as propriedades dos modelos efetivos resultantes, na região crítica quântica. Finalmente é estudado neste capítulo a possível existência de uma fase esmética para sistemas quânticos de faixas. Nossos resultados mostram que tal fase existe no limite termodinâmico apenas a temperatura zero. Considerando então que para flutuações quânticas suficientemente fortes a ordem posicional é perdida, é natural concluir a existência de uma transição, entre a fase esmética e a fase posicionalmente desordenada, para valores intermediários da intensidade das flutuações quânticas. Os resultados obtidos mostraram que esta é de fato uma transição quântica de segunda ordem, cujos expoentes críticos foram calculados mediante as técnicas do grupo de renormalização perturbativo.

Abstract

This Ph.D. thesis presents a theoretical study of anisotropic phases (stripes) in isotropic systems with competing interactions. We focus our work on systems which present a short range attractive interaction and a long range repulsive interaction. Systems of this type are many in nature, for instance: ultra-thin magnetic films, strongly correlated electron systems and copolymer systems, just to mention some of them.

In the second chapter we study numerically the properties of two models with competition. We show that, besides some obvious features in common, both models present very different low temperature behavior, in contrast to what is usually assumed in the literature. By means of a mean field and mean field plus small fluctuations analysis, we study the stripe-solution profile, which allows us to characterize quantities like the modulation length and the amplitude of the order parameter as a function of temperature. It is remarkable how the inclusion of fluctuations changes drastically the phase diagrams, driving the stripe to disorder phase transition from continuous, in the mean field approximation, to strongly discontinuous when fluctuations are considered. Besides, we characterize the elastic properties of the stripe system by calculating the compressibility modulus. We observe an anomaly in the compressibility for low temperatures in both systems, which as explained in the text, seems to indicate a more general mechanism than that one recently proposed for the anomaly of the Young modulus in these systems.

Due to the strong fluctuations present in two dimensions, is not observed long range positional order, at moderate temperatures, in stripes systems. However, in this conditions it is usual to observe some degree of orientational order for the modulated structures. In this context, the third chapter is dedicated to study the nematic phase in stripe systems with competing interactions. We show by applying the Self Consistent Screening Approximation (SCSA) to a generic model with competition, how the nematic solution appears in isotropic systems, and how, for temperatures lower than the critical temperature, the nematic solution has lower free energy than the disordered solution. This establishes the nematic phase as the thermodynamically stable phase for $T < T_c$.

Chapter 4 of this work clarifies and generalizes some of the results discussed until then in the thesis. It is dedicated to study which types of interactions gives rise to a stable nematic phase in two dimensions in the thermodynamic limit. We provided a generalization of the standard theory of orientational melting in stripe systems. This generalization allows to maps the original problem into a generalized XY model. In this way, taking into account known results in the literature, we deduce the critical properties of the orientational

correlation length and the nematic order parameter. Additionally, it is shown that a phase with positional long range or quasi long range order is forbidden at any finite temperature.

In the last chapter, we focus on the study of the orientational and positional melting of quantum stripe systems. Our calculations shows that, in perfect analogy with our previous results, it is possible to map the original problem to a problem of quantum rotors. This mapping allows to use some previous results, and some news to deduce a qualitative phase diagrams for the orientational properties of the system for all possible cases. We also pay particular attention to the properties of the effective model in the quantum critical region. Finally, in this chapter we study the existence of a smectic phase in quantum stripe systems. Our results show that such a phase is stable only at zero temperature. Considering then that at strong enough quantum fluctuations the positional long range order is destroyed, it is natural to infer the existence of a transition between the smectic phase and the positionally disordered phase at intermediate value of the quantum fluctuation strength. The presented results show that such transition is in fact a second-order phase transition, whose critical exponents were calculated by means of perturbative renormalization group techniques.

Agradecimentos

Ao professor Daniel Stariolo, pela orientação exemplar, por todo o conhecimento transmitido. Pelas inúmeras discussões de física, na sua sala às duas da tarde. Pela confiança depositada em mim, pelo apoio e por sempre encorajar a minha independência. Expresso também minha profunda gratidão a ele, pela acolhida excelente que me deu desde o meu primeiro dia no Brasil, pela ajuda incondicional toda vez que precisei, pela sua sincera amizade.

Aos professores Lucas Nicolao (UFSC) e Daniel Barci (UFRJ) por me dar a oportunidade de trabalhar ao seu lado. Pelos ensinamentos e pela ótima parceria.

Ao professor Miguel Gusmão (UFRGS) pelas muitas coisas que aprendi nos seus cursos. Pela sua disposição em me ajudar toda vez que o procurei.

Um agradecimento especial a minha esposa pelo apoio constante. Pela sua valentia e o seu desprendimento desde $t = 0$. Por aceitar com amor, viver do lado de um físico, com todo o que isso implica.

A maior das gratidões aos meus pais e aos meus irmãos. Pelo seu carinho incondicional de perto e de longe. Por me apoiar nas minhas decisões, inclusive nas mais difíceis. Pelo sacrifícios que fizeram para eu chegar onde eles não conseguiram. Por compartilhar meus sonhos.

A Bea por nos fazer sentir parte da sua família. Por todo o carinho e o apoio desde a nossa chegada. Pela sua amizade.

Ao Rogelio pela grande amizade. Pelas muitas discussões de física ou não. Pelas boas lembranças em Belen. Pela sua confiança em mim e os bons conselhos. Por me ajudar com as 40 perguntas!

Ao apoio financeiro do CNPq e do Instituto de Física da UFRGS.

A todos aqueles que contribuíram para eu chegar até aqui, para todos, muito obrigado!

Alejandro Mendoza Coto

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Setembro 2015

Sumário

Agradecimentos	vi
Sumário	vii
Lista de Figuras	ix
1 Introdução	1
2 Estudo comparativo de modelos formadores de faixas	6
2.1 Aproximação de campo médio incluindo flutuações	7
2.1.1 Soluções de faixas	8
2.1.2 Soluções de faixas incluindo flutuações	9
2.2 Diagramas de fase	11
2.2.1 Modelo 1	11
2.2.2 Modelo 2	15
2.3 Comportamento anômalo da compressibilidade das faixas	17
2.4 Conclusões	19
3 Fase nemática na <i>Self Consistent Screening Approximation</i>	21
3.1 Hamiltoniano do Modelo, formação das faixas e a fase nemática	22
3.2 A solução nemática na SCSA	25
3.2.1 Resultados numéricos	28
3.2.2 Natureza da transição isotrópica-nemática na SCSA	28
3.2.3 Comportamento crítico	30
3.3 Conclusões	31
4 A fase nemática e o modelo XY generalizado	33
4.1 Teoria elástica em sistemas com interações de longo alcance	34
4.1.1 Ordem posicional e orientacional na aproximação Gaussiana	40
4.2 Teoria generalizada da fusão de sistemas clássicos de faixas	43
4.2.1 O Modelo XY generalizado para o sistema de faixas	52
4.3 Comportamento crítico e resultados exatos	53
4.4 Resultados de simulações numéricas	55
4.5 Conclusões	58

5	Propriedades topológicas de sistemas quânticos de faixas	60
5.1	Teoria quântica da fusão orientacional em sistemas de faixas	60
5.2	Transição quântica orientacional em sistemas com interações de curto alcance.	68
5.3	Transição quântica orientacional em sistemas com interações de longo alcance.	71
5.3.1	Resultados a temperatura zero	72
5.3.2	Resultados a temperatura finita	74
5.4	Cristal de faixas a temperatura zero.	78
5.4.1	Termos de ordem superior na teoria elástica padrão	80
5.4.2	Construção da teoria efetiva da transição esmética	82
5.5	Conclusões	86
6	Conclusões gerais	90
6.1	Lista de Publicações	92
	Apêndice A A “Self Consistent Screening Approximation” no estudo da fase nemática.	93
	Referências Bibliográficas	96

Lista de Figuras

1.1	Padrões de faixas de estruturas lamelares (esquerda) e cilíndricas (direita) em filmes finos de co-polímeros: (a) e (d), imagens de microscopia eletrônica de varredura dos padrões de faixas, (b) e (e), seção transversal para cada sistema, e (c) e (f), representação esquemática do ordenamento molecular.	2
1.2	Evolução do fator de estrutura com o aumento da temperatura numa simulação de Langevin de um modelo de filme magnético ultrafino. [17]	2
2.1	Relação local entre a amplitude das flutuações e o valor médio do parâmetro de ordem. . . .	10
2.2	Diagramas de fase para o modelo 1. As linhas pontilhadas representam curvas de igual comprimento de modulação (λ) . Os pontos representam os resultados da solução numérica. Esquerda: Diagrama de fase em campo médio. A linha superior contínua corresponde a uma transição contínua entre a fase modulada e a fase desordenada. Direita: Diagrama de fase incluindo flutuações. A linha superior contínua corresponde a uma transição descontínua entre a fase modulada e a fase desordenada.	12
2.3	Esquerda: Dependência com a temperatura do comprimento de modulação (λ) do modelo 1 para $a = 1$, normalizado ao valor correspondente ao mínimo do espectro, λ_0 . Pontos inferiores e superiores correspondem aos resultados com e sem flutuações incluídas, respectivamente. As curvas contínuas representam o melhor ajuste dos resultados numéricos pela funcionalidade proposta (2.17). A curva inferior é interrompida produto da transição à fase desordenada. Direita: Dependência com a temperatura da amplitude de modulação (M) para o modelo 1 com $a = 1$. A linha inferior contínua corresponde à solução de campo médio e a superior ao caso com flutuações incluídas. Os pontos representam os resultados da solução numérica.	13
2.4	Dependência com a temperatura da largura da parede de domínio (ξ) normalizada com o comprimento de modulação (λ) para o modelo 1 com $a = 1$. O limite desta magnitude para uma função seno perfeito (modo único) é representado por uma linha horizontal. A curva contínua superior corresponde à solução de campo médio e a inferior a quando as flutuações são incluídas. Os pontos representam os resultados da solução numérica.	14

2.5	Esquerda: Diagrama de campo médio para o modelo 2. As linhas pontilhadas representam curvas de iguais comprimentos de modulação (λ). A linha contínua superior corresponde a uma transição de segunda ordem entre uma fase modulada e outra desordenada. A linha inferior contínua define uma transição entre a fase modulada e a fase uniforme. Os pontos representam os resultados numéricos. Direita: Energia livre do modelo 2 como função do comprimento de modulação para diferentes temperaturas. As duas curvas mais acima mostram um único mínimo para λ levemente menor do que 1 (fase modulada). Nas duas curvas inferiores um segundo mínimo à direita da figura aparece, sinalizando uma transição descontínua a um estado uniforme.	15
2.6	Esquerda: Diagrama de fases para o modelo 2 incluindo flutuações. As linhas pontilhadas representam curvas de iguais comprimentos de modulação (λ). A linha superior corresponde a uma transição de primeira ordem a uma fase desordenada. Abaixo da linha contínua inferior a fase homogênea tem menor energia livre que a fase modulada. Note que a nova forma das curvas com λ constante implicam um comprimento de modulação crescente com a na transição. Os pontos representam os resultados da solução numérica. Direita: Dependência do comprimento de modulação (λ) com a temperatura para o modelo 2 com $a = 0.5$. Os pontos superiores e inferiores correspondem aos resultados sem e com flutuações respectivamente. As curvas contínuas representam o melhor ajuste dos resultados pela funcionalidade proposta (2.17). A linha inferior é interrompida a causa da transição à fase desordenada.	16
2.7	Dependência com a temperatura da largura da parede de domínio (ξ) normalizada ao comprimento de modulação (λ) para $a = 0.5$ no modelo 2. O valor limite desta magnitude para perfil senoidal perfeito é representado por uma linha horizontal. A curva superior corresponde à solução de campo médio e a inferior à solução com flutuações incluídas. Os pontos representam os resultados da solução numérica.	17
2.8	As curvas contínuas correspondem ao módulo de Young calculado numericamente. Os pontos representam o melhor ajuste usando a relação de escala. As curvas inferiores correspondem à aproximação de campo médio e as superiores ao caso com flutuações incluídas. Esquerda: Modelo 1. Direita: Modelo 2.	19
3.1	Esquerda: Solução numérica $\alpha(r)$ para $v = 0.1$. Direita: Solução numérica de r como função de r_0 para $v = 0.1$. A curva superior pontilhada corresponde à solução com $\alpha \neq 0$, enquanto a curva contínua inferior se corresponde à solução com $\alpha = 0$	28
3.2	Esquerda: O parâmetro de ordem nemático α como função da temperatura adimensional T , para $v = 0.1$. Direita: Diferença de energia livre entre a solução isotrópica e a solução nemática como função da temperatura adimensional para $v = 0.1$	29
4.1	Representação esquemática da interação de longo alcance entre dois dipolos elementares. . .	37
4.2	Gráfico de densidade correspondente a um padrão de faixas que apresenta uma deslocação. A circunferência central destaca o núcleo da deslocação e o contorno fechado, formado pela linha pontilhada e a seta, indicam a diferença no número de faixas a ambos lados da deslocação.	44

4.3	Susceptibilidade orientacional do modelo Coulombiano (quadrados azuis) e dipolar (pontos vermelhos) como função da dimensão linear do sistema em escala Log-Log. As linhas contínuas se correspondem com leis de potências com expoentes 0.7 (linha inferior) e 0.6 (linha superior).	57
5.1	Diagrama de fases qualitativo do modelo XY quântico [67]. A natureza das regiões assim como a notação utilizada é explicada no texto.	69
5.2	Diagrama de fases qualitativo do modelo de rotores com interações de longo alcance ($\sigma < 2$). A natureza das regiões assim como a notação utilizada é explicada no texto.	78
5.3	Diagrama de fases qualitativo para os sistemas quânticos de faixas a temperatura zero. Os valores r_{c_1} e r_{c_2} , indicam os pontos críticos quânticos das transições esmética-nemática e nemática-desordenada respectivamente. Como explicado no texto, na fase esmética os sistemas apresentam tanto ordem posicional quanto orientacional, enquanto que na fase nemática os sistemas apenas possuem ordem orientacional.	89

Capítulo 1

Introdução

Sistemas físicos em que o parâmetro de ordem forma padrões estendidos espacialmente são comuns na natureza. Exemplos vão desde sistemas da física do estado sólido, como filmes magnéticos ultrafinos [1, 2] e sistemas de elétrons fortemente correlacionados [3, 4] até sistemas da matéria condensada mole como mono-camadas de Langmuir [5], co-polímeros de di-bloco [6, 7] (Figura 1.1) e sistemas com caroço mole [8, 9]. Encontram-se nestes sistemas padrões tais como: faixas, bolhas, estruturas lamelares, padrões labirínticos, etc. Uma característica comum neles é a presença de frustração proveniente da estrutura da rede ou da competição entre uma interação atrativa de curto alcance e outra repulsiva de longo alcance [10, 11].

Embora algumas propriedades gerais destes sistemas sejam bem conhecidas, como o diagrama de fases na aproximação de campo médio ou a variação do parâmetro de ordem perto da temperatura de transição (separação de fases) [12, 13, 14], o comportamento a temperaturas mais baixas tem sido menos explorado. Um exemplo disso é a recentemente reportada reentrância no diagrama de fases de sistemas ferromagnéticos dipolares frustrados em um campo magnético externo [15, 16].

Assim mesmo a existência ou não de fases que apresentem ordem posicional e ou orientacional é ainda discutida. Logo que a separação de fases acontece num sistema de faixas, é geralmente observado um estado rico em defeitos topológicos (Figura 1.1, (a) e (d)) que apresentam grande mobilidade. Nestas condições as simetrias orientacional e translacional são restauradas pelo desordem numa fase chamada de líquido de faixas. Esse estado tem como característica uma função de correlação estendida (sem picos de Bragg) que apresenta um máximo típico num suporte circular no espaço de momentos, o que de novo revela a presença das simetrias orientacional e posicional [17].

A partir deste ponto a diminuição da temperatura, dependendo das interações presentes no sistema, pode dar lugar a uma fase onde os defeitos, já quase imóveis, impedem a ordem posicional (cristalina).

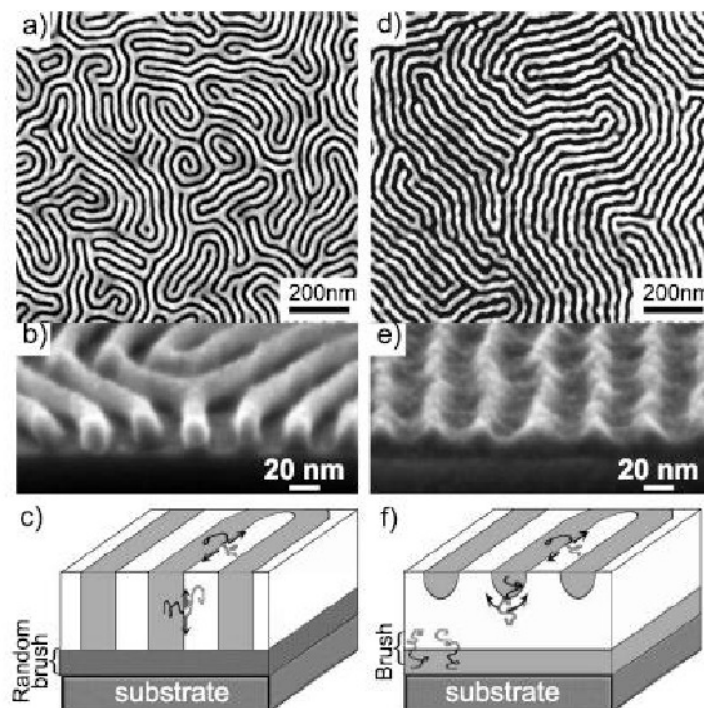


Figura 1.1: Padrões de faixas de estruturas lamelares (esquerda) e cilíndricas (direita) em filmes finos de copolímeros: (a) e (d), imagens de microscopia eletrônica de varredura dos padrões de faixas, (b) e (e), seção transversal para cada sistema, e (c) e (f), representação esquemática do ordenamento molecular.

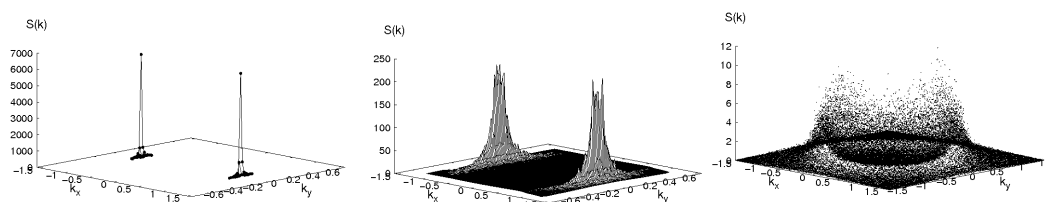


Figura 1.2: Evolução do fator de estrutura com o aumento da temperatura numa simulação de Langevin de um modelo de filme magnético ultrafino. [17]

No entanto, o sistema consegue quebrar a simetria orientacional e se estabelece a chamada fase nemática. Nesta fase a função de correlação no espaço de momentos não revela uma ordem cristalina, mas no suporte antes circular onde achavam-se os máximos, agora sobressaem dois máximos isolados na direção normal à orientação média das faixas. Para ilustrar este ponto a Figura 1.1 mostra a evolução do fator de estrutura ao diminuir a temperatura logo que a transição acontece [17].

A possibilidade de existência de uma fase com ordem posicional de longo alcance em tais sistemas bidimensionais tem sido estudada e em geral é aceito que esse tipo de ordem é proibida em duas dimensões. No entanto a ordem posicional de quase longo alcance (correlações posicionais que decaem como leis de potencia) não é proibida. De fato tem sistemas onde ainda hoje a comunidade científica discute se as observações experimentais são resultado da presença de uma fase esmética (ordem posicional de quase longo alcance) ou de uma fase nemática.

Nos últimos anos têm crescido o interesse no estudo da fase nemática [18], devido ao fato de que estados com esse tipo de simetria têm sido observados em sistemas de elétrons fortemente correlacionados [3] tais como sistemas Hall quântico, compostos rutenados, cupratos e supercondutores de alta temperatura [19]. Se a fase nemática é determinante para descrever as propriedades de transporte exóticas de tais materiais é ainda uma pergunta em aberto. No entanto, há uma quantidade crescente de dados experimentais sugerindo que a física da fase nemática pode estar intimamente relacionada com o comportamento de não líquido de Fermi em estados metálicos anisotrópicos.

Evidencia clara de uma fase nemática eletrônica aparece em sistemas eletrônicos bidimensionais de alta mobilidade em hétero-estruturas de GaAs/GaAlAs a temperaturas extremamente baixas e campos magnéticos moderados [20, 21]. Assim mesmo, para campos magnéticos altos a fase de efeito Hall quântico fraccionário domina a física do primeiro nível de Landau, a fase nemática aparece quando o nível de Fermi se encontra aproximadamente à metade entre o terceiro nível de Landau e níveis superiores. A assinatura mais evidente do efeito Hall quântico fraccionário nemático é a forte dependência na temperatura das propriedades de transporte anisotrópicas.

Em um contexto completamente diferente, domínios de faixas com ordem ferromagnético são observadas em filmes magnéticos finos com anisotropia perpendicular [2, 22, 23, 24]. Por exemplo, em monocamadas de ferro sobre um substrato de cobre, se observa uma dependência complexa com a temperatura do padrão de faixas da magnetização o qual apresenta um grande número de defeitos topológicos. A ordem nemática nestes sistemas foi proposta ao analisar modelos de ferromagnetos frustrados, analiticamente [25, 26] assim como também via simulações Monte Carlo [17, 27].

Esses fatos entre outros nos motivaram a estudar alguns dos aspectos menos entendidos das propriedades das fases moduladas em sistemas com interações competitivas. Assim no segundo capítulo desta tese é apresentado um estudo completo de dois modelos “*coarse-grain*” formadores de faixas muito conhecidos. Tais modelos vêm definidos pela forma específica do espectro de flutuações, o qual determina a existência e o tipo de transição, pelo menos a nível de campo médio. É definida uma forma funcional para a energia livre, apropriada na análise de baixas temperaturas de magnitudes como os perfis de magnetização e o comprimento de modulação. Além disto, foi possível a construção do diagrama de fases em todo o intervalo de temperaturas. Mostramos resultados na aproximação de campo médio e ainda quando pequenas flutuações são incluídas. A implementação numérica eficiente das soluções permitiu o cálculo das magnitudes de interesse com grande precisão.

O tercer capítulo mostra que o nível mínimo de aproximação para a obtenção e estudo da transição isotrópica-nemática em sistemas com interações competitivas é a chamada *self-consistent screening approximation* (SCSA). Neste capítulo consideramos o modelo de Brazovskii em duas dimensões e calculamos a função de correlação na SCSA, que consiste num tratamento perturbativo a dois laços numa expansão em diagramas de Feynman das magnitudes de interesse. Isto permite o cálculo da função de correlação auto-consistentemente. Mostramos que há uma temperatura crítica na qual o sistema espontaneamente quebra a simetria rotacional, o que justamente sinaliza a transição isotrópica-nemática. Na literatura conhecida esta é a primeira vez que consegue-se estudar a transição nemática partindo de um Hamiltoniano microscópico. Outros enfoques prévios [25, 26, 28], embora exitosos do ponto de vista físico, partem usualmente de um Hamiltoniano efetivo com a simetria já quebrada. Desta forma fica claro quais são os ingredientes mínimos de um modelo microscópico para se obter a transição isotrópica-nemática.

No quarto capítulo desta tese estudamos primeiramente a ordem posicional em sistemas com interações competitivas. Mostramos mediante a aproximação elástica e levando em conta a forma exata do espectro de flutuações que para nenhum par de interações em competência o sistema se ordena posicionalmente, ou seja, não existe ordem posicional de longo alcance nem de quase longo alcance no limite termodinâmico. Até onde nos conhecemos, essa análise só tinha sido feita substituindo a interação repulsiva original por uma interação efetiva de curto alcance, o que trazia dúvidas sobre a validade dos resultados obtidos. Logo depois estudamos que tipos de interações dão lugar a uma fase nemática estável no limite termodinâmico. Neste sentido o quarto capítulo corrige os resultados do capítulo três, onde se estuda a transição nemática num modelo genérico com competição. Para isso desenvolveu-se uma técnica de cálculo que permite a inclusão explícita dos defeitos topológicos de mais baixa energia e seus efeitos, no processo de fusão da ordem orientacional nos sistemas de faixas. Como consequência mostramos que é possível mapear o modelo original

num modelo XY generalizado. Como veremos esse mapeamento por sua vez possibilitou a caracterização das propriedades críticas da transição isotrópica-nemática, incluindo a determinação dos expoentes críticos.

Uma das características da teoria desenvolvida no capítulo quatro, para a fusão orientacional de sistemas de faixas, é permitir de forma natural a inclusão de flutuações quânticas no sistema. Tais flutuações são de considerável importância em sistemas de baixa dimensionalidade e em regimes de “baixa” temperatura. O papel dos efeitos quânticos nestas condições é ineludível e desta forma, o quinto capítulo da presente tese é dedicado ao estudo das propriedades topológicas dos sistemas quânticos de faixas. A teoria desenvolvida novamente mostrou que é possível mapear o problema original, no estudo da fase ordenada de um sistema de rotores (quânticos), com interações de curto ou longo alcance dependendo do caso. Como consequência obtiveram-se os diagramas de fase qualitativos da fase nemática para cada tipo de sistema. As principais características das transições quânticas são discutidas no texto, em particular discute-se a determinação dos expoentes críticos de tais transições. A continuação foi estudada a estabilidade da fase com ordem posicional de longo alcance (esmética) nestes sistemas. Como resultado, em concordância com a literatura, concluímos que a zero temperatura a fase esmética é estável e portanto, como mínimo num regime de flutuações quânticas fracas o sistema se encontra nesta fase. Por outro lado, no limite de flutuações quânticas fortes a ordem posicional é perdida, desta forma é natural assumir que acontece uma transição da fase esmética à fase posicionalmente desordenada, para valores intermediários do parâmetro que caracteriza a intensidade das flutuações quânticas. Com o objetivo de caracterizar tal transição de fases foi construída, após uma análise das teorias elásticas conhecidas, uma ação efetiva para a descrição da transição de fases no sistema. A conclusão obtida foi que esta transição é uma transição quântica de segunda ordem, para a qual usando as técnicas do grupo de renormalização perturbativo, foram calculados expoentes críticos não triviais.

Finalmente, forma parte de esta tese o capítulo de conclusões e perspectivas, no qual se resumem os principais resultados de cada capítulo e se coloca em contexto o nosso trabalho na literatura atual. Além disso, se apresenta uma lista das publicações científicas do autor da tese, assim como o seu currículo atualizado.

Capítulo 2

Estudo comparativo de modelos formadores de faixas

Neste capítulo faremos um estudo comparativo de dois modelos bem conhecidos. Ambos podem ser pensados como limites contínuos de modelos microscópicos. O primeiro tem sido usado para descrever filmes magnéticos finos com forte anisotropia perpendicular e o segundo para estudar a instabilidade de convectiva de Rayleigh-Bénar. Regularmente se assume na literatura que ambos modelos apresentam essencialmente o mesmo comportamento crítico. Ao invés disso, mostraremos que exceto algumas características óbvias em comum, os dois modelos apresentam diagramas de fase muito diferentes e comportamentos diferenciados em quantidades como o comprimento de modulação. Ao agregar flutuações aos resultados de campo médio mostramos que a natureza da transição de fase muda e o comportamento de magnitudes-chaves, como a magnetização, variam drasticamente.

Uma característica importante de sistemas formadores de faixas com interações de longo alcance é a dependência com a temperatura do comprimento de modulação e a largura da parede de domínio. Nós calculamos a dependência com a temperatura do comprimento de modulação, verificamos a bem conhecida dependência quadrática perto da temperatura de transição e mostramos que os nossos resultados se comparam muito bem com dados experimentais recentes até a região de baixas temperaturas.

Finalmente, motivados por trabalhos recentes numa hipótese de escala para sistemas com fases moduladas, calculamos uma função de resposta, a compressibilidade das faixas, e mostramos que ela apresenta um comportamento anômalo para baixas temperaturas. Esses resultados são coerentes com as previsões da teoria de escala, para sistemas com interações competitivas tipo leis de potência. Interessantemente, a forma

geral proposta pela teoria de escala parece funcionar também no caso de um modelo que não apresenta interações de longo alcance, o nosso modelo 2, definido mais adiante. Isso sugere um maior rango de aplicabilidade da relação de escala proposta para sistemas formadores de faixas.

2.1 Aproximação de campo médio incluindo flutuações

Vamos estudar um modelo genérico em duas dimensões definido pela energia livre “*coarse-grained*”:

$$\mathcal{H}[\phi] = \frac{\gamma}{2a^2} \int d^2\vec{x} \left(\vec{\nabla}\phi \right)^2 + \frac{1}{2\delta a^2} \int d^2\vec{x} \int d^2\vec{x}' \phi(\vec{x}) J(\vec{x} - \vec{x}') \phi(\vec{x}') + \frac{1}{2\beta a^2} \int d^2\vec{x} \mathcal{S} \left(\frac{\phi(x)}{\phi_0} \right), \quad (2.1)$$

onde a função $\mathcal{S}(x) = (1+x) \ln(1+x) + (1-x) \ln(1-x) - 2 \ln 2$. Além disso, a representa o espaçamento da rede, $\beta = 1/k_B T$ é o inverso da temperatura multiplicada pela constante de Boltzmann, γ e δ são constantes fenomenológicas e ϕ_0 é o valor de saturação do parâmetro de ordem.

O primeiro termo favorece a configuração homogênea do parâmetro de ordem ϕ e o segundo termo representa a interação repulsiva. Que dependendo da forma de $J(\vec{x})$ pode-se considerar de curto ou longo alcance. Ambos os termos podem ser considerados como o limite contínuo de interações microscópicas, como por exemplo a interação de troca e a dipolar nos filmes magnéticos finos [13] ou a separação da carga devido a repulsão coulombiana em sistemas eletrônicos de baixa dimensionalidade [4]. O terceiro termo corresponde à entropia de campo médio. Este Hamiltoniano efetivo pode ser formalmente obtido via uma transformação de Hubbard-Stratonovich [29] seguida de um processo de mediação microscópica (“*coarse-grain*”) sobre um modelo de Ising com interações de curto e longo alcance (representada pelo termo não local). Um outro procedimento comum assume uma expansão para o termo da entropia ao redor de $\phi = 0$, o qual conduz ao conhecido potencial de duplo poço [29]. Nós vamos considerar neste capítulo a forma funcional exata de $\mathcal{S}(x)$ o que permite o cálculo do digrama de fases até baixas temperaturas.

Escrevendo a parte quadrática de (2.1) no espaço recíproco e normalizando o parâmetro de ordem ao seu valor de saturação temos:

$$\mathcal{H}[\phi] = \frac{\phi_0^2}{2a^2} \int d^2\vec{k} A(\vec{k}) \phi_{\vec{k}} \phi_{-\vec{k}} + \frac{1}{2\beta a^2} \int d^2\vec{x} \mathcal{S}(x), \quad (2.2)$$

onde o espectro de flutuações vêm dado por:

$$A(\vec{k}) = \gamma k^2 + \frac{1}{2\delta} J(\vec{k}). \quad (2.3)$$

Neste trabalho consideramos sistemas nos quais o espectro de flutuações tem um único mínimo isotrópico num vetor de onda não nulo k_0 . Se $A(k_0) < 0$ o sistema desenvolve estruturas moduladas. Mediante algumas transformações adicionais é possível expressar o Hamiltoniano efetivo na forma adimensional:

$$\frac{\mathcal{H}[\phi]}{E_0} = \int d^2\vec{k} \hat{A}(k) \phi_{\vec{k}} \phi_{-\vec{k}} + \frac{1}{\hat{\beta}} \int d^2\vec{x} \mathcal{S}(\phi(\vec{x})), \quad (2.4)$$

onde

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\phi_0^2 |A(k_0)| k_0^2}{2a^2} \\ \hat{A}(k) &= \frac{A(kk_0)}{|A(k_0)|} \\ \hat{\beta} &= \phi_0^2 |A(k_0)| k_0^4 \beta. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Desta forma todas as magnitudes envolvidas na expressão (2.4) são adimensionais exceto a energia característica E_0 . Esta é a forma da energia livre usada na aproximação de campo médio usada neste trabalho.

As soluções de campo médio de (2.4) são dadas por:

$$\left. \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(\vec{x})} \right|_{\phi=\langle\phi\rangle} = 0. \quad (2.6)$$

As flutuações na aproximação de campo médio podem ser introduzidas considerando que $\phi = \langle\phi\rangle + \psi$ e que as novas soluções são dadas pela equação:

$$\left\langle \frac{\delta H[\langle\phi\rangle + \psi]}{\delta \langle\phi(\vec{x})\rangle} \right\rangle = 0, \quad (2.7)$$

onde a média é realizada sobre o campo de flutuações.

2.1.1 Soluções de faixas

É bem conhecido que, na ausência de campos externos as soluções que minimizam a energia livre do modelo (2.4) correspondem a modulações numa dimensão do parâmetro de ordem, ou seja, soluções de

faixas em $d=2$, as que podem ser escritas como:

$$\phi(x) = \sum_{i=0}^{\infty} m_i \sin\left(2\pi(2i+1)\frac{x}{\lambda}\right), \quad (2.8)$$

onde λ é o comprimento de modulação. Em todos os nossos cálculos o número máximo de modos considerado foi $i_{max} = 60$. Isso permitiu a caracterização completa dos perfis de modulação, como veremos nas próximas seções.

A equação de estado em campo médio (2.6) é no nosso caso:

$$\phi(x) = \tanh\left[-\hat{\beta} \int \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \hat{A}(k) \phi_{\vec{k}}\right]. \quad (2.9)$$

Para obter a solução a uma temperatura dada, as equações (2.8) e (2.9) se resolvem para um λ dado. Logo, a energia livre é minimizada respeito de λ para obter a solução final.

2.1.2 Soluções de faixas incluindo flutuações

Até segunda ordem nas flutuações, a equação (2.7) é dada por:

$$\frac{\delta H[\langle\phi\rangle]}{\delta\langle\phi(\vec{x})\rangle} - \frac{1}{\hat{\beta}} \frac{2\langle\psi^2\rangle(\vec{x})\langle\phi\rangle(\vec{x})}{(1-\langle\phi\rangle^2(\vec{x}))^2} = 0. \quad (2.10)$$

Para resolver esta equação a flutuação quadrática média local $\langle\psi^2\rangle(\vec{x})$ tem que ser calculada. Procedemos então da seguinte forma: vamos considerar o campo $\phi(\vec{x})$ na presença de um campo molecular desconhecido devido ao resto do sistema.

A função de partição de um sítio só no campo externo h é:

$$Z(h) = \int_{-1}^1 d\phi \exp[-\beta H_0(h, \phi)], \quad (2.11)$$

onde

$$\begin{aligned} \beta H_0(h, \phi) &= -\beta h\phi + \frac{1}{2} [(1+\phi) \ln(1+\phi) \\ &+ (1-\phi) \ln(1-\phi) - \ln 2]. \end{aligned}$$

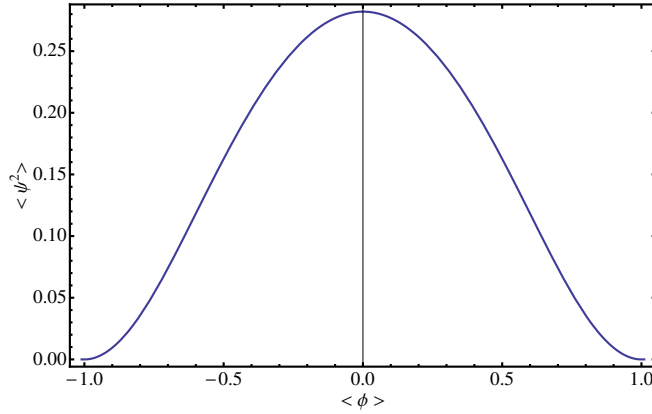


Figura 2.1: Relação local entre a amplitude das flutuações e o valor médio do parâmetro de ordem.

Então,

$$\begin{aligned}
 \langle \phi \rangle(h) &= \frac{1}{Z(h)} \int_{-1}^1 d\phi \phi \exp(-\beta H_0(h, \phi)) \\
 \langle \phi^2 \rangle(h) &= \frac{1}{Z(h)} \int_{-1}^1 d\phi \phi^2 \exp(-\beta H_0(h, \phi)) \\
 \langle \psi^2 \rangle(h) &= \langle \phi^2 \rangle(h) - (\langle \phi \rangle(h))^2.
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

É claro que o valor do campo local molecular h continua desconhecido. Numericamente, nós podemos considerá-lo como um parâmetro livre e determinar parametricamente a relação não trivial entre a média quadrática das flutuações $\langle \psi^2 \rangle(\phi)$ e o valor médio local do parâmetro de ordem. A relação paramétrica do sistema (2.12) é mostrada na Fig.2.1. É importante notar que, como resultado da dependência com a temperatura do potencial usado, a relação entre $\langle \psi^2 \rangle$ e $\langle \phi \rangle$ é independente da temperatura.

A equação de estado incluindo o campo de flutuações se escreve então:

$$\phi(x) = \tanh \left[-\hat{\beta} \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{A}(k) \phi_{\vec{k}} + \frac{2\psi^2(\phi(x))\phi(x)}{(1 - \phi^2(x))^2} \right]. \tag{2.13}$$

Neste nível de aproximação o efeito das flutuações é agregar um novo termo no campo efetivo, o qual tende a elevar o perfil do parâmetro de ordem na região que corresponde às paredes de domínio. Isso significa que quando o efeito das flutuações estão presentes os perfis devem ser mais abruptos e correspondentemente as paredes de domínios ser mais finas.

No que segue vamos aplicar o método descrito anteriormente para resolver as equações(2.9) e (2.13) para dois modelos bem conhecidos que apresentam fases de faixas.

2.2 Diagramas de fase

Vamos focar nosso estudo em sistemas que apresentam interações isotrópicas, o que significa $\hat{A}(\vec{k}) = \hat{A}(k)$. Devido a nossa seleção de variáveis adimensionais, o mínimo do espectro de flutuações é alcançado em $k = 1$ e assim $\hat{A}(1) = -1$. Os modelos estudados são definidos por expressões particulares para o espectro de flutuações. O primeiro modelo considerado (modelo 1) é definido por [12, 16, 30]:

$$\hat{A}(k) = -1 + a(k - 1)^2, \quad (2.14)$$

e o segundo (modelo 2) por [31]:

$$\hat{A}(k) = -1 + a(k^2 - 1)^2. \quad (2.15)$$

O modelo 1 apresenta uma dependência linear em $|\vec{k}|$ para valores pequenos de \vec{k} , ou seja é não analítico. É um modelo bom na descrição de filmes finos ferromagnéticos com forte anisotropia perpendicular, nos quais a interação ferromagnética de troca compete com a interação dipolar de longo alcance [32]. O modelo 2 é conhecido como modelo de Swift-Hohenberg, e foi introduzido para descrever a física na instabilidade convectiva [31, 33]. Alternativamente, ele representa o limite contínuo de um sistema com interações atrativas a primeiros vizinhos e repulsiva a segundos vizinhos [34, 35]. Embora que os dois modelos sejam similares por ter um mínimo num vetor de onda não nulo no espaço recíproco, ambos mostram importantes diferenças, as quais são mostradas a continuação. *

Até onde nós temos conhecimento uma comparação detalhada de modelos de este tipo não tem sido feita até agora e isso leva frequentemente a conclusões erradas sobre os seus comportamento.

2.2.1 Modelo 1

A figura 2.2 mostra o comportamento do diagrama de fases para o modelo 1. O parâmetro a é proporcional à curvatura do espectro de flutuações no vetor de onda do mínimo:

$$a = \frac{1}{2|A(k_0)|} \left. \frac{d^2 A(k)}{dk^2} \right|_{k=k_0}. \quad (2.16)$$

*No enfoque clássico da teoria de Landau a transição de campo médio é dominada pelo modo mais instável k_0 , o qual corresponde ao vetor de onda que minimiza o espectro de flutuações. Perto da transição $(k - k_0)$ é pequeno e é fácil ver que o modelo 2 se reduz ao modelo 1. Então a transição em campo médio da essencialmente os mesmos resultados em ambos modelos. No entanto, assim que a temperatura é reduzida abaixo da temperatura de transição, outros modos entram em cena e novos fenômenos acontecem, como por exemplo a dependência do comprimento de modulação com a temperatura.

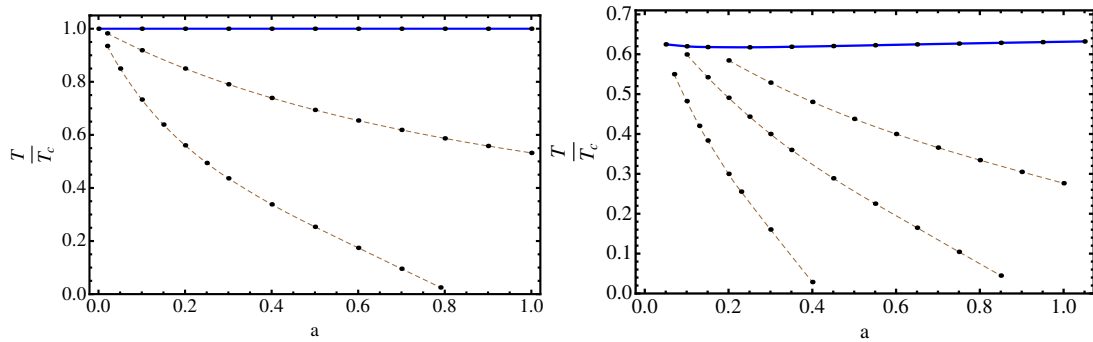


Figura 2.2: Diagramas de fase para o modelo 1. As linhas pontilhadas representam curvas de igual comprimento de modulação (λ). Os pontos representam os resultados da solução numérica. Esquerda: Diagrama de fase em campo médio. A linha superior contínua corresponde a uma transição contínua entre a fase modulada e a fase desordenada. Direita: Diagrama de fase incluindo flutuações. A linha superior contínua corresponde a uma transição descontínua entre a fase modulada e a fase desordenada.

Note que, devido a nossa eleição das variáveis adimensionais, a dependência com a temperatura já esta incluída em $\hat{\beta}$, definida como o inverso de T/T_c . Esta é a causa de que a linha crítica seja horizontal (Figura 2.2, esquerda). Esta linha define uma transição de segunda ordem entre fase modulada de baixa temperatura e fase desordenada de alta temperatura.

As linhas pontilhadas representam linhas de iguais comprimentos de modulação λ . De fato, para a fixo o comprimento de modulação diminui monotonamente conforme a temperatura aumenta até T_c , assim curvas mais próximas à linha crítica correspondem a valores menores de λ . A dependência completa do comprimento de modulação se mostra na Figura 2.3 (pontos), a qual mostra uma variação contínua com a temperatura e como o valor assintótico do comprimento de modulação corresponde ao mínimo do espectro de flutuações.

O diagrama de fases do modelo 1 incluindo flutuações se mostra na Figura 2.2 (direita). A simples vista ele é similar ao do campo médio. A temperatura crítica diminui, como se espera quando flutuações são inclusas. A diferença principal quando as flutuações são levadas em conta é que a transição é descontínua, isso quer dizer que as flutuações mudam a natureza da transição. Neste caso, a linha crítica foi construída com as temperaturas onde a diferença entre as energias livres da solução desordenada e a modulada, troca de sinal. Isso caracteriza uma transição de primeira ordem induzida por flutuações.

O comportamento das linhas de comprimento de modulação constante é diferente daquelas do campo médio. Na Figura 2.2 à esquerda todas as linhas de λ constante se aproximam do valor limite $\lambda = 1$ em T_c , o valor que corresponde ao mínimo do espectro de flutuações $A(k)$, como pode ser visto na Figura 2.3 (esquerda, pontos superiores). Quando as flutuações são incluídas a linha de transição não é mais uma linha

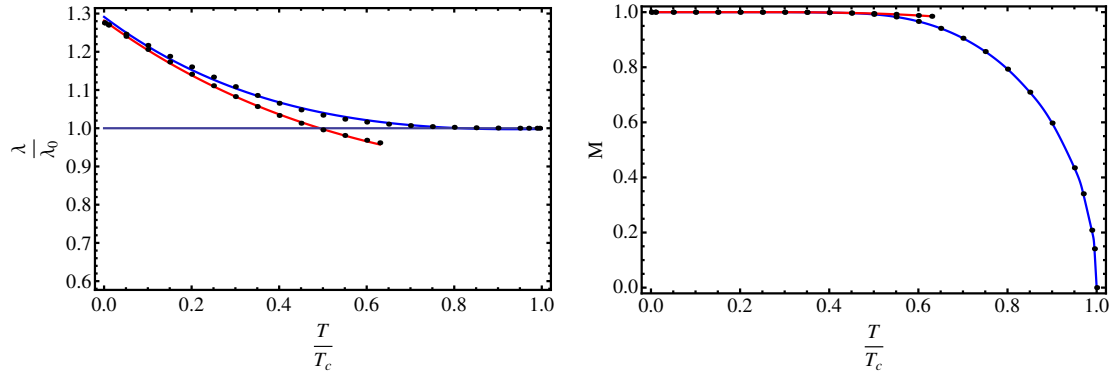


Figura 2.3: Esquerda: Dependência com a temperatura do comprimento de modulação (λ) do modelo 1 para $a = 1$, normalizado ao valor correspondente ao mínimo do espectro, λ_0 . Pontos inferiores e superiores correspondem aos resultados com e sem flutuações incluídas, respectivamente. As curvas contínuas representam o melhor ajuste dos resultados numéricos pela funcionalidade proposta (2.17). A curva inferior é interrompida produto da transição à fase desordenada. Direita: Dependência com a temperatura da amplitude de modulação (M) para o modelo 1 com $a = 1$. A linha inferior contínua corresponde à solução de campo médio e a superior ao caso com flutuações incluídas. Os pontos representam os resultados da solução numérica.

de comprimento de modulação constante (Figura 2.2, direita). Nesse caso o comprimento de modulação é uma função decrescente de a sobre a linha.

É sabido que o comprimento de modulação cresce quadraticamente com a temperatura perto da transição [16, 36], no entanto o comportamento de baixa temperatura de λ é menos conhecido. Baseado em análises de escala de outros autores, Mentis et al. [37] propuseram um ajuste numérico para os seus dados de sistemas de faixas em filmes de Pd/W(110). A funcionalidade proposta, que leva em conta efeitos das flutuações sobre a energia interna da interface e sobre a largura da parede de domínio é a seguinte:

$$\lambda(T) = \lambda_0 + a(1 - bT) \exp(-cT). \quad (2.17)$$

Na Figura 2.3 à esquerda mostramos os resultados obtidos diretamente da nossa solução numérica (pontos) conjuntamente com o melhor ajuste da equação (2.17) (linha sólida) nas duas aproximações, campo médio e campo médio mais flutuações, mostrando que a expressão (2.17) motivada fisicamente é compatível com os nossos dados numéricos.

Na figura 2.3 à direita se mostra o comportamento da amplitude da solução modulada. A temperatura no eixo horizontal é escalada à temperatura crítica da solução de campo médio. Um fato notável é que a transição de primeira ordem induzida por flutuações é muito forte. Note que a amplitude se mantém em altos

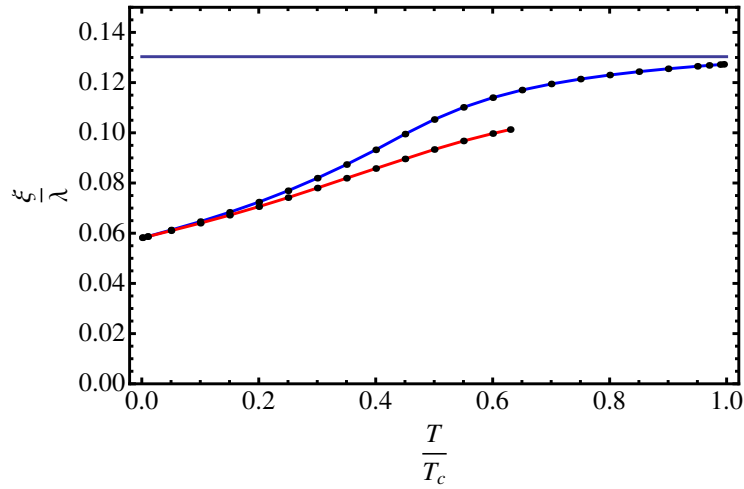


Figura 2.4: Dependência com a temperatura da largura da parede de domínio (ξ) normalizada com o comprimento de modulação (λ) para o modelo 1 com $a = 1$. O limite desta magnitude para uma função seno perfeito (modo único) é representado por uma linha horizontal. A curva contínua superior corresponde à solução de campo médio e a inferior a quando as flutuações são incluídas. Os pontos representam os resultados da solução numérica.

valores em toda a fase modulada, até que a transição tem lugar. Isso é também refletido no comportamento da largura da parede de domínio, a qual se mostra na figura 2.4.

A definição usada para a largura da parede de domínio foi

$$\xi = 2 \frac{\int_0^{\frac{\lambda}{4}} f(x)x dx}{\int_0^{\frac{\lambda}{4}} f(x) dx}. \quad (2.18)$$

Onde a função peso $f(x)$ é $f(x) = M - \phi(x)$, e M corresponde ao máximo valor do perfil de $\phi(x)$. Em nossa definição de $\phi(x)$ fixamos a fase da modulação, tomando $\phi(0) = 0$ e $\phi(x)$ positiva no intervalo $(0, \lambda)$. Por exemplo, para um perfil senoidal, a largura da parede de domínio seria:

$$\frac{\xi}{\lambda} = \frac{\int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - \sin(\theta))\theta d\theta}{\pi \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - \sin(\theta))d\theta} \approx 0.1303. \quad (2.19)$$

Esse valor pode-se considerar uma cota superior para a largura da parede de domínio, correspondente à aproximação de modo único. Nas figuras 2.4 e 2.7 este valor foi indicado com uma linha horizontal. Desta forma podemos ter uma ideia de quanto os perfis são similares a uma função seno quando a transição acontece.

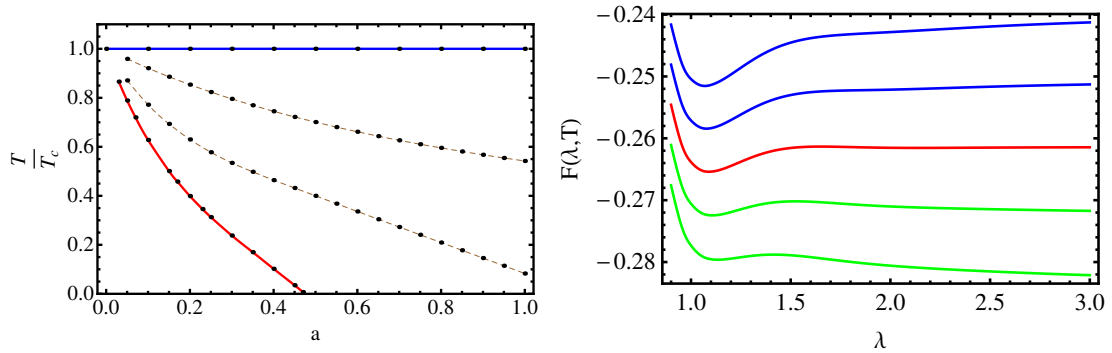


Figura 2.5: Esquerda: Diagrama de campo médio para o modelo 2. As linhas pontilhadas representam curvas de iguais comprimentos de modulação (λ). A linha contínua superior corresponde a uma transição de segunda ordem entre uma fase modulada e outra desordenada. A linha inferior contínua define uma transição entre a fase modulada e a fase uniforme. Os pontos representam os resultados numéricos. Direita: Energia livre do modelo 2 como função do comprimento de modulação para diferentes temperaturas. As duas curvas mais acima mostram um único mínimo para λ levemente menor do que 1 (fase modulada). Nas duas curvas inferiores um segundo mínimo à direita da figura aparece, sinalizando uma transição descontínua a um estado uniforme.

2.2.2 Modelo 2

O diagrama de fase de campo médio para o modelo 2 se mostra na Figura 2.5 à esquerda. Uma diferença importante com respeito ao diagrama correspondente ao modelo 1 é a presença de uma fase uniforme para T e a pequenas. Este diagrama possui alguma similaridade com diagramas de fase de modelos anisotrópicos com interações competitivas de curto alcance, como o modelo ANNNI [38]. No entanto, diferentemente do modelo ANNNI, no nosso caso não existe uma transição direta da fase uniforme à fase desordenada, pelo menos até valores muito pequenos do a , onde a precisão do nosso algoritmo falha. O que se observa é uma sequência de duas transições com o aumento da temperatura. A linha de transição da fase modulada à fase uniforme define uma transição descontínua onde o comprimento de modulação diverge, como pode-se observar na figura 2.5 à direita. Note que na região de modulações a energia livre mostra um único mínimo num comprimento de modulação λ finito, mas conforme a temperatura diminui um segundo mínimo afastado à direita aparece. Numericamente, este mínimo é compatível com um valor infinito de λ , típico de uma solução homogênea.

A figura 2.6 à esquerda mostra que o diagrama de fases do modelo 2 quando flutuações à solução de campo médio são incluídas. Como no caso do modelo 1, um primeiro efeito das flutuações é deprimir a linha de transição entre a fase modulada e a desordenada.

As curvas de λ constante (linhas pontilhadas) para o modelo 2 na aproximação de campo médio são mostradas na Figura 2.5 (esquerda). Elas se aproximam suavemente à linha crítica como no modelo 1, de

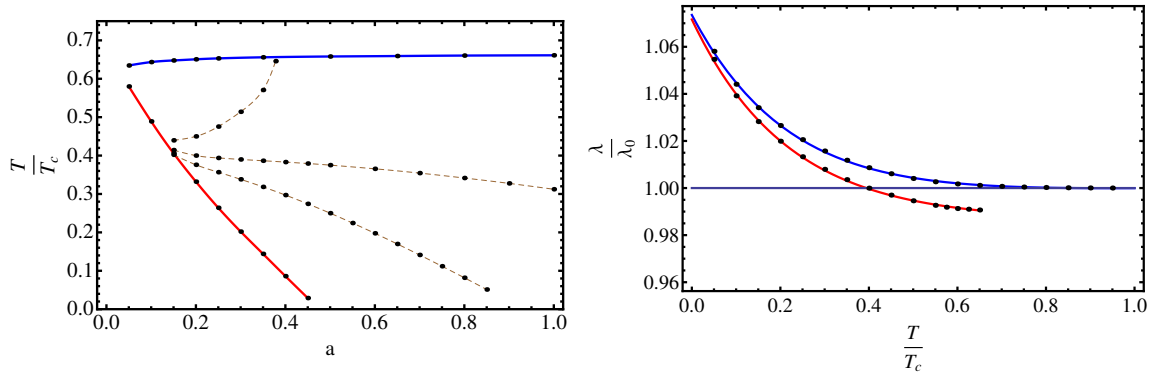


Figura 2.6: Esquerda: Diagrama de fases para o modelo 2 incluindo flutuações. As linhas pontilhadas representam curvas de iguais comprimentos de modulação (λ). A linha superior corresponde a uma transição de primeira ordem a uma fase desordenada. Abaixo da linha contínua inferior a fase homogênea tem menor energia livre que a fase modulada. Note que a nova forma das curvas com λ constante implicam um comprimento de modulação crescente com a na transição. Os pontos representam os resultados da solução numérica. Direita: Dependência do comprimento de modulação (λ) com a temperatura para o modelo 2 com $a = 0.5$. Os pontos superiores e inferiores correspondem aos resultados sem e com flutuações respectivamente. As curvas contínuas representam o melhor ajuste dos resultados pela funcionalidade proposta (2.17). A linha inferior é interrompida a causa da transição à fase desordenada.

tal forma que curvas superiores correspondem a valores menores de λ . O comprimento de modulação na transição é independente de a e se corresponde com o valor do mínimo do espectro de flutuações. Por outro lado quando as flutuações são incluídas a forma das linhas de igual λ mudam, como mostra a Figura 2.6 à direita. Embora curvas superiores se correspondam com valores menores do comprimento de modulação, neste caso o comprimento de modulação sobre a linha de transição é uma função crescente de a , diferentemente do modelo 1 onde λ na transição é uma função decrescente do parâmetro a .

Na Figura 2.6 (direita) é mostrado o comportamento do comprimento de modulação com a temperatura do modelo 2. Note que neste caso os valores de λ se mantém bem próximos de λ_0 , o valor na transição. O que significa que neste modelo o comprimento de modulação tem uma dependência fraca na temperatura. Isso é uma diferença importante com o modelo 1. No entanto, como se mostra pelas linhas sólidas na mesma figura, o ajuste com a expressão (2.17) ainda funciona muito bem.

O comportamento da largura da parede de domínio para o modelo 2 se mostra na figura 2.7. Comparando com a figura 2.4 para o modelo 1, observamos que neste modelo os perfis são sempre muito parecidos com uma função seno, ainda a temperaturas baixas. Além disso, as flutuações parecem não ter importância para o comportamento da largura da parede de domínio, a diferença com modelo 1. Por outro lado a amplitude da modulação se comporta similarmente à do modelo 1 com flutuações incluídas, ficando no valor de saturação praticamente até que a temperatura de transição é alcançada. O fato de que no modelo 2 os perfis

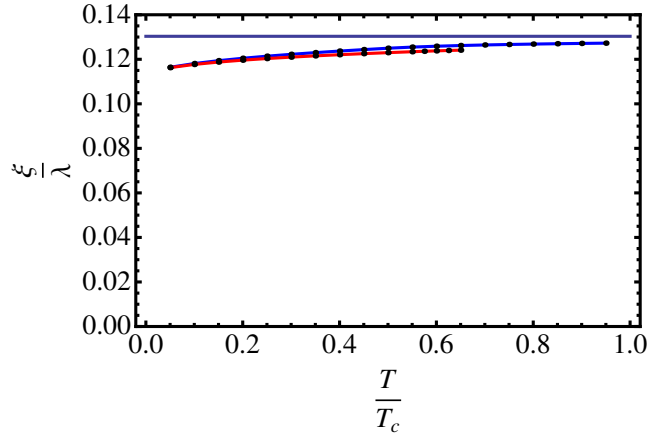


Figura 2.7: Dependência com a temperatura da largura da parede de domínio (ξ) normalizada ao comprimento de modulação (λ) para $a = 0.5$ no modelo 2. O valor limite desta magnitude para perfil senoidal perfeito é representado por uma linha horizontal. A curva superior corresponde à solução de campo médio e a inferior à solução com flutuações incluídas. Os pontos representam os resultados da solução numérica.

se mantenham muito perto do modo único pode ser entendido devido à presença da contribuição quártica no espectro de flutuações o qual implica que a energia requerida para excitar harmônicos superiores a baixas temperaturas é maior que no caso quadrático do modelo 1.

2.3 Comportamento anômalo da compressibilidade das faixas

Uma medida da compressibilidade do sistema de faixas pode ser obtida através do módulo de compressão ou módulo de Young $B(T)$. Esta magnitude está relacionada com o custo energético do desvio do comprimento de modulação de equilíbrio ($\lambda(T)$) e define-se como [32]:

$$B(T) = \lambda(T)^2 \left. \frac{\partial^2 F(\lambda, T)}{\partial \lambda^2} \right|_{\lambda(T)}. \quad (2.20)$$

Assim calculamos o módulo de compressão diretamente da energia livre $F(\lambda, T)$. Recentemente Portmann et al. [32] propuseram relações de escala para sistemas com fases moduladas. Uma relação para o módulo de compressibilidade foi obtida em termos do comprimento de modulação de equilíbrio ($\lambda(T)$) e da amplitude de modulação ($M(T)$):

$$B = c M(T)^2 \lambda(T)^\Delta, \quad (2.21)$$

onde c é uma constante e Δ é um expoente relacionado com as dimensões do sistema e a natureza microscópica das interações. Uma das predições das relações de escala proposta é o comportamento anômalo do

módulo de Young quando o expoente Δ é negativo. Este é o caso, por exemplo, do ferromagneto dipolar frustrado em duas dimensões que tem uma energia livre tipo a do modelo 1 deste trabalho. Interessantemente, Portmann e colaboradores encontram o mesmo tipo de relação de escala para o comportamento do campo magnético crítico como função do comprimento de modulação [32]. Isto implica uma reentrância ou transição inversa no diagrama campo externo contra temperatura para baixas temperaturas para todos os sistemas com um valor negativo do Δ . Esse resultado interessante é verificado por experimentos em filmes ultrafinos de Fe/Cu(001) do mesmo grupo [39], e foi reportado em um modelo Ginzburg-Landau para o mesmo sistema [16].

Na Figura 2.8 se mostram os resultados do cálculo direto do módulo de compressibilidade (curvas contínuas) para os modelos 1 e 2 via equação (2.20). O comportamento típico de $B(T)$ em um sistema é uma função monótona decrescente da temperatura, um aumento da temperatura conduz a ligações mais fracas entre as partículas e como resultado a uma resposta elástica mais fraca. No entanto, nós apreciamos na Figura 2.8 um regime para temperaturas baixas o suficiente onde o módulo de compressibilidade é uma função crescente da temperatura. Além disso, a inclusão de flutuações em ambos os modelos não destrói esse comportamento mas fortalece a anomalia ainda mais, o que sugere uma física robusta por trás dos cálculos numéricos. Vale a pena mencionar que para temperaturas muito baixas as paredes de domínio no modelo 1 são muito abruptas e isso resulta numa instabilidade numérica que se observa na Figura 2.8 à esquerda (modelo 1).

Também testamos a relação de escala proposta ajustando nossos resultados analíticos com a expressão (2.21). Os resultados se mostram com pontos na Figura 2.8. Em todos os casos a relação de escala ajusta muito bem os resultados numéricos. Como parte da comprovação numérica permitimos ao expoente quadrático de $M(T)$ inicialmente fixo variar. Os resultados para este expoente assim como para Δ no modelo 1 foram similares daqueles preditos em [32] para o ferromagneto dipolar frustrado em duas dimensões. Por outro lado, no modelo 2 se encontraram importantes desvios. No entanto, neste caso desvios dos expoentes eram esperados porque, estritamente falando, o modelo 2 não se corresponde com aquela classe de modelos estudados por Portmann e colaboradores.

É interessante que as relações de escala achadas parecem ser válidas para uma classe mais ampla de modelos. Trabalhos futuros deveriam abordar a extensão das relações de escala a uma classe maior de interações microscópicas assim como a origem do comportamento anômalo do módulo de Young em sistemas formadores de faixas.

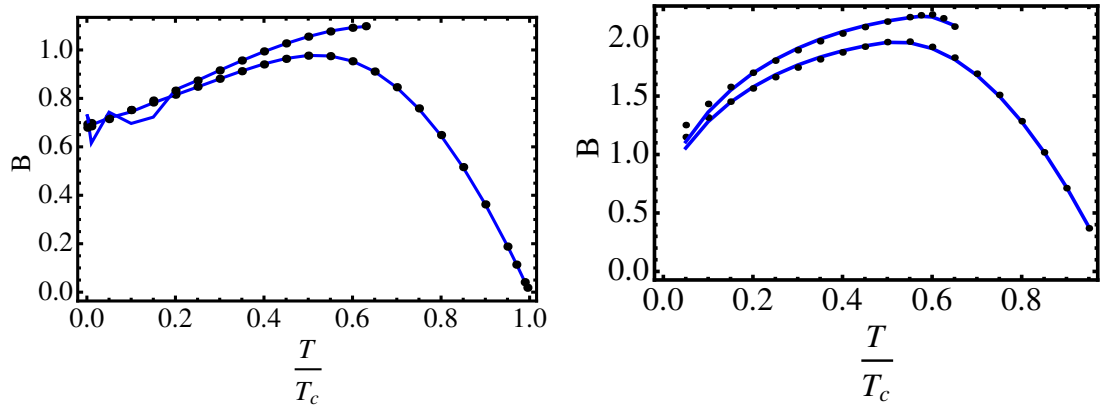


Figura 2.8: As curvas contínuas correspondem ao módulo de Young calculado numericamente. Os pontos representam o melhor ajuste usando a relação de escala. As curvas inferiores correspondem à aproximação de campo médio e as superiores ao caso com flutuações incluídas. Esquerda: Modelo 1. Direita: Modelo 2.

2.4 Conclusões

Neste capítulo apresentamos vários resultados novos referidos a dois modelos bem conhecidos de sistemas formadores de faixas em duas dimensões [40]. Os modelos podem ser pensados como o limite contínuo de alguns modelos microscópicos com interações isotrópicas competitivas, ou alternativamente, eles podem ser definidos diretamente através da forma do seu fator de estrutura de alta temperatura. Uma característica comum de ambos modelos é que o fator de estrutura tem o seu máximo num anel no espaço recíproco, o que tem importantes consequências no comportamento de baixas temperaturas. No entanto, contrário ao que é usualmente assumido na literatura, diferenças importantes foram achadas nas suas propriedades e diagramas de fase, baseadas na forma específica do fator de estrutura de alta temperatura. O modelo 1 é uma boa representação para k pequeno de alguns modelos com interações de longo alcance, como o ferromagneto dipolar frustrado e modelos formadores de faixas com interações elásticas com o substrato. Por outro lado, o modelo 2 pode ser obtido como um modelo efetivo para interações isotrópicas competitivas de alcance finito, o qual leva a uma expressão analítica para a dependência em k do fator de estrutura.

Calculamos o diagrama de fases completo para ambos os modelos em duas aproximações: campo médio e campo médio mais flutuações. As equações relevantes foram resolvidas numericamente. Em ambos os casos se observa que as flutuações têm um forte efeito sobre o diagrama de fases e sobre outros observáveis. Com respeito ao diagrama de fases, o principal efeito das flutuações é mudar a ordem da transição fase isotrópica-fase modulada de contínua na aproximação de campo médio a fortemente descontínua quando as flutuações são levadas em conta. Além da transição isotrópica-modulada, o modelo 2 mostra outra transição

de fase descontínua, da fase modulada a uma fase homogênea abaixo de certo valor crítico do parâmetro a , o qual caracteriza a curvatura do espectro de flutuações no mínimo.

Em ambos modelos, o comprimento de modulação λ é uma função contínua da temperatura, caracterizando modulações incomensuráveis. A dependência de λ com a temperatura é forte no modelo 1 e fraca no modelo 2. Enquanto na aproximação de campo médio o comprimento de modulação atinge o seu mínimo na transição, o qual corresponde ao vetor de onda no máximo do fator de estrutura, quando as flutuações são levadas em conta λ pode tomar valores menores que o correspondente ao máximo do fator de estrutura. Outra quantidade de interesse é a largura da parede de domínio ξ . Como no caso do comprimento de modulação, ξ tem uma dependência forte com a temperatura no modelo 1. É importante destacar que ξ é menor quando as flutuações são incluídas, em concordância com a forte transição observada neste caso, onde a amplitude da modulação se mantém muito perto do valor de saturação.

Finalmente mostramos resultados para o módulo de compressibilidade $B(T)$. Essa quantidade mostra um comportamento anômalo quando comparado com sistemas normais ao ter um máximo em temperaturas intermediárias. A anomalia foi predita por uma hipótese de escala para sistemas modulados, a qual foi obtida para uma classe específica de modelos com interações de longo alcance. Nós verificamos a sua validade para os modelo 1 e 2. Interessantemente, ainda que o modelo 2 não pertença à classe de modelos para a qual a hipótese de escala foi predita, ele mostra o mesmo comportamento dado pela lei de escala, com um expoente particular. O expoente da lei de escala para o modelo 1 corresponde numa boa aproximação ao valor predito para um modelo com uma interação dipolar repulsiva.

Resumindo, nós calculamos algumas quantidades relevantes para modelos com fases moduladas em duas dimensões, complementando resultados prévios e aclarando algumas diferenças entre dois modelos que usualmente na literatura se assumem equivalentes. Nos mostramos que além das similaridades óbvias, ambos modelos tem importantes diferenças. Um resultado interessante é a evidência de comportamentos anômalos numa função de resposta em ambos modelos considerados, em concordância com resultados recentes em modelos relacionados e em experimentos em filmes magnéticos ultrafinos. Trabalhos futuros irão estudar os mecanismos que originam esse comportamento anômalo e sua presença em outros sistemas. Finalmente, a implementação da solução numérica dos modelos “*coarse-grained*” definidos neste trabalho permitiram acessar um amplo intervalo de temperaturas, complementando resultados conhecidos, usualmente limitados a temperaturas perto da temperatura de transição.

Capítulo 3

Fase nemática na *Self Consistent Screening Approximation*

Na descrição usada até agora das fases moduladas (faixas) pareceria que estas fases são semelhantes a fases cristalinas, com ordem orientacional. Essa visão é resultado do enfoque de campo médio usado anteriormente. Note que ainda ao considerar flutuações no capítulo 2 se assume que elas não são fortes o suficiente para mudar as simetrias básicas de um sistema de faixas perfeitas. Na natureza a situação pode ser diferente, em especial em duas dimensões onde é sabido que as flutuações são fortes. Neste sentido os resultados do capítulo anterior deveriam se reinterpretar como valores médios locais das magnitudes estudadas, embora fica claro que a deformação dos padrões em sistemas com interações de longo alcance pode ter um papel significativo.

Normalmente, assim que a separação de fases acontece e as faixas aparecem estas se encontram num estado desordenado com um grande número de defeitos em movimento [17]. Nessas condições não há quebra das simetrias de rotação ou de posição. No entanto em casos onde as interações presentes são as apropriadas, a diminuição da temperatura e conseqüentemente da mobilidade dos defeitos leva a uma quebra da simetria de rotação. Essa quebra de simetria se percebe ao estudar o fator de estrutura do parâmetro de ordem. O que se observa neste caso é o surgimento de dois máximos num fator de estrutura que antes tinha, tipicamente, um máximo degenerado sobre uma circunferência de rádio k_0 (comprimento médio das modulações). Essa fase com a simetria rotacional quebrada e sem ordem posicional é a chamada fase nemática [17].

O estudo da fase nemática é naturalmente mais complexo que o anterior devido a que o parâmetro de ordem nemático (como se verá nas próximas seções) é quadrático nos graus de liberdade originais,

como consequência, é essencialmente governado pela física das flutuações e não pode ser estudado numa simples teoria de campo médio. As predições teóricas da fase nemática estão baseadas no estudo das interações específicas, escritas em termo do parâmetro de ordem nemático. Por exemplo, nos líquidos de Fermi, a transição isotrópica-nemática foi estudada usando diferentes técnicas como RPA[41], bosonização multi-dimensional [42, 43], e a teoria de líquidos de Landau Fermi[44, 45] em modelos específicos com interação quadripolar explícita atrativa. Por outro lado, Barci e colaboradores[28] mostraram como em sistemas isotrópicos bidimensionais, embora a fase de faixas (cristalina) não possa existir devido a que as flutuações de longo comprimento de onda divergem, a fase nemática existe e segundo seu trabalho pertence à classe de universalidade KT.

Neste capítulo consideramos o modelo de Brazovskii [12] em duas dimensões e calculamos a função de correlação na *Self Consistent Screening Approximation* (SCSA). A SCSA faz uma expansão perturbativa em diagramas de Feynmann até dois laços da função de correlação de dois pontos. Nesta aproximação se construí um sistema de equações auto-consistente, que tem como resultado uma função de correlação no espaço k renormalizada de forma k -dependente respeito da correlação do problema “livre”(Apêndice A). Como veremos, no conjunto de aproximações de este tipo esta é a que apresenta os ingredientes mínimos para a descrever a fase nemática.

Até onde nós conhecemos, este é o primeiro trabalho que partindo de um modelo efetivo para o parâmetro de ordem local e sem quebrar explicitamente a simetria rotacional no Hamiltoniano original, consegue-se chegar à solução nemática. Da mesma forma foi provado que a solução nemática apresenta menor energia livre que a solução desordenada para $T < T_c$ o que confirma a presença da transição de fase isotrópica-nemática.

3.1 Hamiltoniano do Modelo, formação das faixas e a fase nemática

Nesse capítulo adotaremos um Hamiltoniano “*coarse-grained*” escrito em termos de um campo escalar $\phi(\vec{x})$, cuja parte quadrática no espaço recíproco se escreve:

$$H_0 = \int_{\Lambda} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \phi(\vec{k}) (r_0 + A(k - k_0)^2 + \dots) \phi(-\vec{k}), \quad (3.1)$$

onde $r_0(T) \sim (T - T^*)$, $k = |\vec{k}|$ e $k_0 = |\vec{k}_0|$ é o comprimento caraterístico dado pela competição entre as interações microscópicas [11]. $\int_{\Lambda} d^2k \equiv \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_0-\Lambda}^{k_0+\Lambda} dk$ e $\Lambda \sim \sqrt{r_0/A}$ é um “*cut-off*” onde a expansão

da energia livre até ordem quadrática no vetor de onda faz sentido [12]. A “massa” $1/A$ mede a curvatura da relação de dispersão no entorno do mínimo k_0 .

O fator de estrutura ou, equivalentemente, a função de correlação de dois pontos:

$$G_0(k) = \frac{1}{r_0 + A(k - k_0)^2}, \quad (3.2)$$

tem um máximo em $k = k_0$ com um comprimento de correlação $\xi \sim \sqrt{A/r_0}$. Portanto, perto da criticalidade ($r_0 \rightarrow 0$) a física é dominada por um anel no espaço recíproco com vetor de onda $k \sim k_0$ e largura 2Λ . Essa situação é bastante similar a dos sistemas de férmions a baixas temperaturas, onde k_0 desempenha o papel de momento de Fermi, e a redução do espaço de fases a uma casca esférica (em $d = 3$) centrada no momento de Fermi é dado pelo princípio de exclusão de Pauli. A questão é como as interações modificam este cenário. O termo mais simples de interação é dado por um termo local quártico da forma:

$$\mathcal{H}_i = v \int \left(\prod_{i=1}^4 \frac{d^2 k_i}{(2\pi)^2} \right) \phi(\vec{k}_1) \dots \phi(\vec{k}_4) \delta^2(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 + \vec{k}_4), \quad (3.3)$$

onde v mede a intensidade da interação. A correlação livre é renormalizada pelo termo de interação (3.3). A correção mais simples é dada pela aproximação de campo auto-consistente na qual o termo quártico é aproximado na forma $\phi^4(\vec{x}) \simeq \langle \phi^2(\vec{x}) \rangle \phi^2(\vec{x})$. Desta forma a teoria original é aproximada por uma teoria efetiva a qual é quadrática no campo ϕ e assim pode ser resolvida exatamente. Nessa aproximação, a função de correlação $G(\vec{k})$ tem a mesma estrutura da equação (3.2) renormalizando r_0 a r , dado pela equação [46]:

$$r(T) = r_0(T) + vT \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} G(\vec{k}). \quad (3.4)$$

Brazovskii mostrou[12] que a solução de esta equação leva o ponto crítico de campo médio a uma transição de primeira ordem induzida por flutuações entre uma fase isotrópica e uma fase de faixas caracterizada por um parâmetro de ordem com modulações $\langle \phi(\vec{x}) \rangle \sim \cos(k_0 x)$. Embora flutuações de longo comprimento de onda desses padrões modulados podem divergir, dependendo da dimensionalidade. Em $d = 3$ a divergência é logarítmica na dimensão linear do sistema levando a uma ordem de faixas de quase longo alcance, enquanto isso em $d = 2$ a divergência é linear implicando que o sistema não consegue se ordenar a nenhuma temperatura finita.

Assim, a questão relevante seria se é possível a existência de uma fase homogênea em temperaturas intermediárias que devolva a invariância translacional mas quebre a simetria rotacional. A ordem orientacional desse tipo pode ser quantificada pelo tensor de ordem nemático dado em termos do gradiente da

densidade [47]:

$$Q_{ij} \equiv \int d^2x \phi(\vec{x}) \left(\partial_i \partial_j - \frac{1}{2} \partial^2 \delta_{ij} \right) \phi(\vec{x}), \quad (3.5)$$

onde $i, j = x, y$ e $\partial^2 = \partial_{xx} + \partial_{yy}$ é o Laplaciano em duas dimensões. Este tensor é simétrico e de traço nulo, em duas dimensões ele tem só duas componentes independentes as quais essencialmente representam a orientação média das paredes dos domínios e a intensidade da ordem orientacional. Com a intenção de ganhar algum intuito do conteúdo físico desse parâmetro de ordem é útil escreve-lo no espaço recíproco. Transformando Fourier e elegendo o eixo x como o principal, a única componente relevante do tensor vem dada por [47]:

$$\langle Q_{xx} \rangle = \int d^2k k^2 \cos(2\theta) G(\vec{k}), \quad (3.6)$$

onde $k_x = k \cos \theta$, $k_y = k \sin \theta$ e $G(\vec{k})$ é o fator de estrutura do sistema. Escrito desta forma o parâmetro de ordem orientacional quantifica o grau de anisotropia dos padrões de domínios. Numa fase completamente isotrópica, por exemplo: uma fase líquida ou um mosaico de domínios sem direção preferencial, a isotropia do fator de estrutura seria refletida num parâmetro de ordem orientacional nulo. Portanto, qualquer aproximação tal como a aproximação de Hartree auto-consistente descrita anteriormente, que conduz a uma constante na renormalização da função de correlação, não é capaz de capturar a física da fase nemática. Note que a equação (3.6) atua como um filtro que seleciona a componente $\cos(2\theta)$ da função de correlação. Conseqüentemente um $Q_{xx} \neq 0$ implica numa função de correlação anisotrópica. Uma forma anisotrópica que leva a uma fase nemática foi proposta nas referências [28, 30], a qual tem a forma:

$$G(\vec{k}) = \frac{1}{r + A(k - k_0)^2 + \alpha k^2 \cos(2\theta)}. \quad (3.7)$$

Aqui, α é uma constante que tem o papel de parâmetro de ordem nemático [28, 30]. Se $\alpha = 0$, a função de correlação é isotrópica e $Q_{xx} = 0$. Por outro lado, para $\alpha \neq 0$, a anisotropia da função de correlação dá uma contribuição finita a Q_{xx} . Como consequência, a fase nemática pode ser descrita por um hamiltoniano quadrático efetivo da forma:

$$H_N = \int_{\Lambda} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \phi(\vec{k}) G(\vec{k})^{-1} \phi(-\vec{k}), \quad (3.8)$$

com $G(\vec{k})$ dado pela equação (3.7). Em outras palavras, as interações devem renormalizar o Hamiltoniano numa forma dependente do vetor de onda. Isso só é possível como mínimo numa aproximação de dois laços

numa expansão perturbativa. Mostraremos na próxima seção que a “*Self Consistent Screening Aproximação*”(SCSA), descrita no Apêndice A, dá a dependência apropriada com a temperatura do parâmetro $\alpha(T)$, sendo capaz de capturar a transição de fase isotrópica-nemática.

3.2 A solução nemática na SCSA

O conjunto de equações auto-consistente para a função de correlação de dois pontos na SCSA são(Apêndice A):

$$G(\vec{k}) = \frac{1}{G_0^{-1}(\vec{k}) + \Sigma(\vec{k})} \quad (3.9)$$

$$\Sigma(\vec{k}) = \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} D(\vec{k} - \vec{q}) G(\vec{q}) \quad (3.10)$$

$$D(\vec{k}) = \frac{v}{1 + v\Pi(\vec{k})} \quad (3.11)$$

$$\Pi(\vec{k}) = \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} G(\vec{k} - \vec{q}) G(\vec{q}). \quad (3.12)$$

Uma solução geral deste conjunto de equações para um sistema particular é uma tarefa formidável. Como foi discutido na seção 3.1, é esperado que o sistema de equações que definem a SCSA admita uma solução da forma (3.7). Portanto, o nosso objetivo a seguir será mostrar que esse conjunto de equações admite uma solução daquela forma e que essa solução é estável para temperaturas menores que uma dada temperatura crítica, isso caracterizaria uma transição isotrópica-nemática. Trabalhamos perturbativamente a ordem v^2 em (3.11), de forma que $D(\vec{k}) = v - v^2\Pi(\vec{k})$. Além disso para simplicidade numérica trabalhamos a v constante, desconsiderando sua dependência com a temperatura já que isto não muda as características essenciais do modelo. Para proceder, escrevemos as equações (3.10), (3.11) e (3.12) no espaço real:

$$\Sigma(\vec{x}) = D(\vec{x})G(\vec{x}) \quad (3.13)$$

$$D(\vec{x}) = v\delta(\vec{x}) - v^2\Pi(\vec{x}) \quad (3.14)$$

$$\Pi(\vec{x}) = G(\vec{x})^2. \quad (3.15)$$

Desta forma a auto-energia $\Sigma(\vec{x})$ pode-se escrever diretamente como função de $G(\vec{x})$:

$$\Sigma(\vec{x}) = vG(0)\delta(\vec{x}) - v^2G(\vec{x})^3. \quad (3.16)$$

Portanto, o sistema de equações que finalmente precisa ser resolvido é:

$$\begin{aligned} G(\vec{k}) &= \frac{1}{r_0 + A(k - k_0)^2 + \Sigma(\vec{k})} \\ \Sigma(\vec{x}) &= vG(0)\delta(\vec{x}) - v^2G(\vec{x})^3. \end{aligned} \quad (3.17)$$

A forma atípica de escrever o sistema anterior, a primeira equação no espaço recíproco e a segunda no espaço real, é conveniente na análise numérica da solução.

Como já foi discutido na seção 3.1, a solução nemática deve estar caracterizada por uma simetria orientacional quebrada, o que neste contexto significa que a função de correlação $G(\vec{k})$ depende não só do módulo do vetor de onda k , senão também da orientação dele. Consequentemente, numa expansão da auto-energia sobre o anel de rádio k_0 , a forma de mais baixa ordem que é necessária para revelar uma quebra da simetria rotacional tem a forma $c_1 + c_2 \cos(2\theta)$, onde c_1 e c_2 são coeficientes k -independentes e θ é o ângulo relativo à direção ao longo da qual a simetria rotacional foi quebrada. Isso implica que só o termo da “massa” na função de correlação seria renormalizado com uma função dependente de θ . Termos de ordem superior na auto-energia seriam responsáveis por correções nos valores de A e k_0 , mas estas correções não mudam significativamente a física perto da transição nemática.

Dos argumentos prévios propomos o seguinte “*ansatz*” para a função de correlação renormalizada:

$$G(\vec{k}) = \frac{1}{r + A(k - k_0)^2 + \alpha \cos(2\theta)}. \quad (3.18)$$

onde $\vec{k} = (k \cos \theta, k \sin \theta)$ e o (aproximadamente constante) fator $k^2 \sim k_0^2$ que aparece na equação (3.7) foi absorvido em α . Note que a dependência angular de $G(\vec{k})$ com θ implica que quando a simetria é quebrada ($\alpha \neq 0$) dois máximos isolados aparecem sobre o eixo k_y em $k_y = k_0$ e $k_y = -k_0$, neste estado o vetor diretor da fase nemática aponta ao longo da direção y no espaço real.

Reescalando os parâmetros na forma: $A \rightarrow 1$, $k_0 \rightarrow 1$, $\frac{r}{Ak_0^2} \rightarrow r$, $\frac{\alpha}{Ak_0^2} \rightarrow \alpha$, $\frac{v}{A^2k_0^2} \rightarrow v$, o problema é expressado em forma adimensional. Para proceder, é útil expandir em série de Fourier a função $G(k, \theta)$, dada pela equação (3.18), até segunda ordem em θ :

$$G(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{(r + (k - 1)^2)^2 - \alpha^2}} \left(1 - \frac{2\alpha \cos(2\theta)}{r + (k - 1)^2 + \sqrt{(r + (k - 1)^2)^2 - \alpha^2}} \right), \quad (3.19)$$

onde os coeficientes de Fourier k -dependentes são exatos. Em consequência, a função de correlação no espaço real pode ser escrita como:

$$G(\vec{x}) = H_1(x) - \alpha H_2(x) \cos(2\phi), \quad (3.20)$$

onde o ângulo ϕ é tal que $\phi = \pi/2$ corresponde-se com a direção do vetor diretor da fase nemática e

$$H_1(x) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{\sqrt{(r + (k-1)^2)^2 - \alpha^2}}, \quad (3.21)$$

$$H_2(x) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\cos(2\theta) e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{\sqrt{(r + (k-1)^2)^2 - \alpha^2}} \times \frac{2}{r + (k-1)^2 + \sqrt{(r + (k-1)^2)^2 - \alpha^2}}, \quad (3.22)$$

onde $\vec{k} \cdot \vec{x} = kx \cos \theta$. Assim,

$$G(\vec{x})^3 = \left(H_1^3(x) + \frac{3}{2} \alpha^2 H_1(x) H_2^2(x) \right) - \left(3\alpha H_1^2(x) H_2(x) + \frac{3}{4} \alpha^3 H_2^3(x) \right) \cos(2\phi). \quad (3.23)$$

Agora podemos calcular $\Sigma(\vec{k})$ tomando a transformada inversa de Fourier na equação (3.17). Como já foi dito, nós temos interesse no cálculo de $\Sigma(\vec{k}_0)$ o qual renormaliza a massa como uma função do ângulo θ . Portanto, fixamos $\vec{k} = \vec{k}_0$ e obtemos $\Sigma(\vec{u})$, com $\vec{u} = \vec{k}_0/k_0$ nas variáveis reescaladas. As equações de renormalização que resultam são:

$$r = r_0 + v H_1(0) - v^2 \int d^2x \left(H_1^3(x) + \frac{3}{2} \alpha^2 H_1(x) H_2^2(x) \right) e^{-ix \cos \phi} \quad (3.24)$$

$$\alpha = 3v^2 \int d^2x \left(\alpha H_1^2(x) H_2(x) + \frac{1}{4} \alpha^3 H_2^3(x) \right) \cos(2\phi) e^{-ix \cos \phi}. \quad (3.25)$$

Deste conjunto de equações podemos ver que a solução com $\alpha = 0$ é sempre uma solução do sistema. A solução não trivial pode ser encontrada partindo da última equação após factorar a solução $\alpha = 0$. Desta forma a solução não trivial, quando existe, será:

$$\alpha = \sqrt{\frac{1 - 3v^2 \int d^2x H_1^2(x) H_2(x) \cos(2\phi) e^{-ix \cos \phi}}{\frac{3}{4} v^2 \int d^2x H_2^3(x) \cos(2\phi) e^{-ix \cos \phi}}}. \quad (3.26)$$

É interessante notar que esta equação não é ainda a solução de α já que as funções $H_1(x)$ e $H_2(x)$ dependem de α também através das equações (3.21) e (3.22) respectivamente. No entanto, esta forma é apropriada para proceder numericamente.

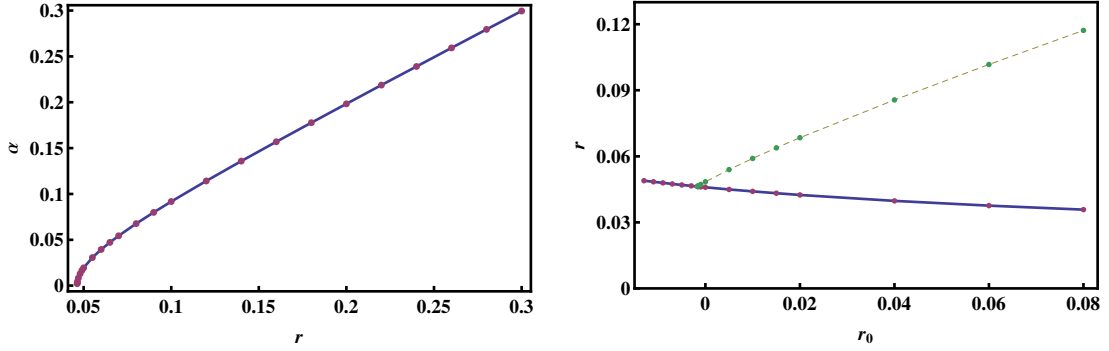


Figura 3.1: Esquerda: Solução numérica $\alpha(r)$ para $v = 0.1$. Direita: Solução numérica de r como função de r_0 para $v = 0.1$. A curva superior pontilhada corresponde à solução com $\alpha \neq 0$, enquanto a curva contínua inferior se corresponde à solução com $\alpha = 0$.

3.2.1 Resultados numéricos

Para resolver numericamente as equações (3.24) e (3.26) é conveniente dividir o cálculo em dois passos: primeiro resolveremos a equação para α para um conjunto de valores genérico de r . Desta forma construímos a função $\alpha(r)$ a qual se mostra na Figura 1.1 à esquerda para $v = 0.1$. Esta função é independente de todos os parâmetros exceto v .

Para continuar, procedemos com o cálculo de r variando r_0 mediante a equação (3.24). Nós temos que considerar ambos casos $\alpha \neq 0$ e $\alpha = 0$. No caso $\alpha \neq 0$ usamos a função $\alpha(r)$ previamente calculada para resolver (3.24), enquanto para $\alpha = 0$ resolvemos a equação para r diretamente. Na figura 3.1 à direita mostramos a solução da equação (3.24) em ambos os casos para $v = 0.1$. Observamos como em certo valor crítico de $r_0 = r_{0c}$ uma bifurcação acontece e a solução nemática aparece. Como é usual, consideramos então que r_0 depende da temperatura como $r_0 = 1 - T$, onde T é a temperatura adimensional. Na figura 3.2 mostramos o parâmetro de ordem nemático como função da temperatura.

3.2.2 Natureza da transição isotrópica-nemática na SCSA

Até agora mostramos que as equações da SCSA para o modelo de Brazovskii admitem uma solução nemática ($\alpha \neq 0$) e também uma solução isotrópica ($\alpha = 0$), como pode ser observado na Figura 3.1 (direita). Para estabelecer uma ou a outra como a solução termodinâmica temos que comparar suas energias livres. A expressão para a energia livre na SCSA:

$$F(T) = \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \ln \left(G^{-1}(\vec{k}) \right) + \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \ln \left(D^{-1}(\vec{k}) \right) - \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Sigma(\vec{k}) G(\vec{k}). \quad (3.27)$$

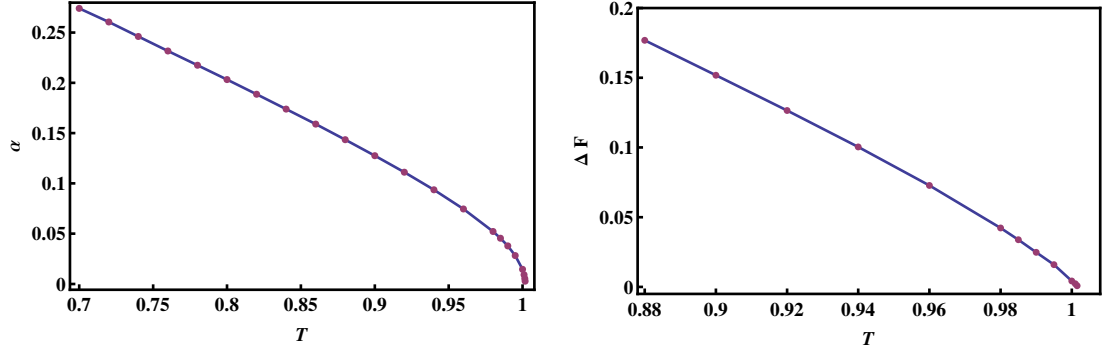


Figura 3.2: Esquerda: O parâmetro de ordem nemático α como função da temperatura adimensional T , para $v = 0.1$. Direita: Diferença de energia livre entre a solução isotrópica e a solução nemática como função da temperatura adimensional para $v = 0.1$.

Expandindo o logaritmo na segunda integral até ordem linear na função de polarização chegamos a

$$\begin{aligned}
 F(T) &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \ln \left(G^{-1}(\vec{k}) \right) + \frac{v}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Pi(\vec{k}) - \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Sigma(\vec{k}) G(\vec{k}) \\
 &- \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \ln v,
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

onde o último termo na equação (3.28) é uma constante. O segundo termo da última equação é simplesmente dado por $\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Pi(\vec{k}) = G^2(0)$. O termo incluindo a auto-energia pode ser calculado considerando que a função $G(\vec{k})$ é pontiaguda em k_0 . Então é suficiente considerar $\Sigma(\vec{k})$ como variando somente sobre o anel de rádio k_0 . As considerações anteriores conduzem a uma diferença entre a energia livre da solução isotrópica e a nemática dada por:

$$\begin{aligned}
 \Delta F &= F(\alpha = 0) - F(\alpha \neq 0) \\
 &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \ln \left(\frac{G_{\alpha=0}^{-1}(\vec{k})}{G_{\alpha \neq 0}^{-1}(\vec{k})} \right) + \frac{v}{2} (G_{\alpha=0}^2(0) - G_{\alpha \neq 0}^2(0)) \\
 &- \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\Sigma_{\alpha=0}(\vec{u}) G_{\alpha=0}(\vec{k}) - \Sigma_{\alpha \neq 0}(\vec{u}) G_{\alpha \neq 0}(\vec{k}) \right),
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

onde $\vec{u} = \vec{k}/k$.

Todas as magnitudes envolvidas no cálculo de ΔF já foram achadas, então a avaliação numérica é direta. Os resultados são mostrados na Figura 3.2 à direita, para $v = 0.1$. Observamos que para $T < T_c$, que corresponde a $r_0 > r_{0c}$ a diferença de energia livre $\Delta F > 0$, o que significa que a solução nemática assim que aparece apresenta menor energia livre que a fase isotrópica. Esse resultado também foi confirmado por

médio da expansão analítica da energia livre perto do ponto crítico. Este fato estabelece a existência de uma transição contínua isotrópica-nemática no contexto da SCSA.

3.2.3 Comportamento crítico

Para analisar o comportamento perto do ponto crítico em detalhe é conveniente incluir os parâmetros α e r na notação das funções $H_1(x) \equiv H_1(x, r, \alpha)$ e $H_2(x) \equiv H_2(x, r, \alpha)$. A equação (3.26) para $\alpha = 0$ fornece uma condição para determinar o valor crítico de $r = r_c$, e a equação (3.21) permite obter o correspondente r_0 crítico $r_0 = r_{0c}$:

$$3v^2 \int d^2x H_1^2(x, r_c, 0) H_2(x, r_c, 0) \cos(2\phi) e^{-ix \cos \phi} = 1, \quad (3.30)$$

e

$$r_{0c} = r_c - v H_1(0, r_c, 0) + v^2 \int d^2x H_1^3(x, r_c, 0) e^{-ix \cos \phi}. \quad (3.31)$$

Expandindo H_1 e H_2 nas potencias dominantes de r e α no entorno do ponto crítico resulta em:

$$\begin{aligned} H_1(x, r, \alpha) &= H_1(x, r_c, 0) - I_{11}(x) \Delta r + I_{12}(x) \alpha^2, \\ H_2(x, r, \alpha) &= H_2(x, r_c, 0) - I_{21}(x) \Delta r + I_{22}(x) \alpha^2, \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde $\Delta r = (r - r_c)$ e

$$\begin{aligned} I_{11}(x) &= \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{(r_c + (k-1)^2)^2} \\ I_{12}(x) &= \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{(r_c + (k-1)^2)^3} \\ I_{21}(x) &= 2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \cos(2\theta)}{(r_c + (k-1)^2)^3} \\ I_{22}(x) &= \frac{3}{4} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \cos(2\theta)}{(r_c + (k-1)^2)^4}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Usando estas expansões nas equações (3.24) e (3.25) para r e α chegamos em que $\alpha = \sqrt{K\Delta r}$ com $\Delta r = m(r_0 - r_{0c})$, onde

$$\begin{aligned} K &= \frac{\int d^2x e^{-ix \cos \phi} \cos(2\phi) (2H_1(x, r_c, 0)H_2(x, r_c, 0)I_{11}(x) + H_1(x, r_c, 0)^2I_{21}(x))}{\int d^2x e^{-ix \cos \phi} \cos(2\theta) \left(\frac{1}{4}H_2(x, r_c, 0)^3 + 2H_1(x, r_c, 0)H_2(x, r_c, 0)I_{12}(x) + H_1(x, r_c, 0)^2I_{22}(x) \right)}, \\ m^{-1} &= 1 + vI_{11}(0) - vKI_{12}(0) - 3v^2 \int d^2x e^{-ix \cos \phi} \\ &\times \left(H_1(x, r_c, 0)^2I_{11}(x) + KH_1(x, r_c, 0)^2I_{12}(x) + \frac{K}{2}H_1(x, r_c, 0)H_2(x, r_c, 0)^2 \right). \end{aligned} \quad (3.34)$$

K e m são números positivos o que é possível comprovar na figura 3.1 (esquerda para K e direita para m). A figura mostra que $\alpha(r)$ e $r(r_0)$ são funções crescentes de r e r_0 respectivamente. Uma conclusão direta desses resultados é que $\alpha = \sqrt{mK(T_c - T)}$ perto da temperatura crítica, como é possível observar na Figura 3.2 à esquerda. Portanto, como foi mostrados na análise da energia livre, a SCSA prediz uma transição contínua isotrópica-nemática de segunda ordem de acordo com resultados prévios obtidos por [28, 30]. Na referência mencionada os autores mostraram que considerar flutuações angulares do parâmetro de ordem nemático leva esta transição a ser do tipo K.T. No entanto, como vamos ver no próximo capítulo, características como o tipo de transição (K.T. o segunda ordem) dependem fortemente do tipo de interações presentes no sistema.

3.3 Conclusões

O resultado principal deste capítulo foi provar a existência de uma transição isotrópica-nemática em sistemas formadores de faixas numa expansão a dois laços na “*Self Consistent Screening Approximation*” [48]. Em trabalhos anteriores a transição nemática na classe de modelos estudada aqui já foi achada incluindo explicitamente um termo de interação anisotrópica baseado em considerações de simetria. Nesse caso, um parâmetro fenomenológico adicional foi introduzido no espírito de uma expansão de Landau. Embora os resultados obtidos foram satisfatórios de um ponto de vista físico, mostrando a presença de uma transição a uma fase nemática com simetria rotacional quebrada, uma questão interessante faltava a ser respondida: seria possível obter a transição partindo de um modelo mais fundamental? Aqui respondemos essa pergunta. A interação relevante pode ser obtida numa expansão perturbativa do Hamiltoniano efetivo ϕ^4 com parâmetro de interação v , indo no mínimo até ordem de dois laços, ou seja, a interação renormalizada responsável pela aparição da fase nemática é $O(v^2)$. É fácil agora ver o por quê. As aproximações mais simples, campo médio ou a aproximação de Hartree a um laço, para a correlação de densidades não é suficiente para obter a fase nemática. A razão física se encontra na anisotropia das correlações inerentes à fase nemática.

Assim, qualquer renormalização independente do vetor de onda preservará a invariância rotacional das correlações de alta temperatura. Para obter que a correção da auto-energia possua uma dependência em \vec{k} que possa levar à quebra da simetria rotacional, é preciso ir além da aproximação de Hartree.

Nós achamos a quebra da simetria rotacional dentro da SCSA. Já neste nível da teoria de perturbações do Hamiltoniano original as equações que determinam a correlação de dois pontos são muito complexas para resolvê-las de forma fechada. Mediante simplificações justificadas fisicamente, encontramos a solução analítica perto da transição e implementamos uma forma eficiente de resolver as equações numericamente até longe da região crítica. Os resultados achados estão de acordo com resultados prévios obtidos via expansão de Landau. Em particular a transição isotrópica-nemática é contínua com expoentes críticos de campo médio para o parâmetro de ordem nemático $\alpha \sim (T_c - T)^{1/2}$. Note que, embora a SCSA já leva em conta termos das flutuações no campo $\phi(\vec{x})$, o fato do parâmetro de ordem ser proporcional a função de correlação implica que o caminho tomado leva a uma descrição tipo campo médio da fase nemática. Em trabalhos anteriores foi mostrado que a incorporação de flutuações relevantes, numa teoria tipo campo médio para a fase nemática muda a transição para tipo K.T. No próximo capítulo, mediante um outro enfoque, estendemos os resultados apresentados neste capítulo e finalmente respondemos em quais sistemas é possível observar uma fase nemática estável no limite termodinâmico e em quais é de se esperar uma transição do tipo K.T.

Capítulo 4

A fase nemática e o modelo XY generalizado

Até agora, nos capítulos anteriores, temos discutido como sistemas com interações competitivas isotrópicas: uma de curto alcance atrativa e a outra de longo alcance repulsiva tem a característica de apresentar modulações no parâmetro de ordem. Primeiramente, no capítulo 2, foram discutidas as propriedades locais de um modelo formador de faixas. Mostramos que nesse caso, em concordância com resultados prévios, se tem uma transição de fases de primeira ordem induzida por flutuações quando a separação de fases acontece. Logo depois, estudos numéricos e resultados experimentais mostram como as faixas embora já formadas se encontram num estado dominado pelas flutuações. Neste estágio o sistema não consegue se ordenar, nem posicional nem orientacionalmente. Em tais condições a diminuição da temperatura provoca um aumento do comprimento de correlação orientacional logicamente, mas a questão é: seria possível chegar num estado com ordem orientacional estável no limite termodinâmico?

No capítulo 3 foi estudado o modelo de Brazoskii na SCSA e mostramos que nessa aproximação se obtém uma fase nemática de baixa temperatura estável no limite termodinâmico. Os nossos resultados nesse capítulo estão baseados somente na existência de um mínimo isotrópico no espectro de flutuações. Dessa forma pareceria que todo par de interações competitivas dão lugar a uma fase nemática estável. Isto é oposto a resultados obtidos previamente na literatura que mediante uma teoria fenomenológica, indicam que incluir flutuações orientacionais relevantes leva o sistema a uma fase com ordem orientacional de quase-longo alcance [28]. Neste cenário, resta uma questão a ser respondida: quês tipos de interações podem realmente dar

lugar a uma fase nemática de longo alcance. E caso a ordem orientacional de longo alcance não seja proibida em duas dimensões: quê acontece com a ordem posicional?

Neste capítulo vamos a retomar o estudo da fase nemática em sistemas isotrópicos. Começaremos mostrando como construir corretamente uma teoria elástica (efetiva) para descrever a ordem posicional de um sistema de faixas, na qual estão presentes interações repulsivas de longo alcance. Os nossos resultados mostram como, ainda na presença destas interações, não há ordem posicional no sistema no limite termodinâmico. Posteriormente é usada uma técnica, análoga a aquela desenvolvida por Toner e Nelson anteriormente [49], na construção de uma teoria efetiva para a ordem orientacional que inclui o papel dos defeitos topológicos de mais baixa energia. Como é mostrado, o Hamiltoniano efetivo que descreve os graus de liberdade orientacionais, coincide com aquele usado para descrever um modelo XY que inclui interações dipolares generalizadas. Tal mapeamento permite deduzir em quais casos é de se esperar uma fase nemática de longo alcance e em quais não, assim como as propriedades críticas do modelo.

4.1 Teoria elástica em sistemas com interações de longo alcance

O nosso Hamiltoniano de partida neste capítulo tem a forma:

$$\mathcal{H}[\phi] = \mathcal{H}_i[\phi] + \mathcal{H}_l[\phi], \quad (4.1)$$

onde $\mathcal{H}_i[\phi]$ representa a parte do Hamiltoniano total relativa às interações

$$\mathcal{H}_i[\phi] = \frac{1}{2} \int d^2 \vec{x} \left(\vec{\nabla} \phi \right)^2 + \frac{1}{2} \int d^2 \vec{x} \int d^2 \vec{x}' \phi(\vec{x}) J(\vec{x} - \vec{x}') \phi(\vec{x}'), \quad (4.2)$$

e $\mathcal{H}_l[\phi]$ é a parte local do Hamiltoniano, normalmente relacionada com a contribuição à energia do modelo “*coarse-grained*” da entropia do modelo microscópico:

$$\mathcal{H}_l[\phi] = \frac{1}{2\beta} \int d^2 \vec{x} \mathcal{S}(\phi(\vec{x})). \quad (4.3)$$

Neste capítulo vamos trabalhar com uma forma específica da interação repulsiva $J(\vec{x}) = 1/x^\sigma$. Essa forma da interação repulsiva tem a vantagem de permitir interpolar entre diferentes comportamentos variando o valor de σ . Para σ pequeno o suficiente a interação é de longo alcance, o que como veremos provoca comportamentos não triviais. Para σ grande, ainda que exista uma interação explícita entre pontos afastados do sistema a constante de interação é fraca o suficiente para fazer com que o alcance efetivo da

interação seja finito e portanto o sistema se comporte como um sistema que só possui interações de curto alcance.

A parte do Hamiltoniano que contem as interações se escreve no espaço de momentos na forma:

$$\mathcal{H}_i[\phi] = \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} A(k) \hat{\phi}(\vec{k}) \hat{\phi}(-\vec{k}), \quad (4.4)$$

onde $A(k) = (k^2 + \hat{J}(k))$ é o espectro de flutuações e $\hat{J}(k)$ representa a transformada de Fourier de $J(x)$. Considerando a forma específica de $J(x)$ pode se mostrar [26] que em duas dimensões:

$$\hat{J}(k) = \mathcal{F} \left[\frac{1}{x^\sigma} \right] = 2^{2-\sigma} \frac{\Gamma(\frac{2-\sigma}{2})}{\Gamma(\frac{\sigma}{2})} k^{\sigma-2} = C(\sigma) k^{\sigma-2}, \quad (4.5)$$

onde $\mathcal{F}[\dots]$ representa o operador transformada de Fourier e a constante $C(\sigma)$ é definida pela própria equação 4.5. O nosso objetivo agora é encontrar a forma efetiva do Hamiltoniano total quando os perfis são deformados da estrutura de faixas perfeitas. As nossas estruturas podem ser flutuadas de muitas formas diferentes, mas sabemos que as flutuações de mais baixa energia são aquelas que são transversais (modos de Goldstone). Pois dependendo do vetor de onda típico da flutuação, o custo energético pode ser tão pequeno como nós queiramos. Assim sem perda de generalidade podemos assumir um perfil sinusoidal na direção “ x ” e flutuar ele na fase com campo de deformação $u(\vec{x})$. De forma tal que o parâmetro de ordem local seja dado por:

$$\phi(\vec{x}) = \sum_{n \geq 1} \phi_n \cos(nk_0 x + nk_0 u(\vec{x})). \quad (4.6)$$

Com a forma proposta para $\phi(\vec{x})$ podemos mostrar que a energia total do termo local não é alterada pela flutuação, ou seja

$$\int d^2 \vec{x} \mathcal{S}(\phi(\vec{x})) = \int d^2 \vec{x} \mathcal{S}(\phi(\vec{x})|_{u=0}). \quad (4.7)$$

Por outro lado, considerando $u(\vec{x})$ pequeno podemos obter até primeira ordem em u

$$\hat{\phi}(\vec{k}) = \sum_{n \geq 1} \phi_n \frac{(2\pi)^2}{2} \left(\delta(\vec{k} - n\vec{k}_0) + \delta(\vec{k} + n\vec{k}_0) \right) - \sum_{n \geq 1} \phi_n \frac{nk_0}{2} \left(u(\vec{k} - n\vec{k}_0) - u(\vec{k} + n\vec{k}_0) \right), \quad (4.8)$$

onde $\vec{k}_0 = k_0 \vec{e}_x$. Assim, substituindo $\hat{\phi}(\vec{k})$ na equação 4.4 e calculando, obtemos que a contribuição dominante é:

$$\mathcal{H}_i = \frac{\Omega}{4} \sum_{n \geq 1} A(nk_0) \phi_n^2 + \frac{1}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \mathcal{B}(\vec{k}) \hat{u}(\vec{k}) \hat{u}(-\vec{k}), \quad (4.9)$$

onde

$$\mathcal{B}(\vec{k}) = \sum_{n \geq 1} \frac{\phi_n^2 n^2 k_0^2}{4} (2\pi)^4 \left(A(\vec{k} - n\vec{k}_0) + A(\vec{k} + n\vec{k}_0) \right), \quad (4.10)$$

e Ω representa o volume do sistema. O módulo do vector de onda da modulação k_0 , é escolhido como aquele que minimiza a energia livre do sistema de faixas, assim ele satisfaz:

$$\frac{\partial}{\partial k} \left(\sum_{n \geq 1} \frac{1}{4} A(nk) \phi_n^2 \right) \Big|_{k=k_0} = 0. \quad (4.11)$$

Considerando agora a estrutura da função $\mathcal{B}(k)$ e as condições que definem k_0 é possível concluir que o modo de mais baixa energia das flutuações da fase é o modo $\vec{k} = \vec{0}$. Fazendo então uma expansão em longos comprimentos de onda obtemos que:

$$\mathcal{B}(\vec{k}) = \gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^4. \quad (4.12)$$

Nesta equação a possível contribuição proporcional a $k_x^2 k_y^2$ é desconsiderada devido a que ela representa uma contribuição subdominante frente aos outros termos da expansão. Considerando então as equações (4.9) e (4.12) conclui-se que a contribuição local ao Hamiltoniano efetivo e:

$$\mathcal{H}_l = \mathcal{H}_{0l} + \frac{1}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} (\gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^4) \hat{u}(\vec{k}) \hat{u}(-\vec{k}), \quad (4.13)$$

Como mostrado, a contribuição local obtida ao Hamiltoniano efetivo (equação 4.13) [49, 50], é um resultado geral e não depende da aplicabilidade da aproximação de modo único. Este resultado também implica que embora a inclusão dos modos de mais alta energia aumente os valores das constantes de acoplamento γ_x e γ_y , eles não produzem nenhuma mudança qualitativa na contribuição local do Hamiltoniano efetivo.

Antes de continuar é importante notar que fazer a expansão previa da função $\mathcal{B}(\vec{k})$ em longos comprimentos de onda na verdade implica considerar pequenos desvios do vector de onda da modulação ($\vec{k}_0 + k_0 \vec{\nabla} u(\vec{x})$) do seu valor preferencial. Isto significa que a contribuição energética das regiões afastadas de \vec{k}_0 foi desprezado no espectro de flutuações original $A(k)$ na equação (4.4). Em particular, contribuições energéticas provenientes da cauda de longo alcance da interação repulsiva foram deixadas de fora na análise previa.

Vamos proceder então com o calculo da interação explicita entre domínios afastados (células básicas), considerando as células básicas como compostas por uma única interface com comprimento igual ao comprimento de modulação λ , como mostrado na Figura 4.1.

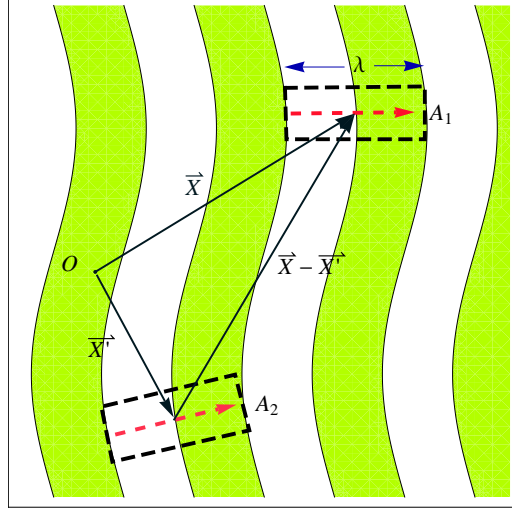


Figura 4.1: Representação esquemática da interação de longo alcance entre dois dipolos elementares.

A interação entre um par de células dipolares esta dado por:

$$\delta\mathcal{H}_{nl} = \frac{J}{2} \int_{\delta A_1} d^2x \int_{\delta A_2} d^2x' \frac{\phi(\vec{x})\phi(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^\sigma}. \quad (4.14)$$

No limite de interesse, $|\vec{x} - \vec{x}'| \gg \lambda$, esta integral pode ser calculada ordem a ordem numa expansão multipolar. Mantendo os termos até segunda ordem encontramos:

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{H}_{nl} = & \frac{J}{2} \left(\frac{Q_1 Q_2}{|\vec{x}_{21}|^\sigma} - \sigma \frac{Q_2 \vec{x}_{21} \cdot \vec{P}_1}{|\vec{x}_{21}|^{\sigma+2}} + \sigma \frac{Q_1 \vec{x}_{21} \cdot \vec{P}_2}{|\vec{x}_{21}|^{\sigma+2}} + \sigma \frac{\vec{P}_2 \cdot \vec{P}_1}{|\vec{x}_{21}|^{\sigma+2}} \right. \\ & \left. - \sigma(\sigma + 2) \frac{(\vec{P}_2 \cdot \vec{x}_{21})(\vec{P}_1 \cdot \vec{x}_{21})}{|\vec{x}_{21}|^{\sigma+2}} \right) \delta A_1 \delta A_2, \end{aligned} \quad (4.15)$$

onde \vec{x}_{21} representa $\vec{x} - \vec{x}'$, $Q_i = (1/\delta A_i) \int_{\delta A_i} d^2x \phi(\vec{x})$ corresponde-se à “carga” generalizada e $\vec{P}_i = (1/\delta A_i) \int_{\delta A_i} d^2x \vec{x} \phi(\vec{x})$ é o “momento dipolar” generalizado. Assim, até segunda ordem, a interação entre duas células é composta por um termo do tipo interação carga-carga, dois termos de tipo interação carga dipolo e uma interação entre dipolos generalizada.

A contribuição total desta energia de interação no limite do contínuo será:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{nl} = & \frac{J}{2} \int d^2x_1 d^2x_2 \left(\frac{Q(\vec{x}_1)Q(\vec{x}_2)}{|\vec{x}_{21}|^\sigma} - \sigma \frac{Q(\vec{x}_2)\vec{x}_{21} \cdot \vec{P}(\vec{x}_1)}{|\vec{x}_{21}|^{\sigma+2}} + \sigma \frac{Q(\vec{x}_1)\vec{x}_{21} \cdot \vec{P}(\vec{x}_2)}{|\vec{x}_{21}|^{\sigma+2}} \right. \\ & \left. + \sigma \frac{\vec{P}(\vec{x}_2) \cdot \vec{P}(\vec{x}_1)}{|\vec{x}_{21}|^{\sigma+2}} - \sigma(\sigma + 2) \frac{(\vec{P}(\vec{x}_2) \cdot \vec{x}_{21})(\vec{P}(\vec{x}_1) \cdot \vec{x}_{21})}{|\vec{x}_{21}|^{\sigma+2}} \right) \Omega(|\vec{x}_{21}|), \end{aligned} \quad (4.16)$$

onde $\Omega(|\vec{x}_{21}|)$ representa uma função de corte que anula-se para distâncias menores do que o comprimento de modulação. Se levamos em conta agora a invariância translacional podemos concluir que $\langle Q(\vec{x}_2)\vec{P}(\vec{x}_1) \rangle = \langle Q(\vec{x}_1)\vec{P}(\vec{x}_2) \rangle$, onde $\langle \dots \rangle$ significa média térmica. Isto significa que a interação “carga-dipolo” não contribui para o Hamiltoniano efetivo. Em outras palavras, os graus de liberdade de carga e dipolares estão desacoplados, e devido a isso tal interação é irrelevante. Assim o Hamiltoniano efetivo com os graus de liberdade responsáveis pela interação orientacional se reduz a:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{nl} = & \frac{J}{2} \int d^2x \int d^2x' \sigma P(\vec{x})P(\vec{x}')\Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \left(\frac{\vec{e}(\vec{x}) \cdot \vec{e}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} \right. \\ & \left. - (\sigma + 2) \frac{\vec{e}(\vec{x}) \cdot (\vec{x} - \vec{x}')\vec{e}(\vec{x}') \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+4}} \right), \end{aligned} \quad (4.17)$$

onde $\vec{e}(\vec{x}) = \vec{P}(\vec{x})/P(\vec{x})$ representa um vetor unitário (diretor) orientado na direção do momento dipolar de uma célula básica dada. Os vetores diretores podem ser escritos em termo do campo de deformação das faixas $u(\vec{x})$ como $\vec{e}(\vec{x}) \approx \frac{\vec{k}_0}{k_0} + \vec{\nabla}u(\vec{x})$. Assim a contribuição dominante na equação (4.17) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{nl} = & \Delta\mathcal{H}_{0nl} + \frac{J}{2}\sigma \int d^2x \int d^2x' P(\vec{x})P(\vec{x}')\Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \left(\frac{\partial_y u(\vec{x})\partial_{y'} u(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} \right. \\ & \left. - (\sigma + 2) \frac{(y - y')^2 \partial_y u(\vec{x})\partial_{y'} u(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+4}} \right). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Até este momento, os momentos dipolares generalizados no Hamiltoniano efetivo podem flutuar tanto em magnitude quanto na sua direção de orientação. É importante notar que nesta classe de sistemas o estado no qual as faixas encontram-se na fase desordenada ou “liquida” aparece numa escala de energias ou temperatura maior que aquela na qual poderia se estabelecer a ordem posicional e/ou orientacional. Depois que a separação de fases se estabelece no sistema, na forma de um “liquido” de faixas, a rigidez das faixas na direção longitudinal é muito maior que aquela na direção transversal. De fato, isso é um reflexo da existência dos modos moles de Goldstone na direção transversal, resultado da natureza isotrópica do mínimo do espectro de flutuações num vetor de onda não nulo. A possível transição ordem-desordem e separação de fases nestes sistemas de faixas acontecem em escalas diferentes de energia. É na vizinhança da transição de separação de fases que as flutuações no comprimento de modulação das faixas e do momento dipolar generalizado são importantes. Em mais baixas temperaturas, quando o estado de liquido de faixas está estabelecido, as flutuações longitudinais são muito pequenas. Neste contexto, é natural considerar $|\vec{P}(\vec{x})|$ uma constante.

Desta forma chegamos à forma final da contribuição não local ao Hamiltoniano efetivo orientacional:

$$\Delta\mathcal{H}_{nl} = \frac{\gamma}{2} \int d^2x \int d^2x' \Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \left(\frac{\partial_y u(\vec{x}) \partial_{y'} u(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} - (\sigma + 2) \frac{(y - y')^2 \partial_y u(\vec{x}) \partial_{y'} u(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+4}} \right), \quad (4.19)$$

onde $\gamma = \sigma J P^2$. A continuação escrevemos a componente não local do Hamiltoniano efetivo no espaço de Fourier. Fazendo uso da identidade 4.5 é possível mostrar que:

$$\Delta\mathcal{H}_{nl} = \frac{\gamma}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} l k^{\sigma-2} k_y^4 \hat{u}(\vec{k}) \hat{u}(-\vec{k}), \quad (4.20)$$

onde $l = C(\sigma + 4)(2 + \sigma)^2 \sigma$. Finalmente, somando a contribuição local do Hamiltoniano efetivo (Eq. 4.13) mais a contribuição não local (Eq. 4.20) chegamos na forma final do Hamiltoniano efetivo para o campo de deformação das faixas ou, o que a mesma coisa para os graus de liberdade posicionais do sistema:

$$\Delta\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (\gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^4 + \gamma_{nl} k^{\sigma-2} k_y^4) \hat{u}(\vec{k}) \hat{u}(-\vec{k}), \quad (4.21)$$

onde $\gamma_{nl} = \gamma \sigma (2 + \sigma)^2 C(\sigma + 4)$. O Hamiltoniano efetivo posicional (Eq. 4.21) anterior é um dos resultados centrais deste capítulo e será o ponto de partida de vários estudos subsequentes [50]. Mas antes disso, vale a pena discutir qual a física por trás deste resultado e quais as suas implicações.

É possível perceber que o Hamiltoniano efetivo que normalmente se apresenta na literatura como geral [49, 51, 24], é somente composto pelos dois primeiros termos da equação 4.21. A explicação para essa divergência encontra-se, em que normalmente é assumido que as contribuições energéticas dominantes são dadas pelas propriedades elástica locais do material, sendo desconsideradas as contribuições da interação entre domínios de faixas afastados. Implicitamente esta consideração é análoga a assumir que após a formação das faixas, a interação de longo alcance é blindada pela estrutura de faixas com densidades alternadas. Este mecanismo de blindagem de fato acontece, basta notar que a interação repulsiva original é proporcional a $1/r^\sigma$, e a interação efetiva posicional cai em essência como $1/r^{\sigma+2}$. No entanto, a efetividade da blindagem depende fortemente da geométrica da célula elemental do padrão. Por exemplo, um padrão de bolhas hexagonais, apresentaria uma interação posicional resultante do efeito da cauda da interação repulsiva muito mais fraca.

No caso de sistemas de faixas, a blindagem é pouco eficiente e como resultado a aparente interação residual, pode inclusive se tornar uma contribuição importante frente às contribuições locais, dependendo do alcance da interação repulsiva. De fato, como mostrado anteriormente a presença da cauda da interação repulsiva produz como resultado uma contribuição ao Hamiltoniano efetivo dado pela equação 4.20. Desta

forma é possível perceber que só no caso $\sigma \geq 2$, os efeitos da cauda da interação de longo alcance são irrelevantes frente as interações efetivas locais. Para $\sigma < 2$ o termo proporcional a k_y^4 é subdominante frente à contribuição proporcional a $k^{\sigma-2}k_y^4$ para longos comprimentos de onda (Eq. 4.21). Como conclusão, resulta evidente que para sistemas com $\sigma < 2$, a teoria e os resultados prévios discutidos na literatura [49, 51, 24] não são aplicáveis e por tanto, quais as propriedades topológicas destes sistemas é uma pergunta em aberto. Além do interesse teórico geral em entender a física de sistemas com interações de longo alcance ($\sigma < 2$), existe um interesse especial no estudo para $\sigma = 1$. Este seria o caso no qual a interação repulsiva é de tipo Coulombiana e neste ponto os nossos resultados cobram uma importância adicional devido as possíveis aplicações no estudo de sistemas experimentalmente acessíveis como sistemas de elétrons fortemente correlacionados e sistemas de átomos frios.

4.1.1 Ordem posicional e orientacional na aproximação Gaussiana

Como resultado da ação efetiva para descrever o campo de deformação das faixas (Eq. 4.21) e do teorema de equipartição da energia temos que:

$$\langle \hat{u}(\vec{k})\hat{u}(-\vec{k}) \rangle = \frac{k_B T}{\gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^4 + \gamma_{nl} k^{\sigma-2} k_y^4}. \quad (4.22)$$

Portanto

$$\langle u^2(0) \rangle = \frac{k_B T}{(2\pi)^2} \int \int dk_x dk_y \frac{1}{\gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^4 + \gamma_{nl} k^{\sigma-2} k_y^4}, \quad (4.23)$$

esta integral não converge devido a divergências infravermelhas sendo possível mostrar que:

$$\langle u^2(0) \rangle \propto \begin{cases} L^{\frac{\sigma}{2}} & , \sigma < 2 \\ L & , \sigma \geq 2 \end{cases}$$

onde L é a dimensão linear do sistema. Como caso limite temos $\sigma = 0$, neste cenário é fácil obter que: $\langle u^2(0) \rangle \propto \ln(L)$. Como se observa a flutuação quadrática media do campo de deformação das faixas $u(\vec{x})$ diverge no limite termodinâmico para qualquer alcance σ da interação repulsiva. Isto significa que em nenhum caso a interação de longo alcance repulsiva é capaz de estabilizar a ordem posicional ou esmética, em um sistema a temperatura finita.

Para compreender melhor as propriedades físicas deste estado podemos calcular a função de correlação posicional, definida como:

$$\begin{aligned} g(x, y) &= \left\langle e^{ik_0(u(x,y)-u(0,0))} \right\rangle = e^{-\langle \frac{1}{2}k_0^2(u(x,y)-u(0,0))^2 \rangle} \\ &= e^{-k_0^2 \langle u(0,0)^2 - u(x,y)u(0,0) \rangle}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

O valor médio no expoente resulta:

$$\langle u(0,0)^2 - u(x,y)u(0,0) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} k_B T \int \int dk_x dk_y \frac{1 - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^4 + \gamma_{nl} k^{\sigma-2} k_y^4}, \quad (4.25)$$

para longos comprimentos de onda é possível aproximar a expressão anterior por:

$$\langle u(0,0)^2 - u(x,y)u(0,0) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} k_B T \int \int dk_x dk_y \frac{1 - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\gamma_x k_x^2 + \gamma_y k_y^{\sigma+2}}, \quad (4.26)$$

onde γ será igual a γ_{nl} se $\sigma < 2$ e igual a γ_y para $\sigma \geq 2$. É possível então calcular exatamente o expoente da correlação posicional nas direções principais como sendo:

$$\begin{aligned} \langle u(0,0)^2 - u(x,0)u(0,0) \rangle &= \frac{k_B T}{\gamma_x \sigma} \left(\frac{\gamma_x}{\gamma} \right)^{\frac{1}{2+\sigma}} \Gamma \left(\frac{2}{2+\sigma} \right) x^{\frac{\sigma}{\sigma+2}}, \\ \langle u(0,0)^2 - u(0,y)u(0,0) \rangle &= \frac{k_B T}{2\pi \sqrt{\gamma_x \gamma}} \cos \left(\pi + \pi \frac{\sigma}{4} \right) \Gamma \left(-\frac{\sigma}{2} \right) y^{\frac{\sigma}{2}}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Desta forma o comportamento da função de correlação posicional ao longo do eixo “ x ” perpendicular às faixas tem a forma:

$$g(x, 0) = e^{-\left(\frac{|x|}{\xi_{\perp}} \right)^{\frac{\sigma}{\sigma+2}}}, \quad (4.28)$$

onde $\xi_{\perp} = \left(k_0^2 \frac{k_B T}{\gamma_x \sigma} \left(\frac{\gamma_x}{\gamma} \right)^{\frac{1}{2+\sigma}} \Gamma \left(\frac{2}{2+\sigma} \right) \right)^{-\frac{\sigma+2}{\sigma}}$, é o comprimento de correlação na direção perpendicular às faixas. O decaimento da função de correlação na direção y , paralela às faixas, resulta então:

$$g(0, y) = e^{-\left(\frac{|y|}{\xi_{\parallel}} \right)^{\frac{\sigma}{2}}}, \quad (4.29)$$

onde $\xi_{\parallel} = \left(k_0^2 \frac{k_B T}{2\pi \sqrt{\gamma_x \gamma}} \cos \left(\pi + \pi \frac{\sigma}{4} \right) \Gamma \left(-\frac{\sigma}{2} \right) \right)^{-\frac{2}{\sigma}}$. Também é possível achar a função de correlação do campo $\phi(x, y)$, a partir da função de correlação de $u(x, y)$. Dentro da aproximação de modo unico pode-se

obter a função de correlação do parâmetro de ordem como sendo:

$$C(x, y) = \langle \phi(\vec{x})\phi(0) \rangle = \frac{1}{2}\phi_0^2 \cos(k_0 x)g(x, y). \quad (4.30)$$

Como observa-se, um aumento do alcance da interação repulsiva (diminuição do expoente σ) produz um aumento da correlação posicional. No entanto, vemos que a correlação posicional decai exponencialmente, o qual é de se esperar considerando a divergência da flutuação quadrática média posicional no limite termodinâmico.

Por outro lado, diferentemente da flutuação posicional quadrática média $\langle u^2(0) \rangle$, a flutuação orientacional média, como veremos a continuação, resulta finita ainda em sistemas infinitos espacialmente. Seja $\theta(\vec{x})$ o ângulo entre a direção do vetor de onda local, $\vec{k}_0 + k_0 \vec{\nabla} u(\vec{x})$, das faixas e o vector de orientação média \vec{k}_0 do sistema, então, pode-se mostrar que $\theta(\vec{x}) \approx \partial_y u(\vec{x})$. Desta forma, a flutuação quadrática média da orientação das faixas, $\theta(\vec{x})$, será:

$$\begin{aligned} \langle \theta^2(0, 0) \rangle &= \left\langle \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 \right\rangle = \frac{k_B T}{(2\pi)^2} \int \int dk_x dk_y \frac{k_y^2}{\gamma_x k_x^2 + \gamma k_y^{\sigma+2}} \\ &= \frac{k_B T}{\pi} \frac{1}{\sqrt{g_1 g}} \frac{\Lambda^{\frac{\sigma}{2}}}{\sigma}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

onde Λ representa o “cut-off” de grandes momentos. Portanto, levando em conta que o parâmetro de ordem orientacional G se define como:

$$G = \langle e^{in\theta} \rangle = e^{-\frac{1}{2}n^2 \langle \theta^2(0,0) \rangle}, \quad (4.32)$$

com $n = 2$ (dada a simetria do sistema de faixas), chegamos à conclusão de que o parâmetro de ordem orientacional G , também é finito no limite termodinâmico. Esse resultado mostra que no sistema analisado ainda que não exista a ordem posicional a temperatura finita, a ordem orientacional existe pelo menos em temperaturas baixas. Isto ultimo pode ser confirmado pelo cálculo direto da correlação orientacional, o qual resulta numa correlação finita ainda para pontos do sistema infinitamente afastados.

Considerando que todas as magnitudes de interesse tem sido calculadas, discutamos então os resultados obtidos até agora. Mostramos que independentemente do alcance da interação repulsiva uma fase com ordem posicional de longo alcance ou quase longo alcance é proibida em duas dimensões. Por outro lado, obtivemos que para flutuações orientacionais pequenas e para todo σ , uma fase com ordem orientacional de longo alcance é estável no limite termodinâmico. Este resultado aparentemente contradiz o teorema de Mermin-Wagner, o qual estabelece que em sistemas com interações de curto alcance, não pode acontecer

a quebra espontânea de uma simetria contínua em duas dimensões. Embora ambos resultados são corretos dentro dos limites das nossas aproximações, como veremos mais adiante a estabilidade da fase orientacional é corrigida no caso de sistemas de curto alcance, quando consideram-se outros tipos de excitações elementares do sistema de faixas além das ondas de deformação do padrão.

É conhecido da literatura [49] que nos sistemas de faixas além dos modos de Goldstone de deformação do padrão, existem outras excitações elementares que resultam relevantes para o estabelecimento da ordem orientacional no sistema. Tais excitações são as chamadas “deslocações” e como mostrado previamente [49] as mesmas são defeitos do padrão de faixas, que produzem uma mudança qualitativa importante na estabilidade da fase ordenada orientacionalmente. Embora este tipo de estudo não tem sido realizado considerando apropriadamente os efeitos de interações de longo alcance, é de se esperar que nestes sistemas igualmente os defeitos topológicos resultem relevantes no processo de estabelecimento da ordem orientacional.

Desta forma a próxima seção é dedicada a construção de uma teoria elástica, que partindo do Hamiltoniano “microscópico que descreve pequenas deformações do sistema de faixas (Eq. 4.21) permite incluir o papel dos defeitos topológicos relevantes no sistema. Diferentemente da teoria da fusão (“melting”) de sistemas faixas existente, a nova teoria deverá permitir a inclusão de interações de longo alcance ($\sigma < 2$) no campo de deformação das faixas. Já que é essa classe de sistemas o nosso principal objetivo no momento.

4.2 Teoria generalizada da fusão de sistemas clássicos de faixas

Como fica claro da análise da equação 4.21, só no caso $\sigma < 2$ a interação repulsiva de longo alcance resulta relevante para longos comprimentos de onda. Considerando então que o caso com interações de curto alcance foi compreendido há muito tempo, nessa seção vamos nos concentrar no estudo de sistemas de faixas com $\sigma < 2$. Uma forma possível de verificar os nossos resultados será analisar, se no limite $\sigma \rightarrow 2$ a nossa teoria reproduz a teoria de Toner e Nelson [49] da fusão de sistemas de faixas.

No caso com $\sigma < 2$ o Hamiltoniano efetivo de partida, para descrever o ordenamento posicional será:

$$\mathcal{H} = \frac{B}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (k_x^2 + \lambda^2 k^{\sigma-2} k_y^4) \hat{u}(\vec{k}) \hat{u}(-\vec{k}), \quad (4.33)$$

onde $B = \gamma_x$ e $\lambda^2 = \gamma_{nl}/\gamma_x$. Nesta seção achamos conveniente seguir a notação usada na referência [49] com o objetivo de facilitar a comparação dos nossos resultados com os obtidos previamente nesse trabalho.

Para estudar a mecânica estatística do campo u numa aproximação superior a teoria Gaussiana, necessitamos considerar além das realizações suaves do campo $u(\vec{r})$ outras excitações de baixa energia do sistema nas quais o campo $u(\vec{r})$ apresenta singularidades pontuais. Para estudar a mecânica estatística do

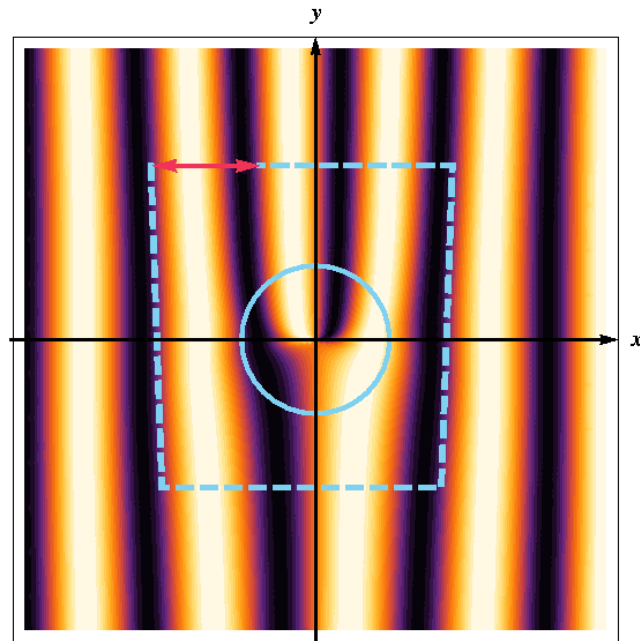


Figura 4.2: Gráfico de densidade correspondente a um padrão de faixas que apresenta uma deslocação. A circunferência central destaca o núcleo da deslocação e o contorno fechado, formado pela linha pontilhada e a seta, indicam a diferença no número de faixas a ambos lados da deslocação.

campo u numa aproximação superior a teoria Gaussiana, necessitamos considerar além das realizações suaves do campo $u(\vec{r})$ outras excitações de baixa energia do sistema nas quais o campo $u(\vec{r})$ apresenta singularidades pontuais. Essas excitações de baixa energia são chamadas de deslocações. Uma deslocação é um defeito num sistema perfeito de faixas, na classe de sistemas sob estudo a deslocação pode ser pensada como a terminação de um número par de faixas no meio de um sistema de faixas perfeito. Esta descrição é melhor entendida mediante a Figura 4.2 onde o desenho de uma deslocação é apresentado. O núcleo da deslocação, onde as faixas adicionadas terminam, foram circulares para destacar a região onde se tem a singularidade no campo de deformação.

A intensidade de uma deslocação é caracterizada pela integral de linha sobre um caminho fechado e orientado, em sentido anti-horário ao redor da deslocação, como o desenhado em linhas descontinuas terminando em uma dupla seta. A dupla seta sinaliza a diferença no número de faixas na parte superior e inferior

do contorno desenhado (ver Figura 4.2). Essa condição é expressa matematicamente como:

$$\oint \vec{\nabla} u \cdot d\vec{l} = md, \quad (4.34)$$

onde m representa um número inteiro e d representa o comprimento de modulação. É importante perceber que no caso em estudo, diferentemente do caso geral, um número ímpar de faixas (camadas) não pode formar uma deslocação, de outra forma a tendência natural do sistema de formar um padrão modulado simétrico seria violada e conseqüentemente tal configuração teria um custo energético muito alto. Isso significa que embora o parâmetro d represente usualmente a largura de só uma camada do padrão, no nosso caso como estamos forçados a adicionar pares de camadas, o parâmetro d será igual ao comprimento de modulação do padrão de faixas. Como veremos essa simples condição tem importantes conseqüências para as propriedades dinâmicas do sistema.

Para encontrar a forma particular de uma deslocação, em um sistema com energia livre dada pela equação (4.33), devemos resolver a seguinte equação de Euler:

$$-\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \hat{u}(-\vec{k})} = -(k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2}) \hat{u}(\vec{k}) = 0, \quad (4.35)$$

sujeita a condição (4.34). Considerando o fato de que o campo de deformação $u(\vec{x})$ deve satisfazer a condição (4.34) e ao mesmo tempo se manter como uma função univaluada vemos que é necessário introduzir uma descontinuidade nos valores da função $u(\vec{r})$ ao longo de uma linha que chamaremos de linha de corte. Para manter as convenções usuais vamos tomar a linha de corte como iniciando no centro da deslocação e indo até infinito ao longo do eixo “ y ” (ver Fig. 4.2). Desta forma é natural exigir que ao cruzar a linha de corte a função $u(\vec{r})$ apresente uma descontinuidade de valor md . Levando em conta essa exigência e a forma em que os operadores na equação de Euler atuam na vizinhança da linha de corte, percebemos que um termo de fonte deve ser agregado no membro direito da equação (4.35) para satisfazer a condição (4.34). O termo de fonte apropriado a ser adicionado, no espaço real, tem a forma $md \partial_x \delta(x) \Theta(y)$. Conseqüentemente a equação de Euler apropriada para descrever o campo de deformação no espaço de Fourier tem a forma:

$$-\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \hat{u}(-\vec{k})} = -(k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2}) \hat{u}_D(\vec{k}) = md \frac{k_x}{k_y}. \quad (4.36)$$

A solução de tal equação será:

$$\hat{u}_D(\vec{k}) = -md \frac{k_x}{k_y} \frac{1}{(k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \quad (4.37)$$

Se agora, generalizamos este resultado ao caso onde se tem um campo de deslocamentos $m(\vec{r})$, o campo de deformação resultante pode ser formalmente escrito como:

$$\hat{u}_D(\vec{k}) = G(-\vec{k})\hat{m}(\vec{k}), \quad (4.38)$$

onde a função de Green $G(\vec{k})$ tem a forma:

$$G(\vec{k}) = -d \frac{k_x}{k_y} \frac{1}{(k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \quad (4.39)$$

Para encontrar o Hamiltoniano efetivo que descreve o sistema de deslocamentos em interação primeiramente re-escrevemos o Hamiltoniano efetivo no forma simétrica:

$$\mathcal{H} = \frac{B}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (h_1(\vec{k})h_1(-\vec{k}) + \lambda^2 h_2(\vec{k})h_2(-\vec{k})), \quad (4.40)$$

onde os campos componentes serão $h_1(\vec{k}) = ik_x G(-\vec{k})\hat{m}(\vec{k})$ e $h_2(\vec{k}) = -k_y^2 k^{\frac{\sigma}{2}-1} G(-\vec{k})\hat{m}(\vec{k})$. Calculemos então a forma explícita dos campos componentes. O primeiro campo pode ser re-escrito na forma:

$$h_1(\vec{k}) = \left(-i \frac{d}{k_y} + \frac{id\lambda^2 k_y^3 k^{\sigma-2}}{k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2}} \right) \hat{m}(\vec{k}). \quad (4.41)$$

Olhando cuidadosamente esta expressão observamos qual é o preço de ter introduzido a descontinuidade na função $u_D(\vec{r})$ para manter a função univaluada. Descontinuidades fictícias aparecem em $h_1(\vec{k})$ devido ao termo independente de k_x e proporcional k_y^{-1} . Para corrigir esta descontinuidade artificial é preciso desconsiderar este termo em $h_1(\vec{k})$. Levando estas considerações em conta é direto obter que:

$$h_1(\vec{k}) = \left(\frac{id\lambda^2 k_y^3 k^{\sigma-2}}{k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2}} \right) \hat{m}(\vec{k}). \quad (4.42)$$

O problema previamente discutido não é exclusivo do método apresentado, na verdade o mesmo problema aparece no trabalho de Toner e Nelson ([49]). A diferença entre ambos encontra-se em que no método usado por Toner e Nelson esta questão não resulta evidente devido a que o calculo é feito no espaço real e as correspondentes singularidades que resultam no calculo são diretamente desconsideradas sem nenhum

comentário. Tendo esclarecido a fonte do problema podemos agora lidar com o mesmo toda vez que apareça no futuro.

Podemos proceder agora com o cálculo de $h_2(\vec{k})$. Neste caso é direto chegar a que:

$$h_2(\vec{k}) = \left(\frac{d k_y k_x k^{\frac{\sigma}{2}-1}}{k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2}} \right) \hat{m}(\vec{k}). \quad (4.43)$$

Usando os resultados obtidos para $h_1(\vec{k})$ e $h_2(\vec{k})$ na equação (4.40) obtemos o Hamiltoniano efetivo:

$$\mathcal{H} = \frac{B}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{d^2 \lambda^2 k_y^2 k^{\sigma-2}}{(k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})} \hat{m}(\vec{k}) \hat{m}(-\vec{k}), \quad (4.44)$$

o qual parcialmente descreve o campo de deslocações interagentes. Para completar nossa construção do Hamiltoniano efetivo para deslocações em interação é importante perceber que ainda deslocações isoladas tem um custo energético finito. Consequentemente é agregado uma contribuição quadrática com constante de interação fixa $E_d a^2$. Desta forma a forma completa do Hamiltoniano efetivo para o sistema de deslocações tem a forma:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(\frac{d^2 B \lambda^2 k_y^2 k^{\sigma-2}}{k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2}} + 2E_d a^2 \right) \hat{m}(\vec{k}) \hat{m}(-\vec{k}). \quad (4.45)$$

A forma do Hamiltoniano efetivo obtido é exatamente a mesma que aquela obtida no trabalho de Toner e Nelson (ref. [49]) quando fazemos $\sigma = 2$ e levamos em conta as diferenças de notação dos eixos. Esse fato sinaliza que estamos no caminho certo para a construção de uma teoria generalizada da fusão de sistemas de faixas quando interações de longo alcance estão presentes. Como consequência direta da equação (4.45) obtemos que:

$$\langle \hat{m}(\vec{k}) \hat{m}(-\vec{k}) \rangle = \frac{k_B T (k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}{B d^2 \lambda^2 k_y^2 k^{\sigma-2} + 2E_d a^2 (k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \quad (4.46)$$

Agora podemos calcular a correlação orientacional considerando não somente flutuações suaves da orientação das faixas, senão também o efeito dos defeitos em interação. Primeiramente usaremos o fato de que para pequenos desvios das faixas respeito da orientação média o ângulo de orientação das faixas é calculado como $\theta(\vec{r}) = \partial_y u(\vec{r})$. Considerando então que o campo de deformação $u(\vec{r})$ pode ser decomposto na soma de um campo que descreve as flutuações suaves $\phi(r)$ mais a contribuição do campo de deformação associado ao conjunto de deslocações temos:

$$u(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) + u_D(\vec{r}). \quad (4.47)$$

Considerando a independência estatística dos campos $\phi(\vec{r})$ e $u_D(\vec{r})$ teremos que:

$$\langle \hat{u}(\vec{k})\hat{u}(-\vec{k}) \rangle = \langle \hat{\phi}(\vec{k})\hat{\phi}(-\vec{k}) \rangle + \langle \hat{u}_D(\vec{k})\hat{u}_D(-\vec{k}) \rangle. \quad (4.48)$$

As funções de correlação que precisamos: $\langle \hat{\phi}(\vec{k})\hat{\phi}(-\vec{k}) \rangle$ e $\langle \hat{u}_D(\vec{k})\hat{u}_D(-\vec{k}) \rangle$ podem ser simplesmente calculadas usando os resultados obtidos previamente. Como consequência da equação (4.33) podemos concluir que:

$$\langle \hat{\phi}(\vec{k})\hat{\phi}(-\vec{k}) \rangle = \frac{k_B T}{B(k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \quad (4.49)$$

Por outro lado, considerando as equações (4.38) e (4.46) é direto obter que:

$$\begin{aligned} \langle \hat{u}_D(\vec{k})\hat{u}_D(-\vec{k}) \rangle &= \frac{k_B T}{Bd^2 \lambda^2 k_y^2 k^{\sigma-2} + 2E_d a^2 (k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})} \\ &\times d^2 \frac{k_x^2}{k_y^2 (k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Depois deste pequeno desvio, podemos voltar ao nosso objetivo primário, o calculo da função de correlação orientacional. Considerando a definição do campo de orientações $\theta(\vec{r})$, fica claro que a correlação $\langle \hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}) \rangle$ pode ser escrita como:

$$\langle \hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}) \rangle = k_y^2 \langle \hat{u}(\vec{k})\hat{u}(-\vec{k}) \rangle. \quad (4.51)$$

Usando então os resultados para a função de correlação $\langle \hat{u}(\vec{k})\hat{u}(-\vec{k}) \rangle$ podemos chegar após algumas manipulações algébricas a que:

$$\langle \hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}) \rangle = \frac{k_b T (d^2 + 2E_d a^2 k_y^2 / B)}{Bd^2 \lambda^2 k_y^2 k^{\sigma-2} + 2E_d a^2 (k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \quad (4.52)$$

Assim a função de correlação no limite de longos comprimentos de onda vem dada pela expressão seguinte:

$$\langle \hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}) \rangle = \frac{k_b T}{B\lambda^2 k_y^2 k^{\sigma-2} + 2E_d a^2 k_x^2 / d^2}. \quad (4.53)$$

Este ultimo resultado implica que o Hamiltoniano efetivo para o campo de orientação $\hat{\theta}(\vec{k})$ será:

$$\mathcal{H}_{oG} = \frac{1}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(B\lambda^2 k_y^2 k^{\sigma-2} + \frac{2E_d a^2 k_x^2}{d^2} \right) \hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}). \quad (4.54)$$

Esse último resultado amerita alguns comentários. Primeiramente observamos que de fato o Hamiltoniano efetivo obtido coincide com o obtido na referência [49] quando $\sigma = 2$. Isso implica que como esperado existe continuidade no comportamento físico do sistema variando σ . Por outro lado é fácil mostrar que só para $\sigma < 2$ existe uma fase ordenada orientacionalmente para temperaturas baixas o suficiente. É possível chegar nessa conclusão mediante o estudo da flutuação orientacional quadrática média $\langle \theta^2 \rangle$, a qual é calculada mediante a integração direta da expressão (4.53). É possível mostrar que no caso $\sigma < 2$ as divergências infravermelhas são integráveis o que significa que a ordem orientacional é estável no limite termodinâmico.

Agora que temos o Hamiltoniano orientacional a nível Gaussiano é importante recuperar o Hamiltoniano geral que preserva a simetria local frente a rotações de 2π tendo o Hamiltoniano (4.54) como aquele que se obtém numa expansão tipo onda de spin. Com essa finalidade, ao invés de rastrear desde o início o efeito das contribuições de mais alta energia do Hamiltoniano original no nosso modelo efetivo final, o qual pode ser bem complicado. Poderíamos reconstruir completamente o Hamiltoniano orientacional considerando as simetrias do padrão de faixas. Neste ponto vamos seguir de perto o caminho utilizado na referência [50].

Para identificar as simetrias reais de nosso sistema devemos notar que a célula básica do padrão de faixas é composta por uma dupla camada de densidades opostas e com uma largura muito menor que o comprimento de correlação orientacional transversal como mostrado na Figura 4.1. A princípio qualquer configuração de baixa energia do sistema de faixas pode ser construída a partir destas células básicas. É importante notar que em contraste com os cristais líquidos nemáticos, nos quais o Hamiltoniano é invariante frente a rotações de π da sua célula básica (nematógenos), no nosso caso o Hamiltoniano é só invariante frente a rotações de 2π da célula básica. Esse simples fato, realmente reflete a profunda diferença física entre os sistemas de faixas sob estudo e os cristais líquidos nemáticos.

A célula básica das nossas faixas carregam um tipo de “momento dipolar”, dado que as mesmas estão compostas por pares com densidades opostas. Isso faz com que o Hamiltoniano efetivo para a orientação local das células dipolares contenha dois tipos de contribuições. Uma contribuição local, proveniente das propriedades elásticas do padrão e outra não local que aflora devido a interação dipolar generalizada entre os “dipolos” locais.

Lembrando que em escalas da ordem do comprimento de modulação existe uma anisotropia natural nas constantes elásticas locais, o qual significa que as propriedades elásticas ao longo da modulação e perpendicular a ela não são as mesmas. Podemos concluir que a forma geral do Hamiltoniano efetivo que preserva

a simetria orientacional certa e contem a interação dipolar generalizada será:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_g &= \frac{1}{2} \int d^2x \left[g_1 (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + g_2 (\vec{\nabla} \times \vec{n})^2 \right] + \frac{g}{2} \int d^2x \int d^2x' \Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \left(\frac{\vec{n}(\vec{x}) \cdot \vec{n}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} \right. \\ &\quad \left. - (\sigma + 2) \frac{\vec{n}(\vec{x}) \cdot (\vec{x} - \vec{x}') \vec{n}(\vec{x}') \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+4}} \right). \end{aligned} \quad (4.55)$$

onde $\vec{n}(\vec{x})^2 = 1$ e $\Omega(\vec{x})$ representa uma função de “cutoff” de distancias curtas introduzida para evitar divergências artificiais na parte não local do Hamiltoniano. Os coeficientes g_1 e g_2 são considerados diferentes em geral, levando em conta que em escalas da ordem do comprimento de modulação as constantes elásticas locais são diferentes ao longo das direções perpendicular e paralela as faixas. A forma obtida para a contribuição local é característica de sistema cujos componentes apresentam uma simetria frente a rotações de 2π e a mesma já é conhecida na literatura [52].

Por outro lado o parâmetro g mede a intensidade da interação dipolar generalizada entre os vetores diretores do campo para pontos afastados o suficientes no sistema [50]. É simples provar que na aproximação de ondas de spin o Hamiltoniano geral (4.55) se reduz a expressão (4.54). Notemos que essa relação permite relacionar os coeficientes elásticos g_1 e g_2 com as propriedades locais do padrão de faixas, como o custo energético de uma deslocação, o seu radio e outras constantes elásticas que aparecem na equação (4.21). De fato é possível mostrar que:

$$\begin{aligned} g_1 &= \gamma_y \\ g_2 &= \frac{2E_d a^2}{d^2}. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Para obter o valor de g_1 podemos analisar o caso em que $\sigma > 2$, neste caso a interação não local é subdominante e como consequência é direto chegar no resultado anterior. Olhando agora para a interação não local percebemos que neste caso a constante de interação g no Hamiltoniano efetivo (4.55) como esperado está somente relacionada às propriedades não-locais (γ_{nl}) do Hamiltoniano original (4.21). É simples mostrar que $g = c\gamma_{nl}$ onde c é simplesmente um fator numérico proveniente da transformada de Fourier que relaciona as expressões (4.55) e (4.54).

A discussão previa acerca das simetrias do padrão de faixas e o mapeamento entre os Hamiltonianos (4.54) e (4.55) permite concluir que na classe de sistemas de faixas sob estudo o processo de fusão da ordem orientacional é governado pelo Hamiltoniano efetivo (4.55). Isto contrasta com a forma usual do Hamiltoniano efetivo proposto por Toner e Nelson [49] para descrever os sistemas de faixas. Nessa teoria se assume que os sistemas de faixas comportam-se efetivamente como um cristal líquido nemático e consequentemente,

o Hamiltoniano efetivo para o vetor diretor das faixas tem a forma do conhecido Hamiltoniano de Frank [46]:

$$\mathcal{H}_n = \frac{1}{2} \int d^2x \left\{ K_1 (\vec{\nabla} \cdot \vec{n}(\vec{x}))^2 + K_2 \left[\vec{n}(\vec{x}) \times (\vec{\nabla} \times \vec{n}(\vec{x})) \right]^2 \right\}. \quad (4.57)$$

Embora os Hamiltonianos (4.55) e (4.57) possuam a mesma forma funcional no limite de pequenos desvios podemos perceber que de fato a forma funcional completa em ambos é compatível com simetrias diferentes do vetor diretor como esperado.

A continuação usamos o resultado conhecido da literatura [49] de que para comprimentos de onda muito maiores que o comprimento de modulação, os coeficientes elásticos g_1 e g_2 na equação (4.55) se renormalizam e passam a tomar valores iguais na região crítica, onde a anisotropia do sistema é ainda pequena. Isto como veremos permite re-escrever a parte local do Hamiltoniano efetivo de forma muito mais simples. Por outro lado, a interação dipolar renormaliza-se de forma trivial. Isto é um fato simples de se compreender devido a que se considerarmos células básicas maiores (compostas por um dado número de células básicas elementares), devido ao princípio de superposição, ainda a energia de interação dipolar será a contribuição dominante sobre qualquer outra possível interação residual não local. Consequentemente o Hamiltoniano “coarse grained” efetivo apropriado para estudar as propriedades orientacionais do nosso modelo na região crítica será:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_o = & \frac{1}{2} \int d^2x g_1 (\partial_\mu \vec{n})^2 + \frac{g}{2} \int d^2x \int d^2x' \Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \left(\frac{\vec{n}(\vec{x}) \cdot \vec{n}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} \right. \\ & \left. - (\sigma + 2) \frac{\vec{n}(\vec{x}) \cdot (\vec{x} - \vec{x}') \vec{n}(\vec{x}') \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+4}} \right). \end{aligned} \quad (4.58)$$

A dedução apresentada mostra que o Hamiltoniano anterior é o Hamiltoniano efetivo orientacional a ser usado quando temos interações repulsivas de suficiente longo alcance. O fato de sistemas com $\sigma < 2$ pertencer a uma classe de universalidade diferente de aqueles com $\sigma \geq 2$ não era até agora um resultado demonstrado na literatura [49]. Embora varios autores tem discutido o possível efeito da presença de interações de longo alcance sob a fusão da ordem orientacional dos padrões de faixas, a teoria aceita pela comunidade é aquela desenvolvida por Toner e Nelson na qual não há dependência do alcance da interação repulsiva.

Assim as proximas seções estarão dedicadas a estudar a física resultante do nosso modelo efetivo em diferentes aproximações, assim como à comparação final dos resultados teoricos com os obtidos via simulações numéricas.

4.2.1 O Modelo XY generalizado para o sistema de faixas

É simples perceber que o Hamiltoniano efetivo obtido no estudo da ordem orientacional, coincide com aquele que se construiria para descrever um modelo clássico de spins XY que inclui uma interação dipolar generalizada. Desta forma podemos nos beneficiar de todos os resultados disponíveis na literatura sobre essa classe de modelos. Em particular do trabalho de Maier e Schwabl [53] na qual é estudado mediante as técnicas do grupo de renormalização as propriedades críticas desta classe de sistemas.

Iniciaremos o estudo do nosso Hamiltoniano efetivo estudando a estabilidade da fase ordenada. Para isso começamos escrevendo o Hamiltoniano 4.58 na aproximação Gaussiana, parametrizando a orientação dos rotores em termos do angulo de orientação dos mesmos em referencia ao angulo de orientação media do sistema. Na aproximação Gaussiana só pequenos desvios da orientação media são permitidos e assim é simples chegar em:

$$\Delta\mathcal{H} = \frac{g_1}{2} \int d^2x (\vec{\nabla}\theta)^2 + \frac{g}{2} \int \int d^2x d^2x' \left(\frac{\theta(\vec{x})\theta(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} - \frac{(\sigma+2)(x-x')^2\theta(\vec{x})\theta(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+4}} \right), \quad (4.59)$$

onde a direção “x” foi considerada como a direção de orientação media dos rotores, sem perda de generalidade. Esta expressão no espaço inverso se escreve como:

$$\Delta\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (g_1k^2 + gk^{\sigma-2}k_x^2) \hat{\theta}(\vec{k})\hat{\theta}(-\vec{k}). \quad (4.60)$$

Desta forma, seguindo o caminho da seção (4.1.1) chegamos a

$$\langle\theta^2(0)\rangle = k_B T \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1}{g_1k^2 + gk^{\sigma-2}k_x^2} \quad (4.61)$$

A primeira coisa que é possível observar da expressão obtida é que para $\sigma \geq 2$ as flutuações são dominadas pelo termo da interação de curto alcance e neste caso, ainda com a presença da interação de longo alcance, as flutuações têm divergências logarítmicas com o tamanho do sistema. O que faz com que neste caso se espere uma transição do tipo K.T. para temperaturas baixas o suficiente. Por outro lado quando $\sigma < 2$, é direto mostrar que $\langle\theta^2(0)\rangle$ é finito no limite termodinâmico, obtendo como resultado aproximado:

$$\langle\theta^2(0)\rangle \approx \frac{k_B T}{\pi} \frac{1}{\sqrt{g_1g}} \frac{\Lambda^{\frac{2-\sigma}{2}}}{(2-\sigma)}, \quad (4.62)$$

onde Λ representa o “cut-off” no espaço de momentos. É possível então, nesta aproximação, calcular diretamente o parâmetro de ordem nemático

$$G = \langle e^{in\theta} \rangle = e^{-\frac{1}{2}n^2 \langle \theta^2(0) \rangle}, \quad (4.63)$$

com $n = 2$. Observando-se que neste caso o parâmetro G terá um valor finito na fase de baixa temperatura para $\sigma < 2$ e zero para $\sigma \geq 2$, no limite termodinâmico.

É importante notar que no nosso modelo quando a quebra da simetria acontece, os rotores apontam preferencialmente numa direção e sentido dados. Portanto é direto caracterizar essa transição com um parâmetro de ordem definido como a média $\langle \cos(\theta) \rangle$. O vínculo com o parâmetro de ordem nemático do sistema original se acha percebendo que por cada interfase (rotor) orientada no ângulo θ do nosso modelo, existe no problema inicial além da interfase original uma outra orientada na direção $\theta - \pi$. Assim se no nosso modelo a probabilidade de orientação dos rotores é $P(\theta)$ no sistema original que inclui todas as interfaces será $(P(\theta) + P(\theta - \pi))/2$.

Quando a transição acontece, a probabilidade de orientação passa de ser uma constante a ter um perfil com um máximo num θ dado ($\theta = 0$ por exemplo), e desta forma considerando a simetria rotacional do sistema, $P(\theta)$ teria uma expansão da forma $P(\theta) = A + B \cos(\theta) + C \cos(2\theta) + \dots$. Na transição deixarão de ser nulos os coeficientes B, C , etc. Daqui é direto mostrar que $\langle \cos(\theta) \rangle = \pi B$ e $\langle \cos(2\theta) \rangle = \pi C$ ou seja quando a simetria é quebrada no modelo de rotores também é quebrada no sistema de interfaces originais. Mas em princípio como B e C são parâmetros diferentes a variação deles respeito da temperatura não tem por quê ser a mesma.

Concluindo, ainda que o parâmetro $M = \langle \cos(\theta) \rangle$ seja natural para detectar a transição a um estado anisotrópico pela forma em que o modelo de rotores foi construído, é possível e tem sentido físico ainda fazer a conexão com o parâmetro nemático original $G = \langle \cos(2\theta) \rangle$. Devido a que ambos os parâmetros começam a ter valores finitos à mesma temperatura.

4.3 Comportamento crítico e resultados exatos

Até agora mostramos como na aproximação elástica, válida para baixas temperaturas, só sistemas com interações repulsivas de suficiente longo alcance ($\sigma < 2$) são capazes de estabilizar a fase nemática. Isto aconteceu devido a que a interação repulsiva gera uma interação efetiva atrativa entre domínios a qual se for suficientemente forte estabiliza uma fase com ordem orientacional de longo alcance[50].

Num trabalho de Maier e Schwabl [53] é resolvido o modelo chamado por eles de XY dipolar, que coincide com o nosso modelo (equação 4.58) para $\sigma = 1$. Neste trabalho se apresenta um tratamento em detalhe do grupo de renormalização não perturbativo do modelo mencionado. Chegando-se a obter vários resultados que têm aplicação direta no nosso problema. No mesmo trabalho se mostra como o caráter anisotrópico da interação dipolar não muda os expoentes críticos do modelo quando comparado com um modelo isotrópico atrativo do mesmo alcance. O modelo isotrópico é bem mais conhecido e está resolvido para um alcance geral σ [54] usando técnicas do grupo de renormalização perturbativo. Assim o Hamiltoniano isotrópico que terá os mesmos expoentes críticos que (4.58) é:

$$\mathcal{H} = - \int \int d^2 \vec{x} d^2 \vec{x}' \frac{\vec{e}(\vec{x}) \cdot \vec{e}(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}}. \quad (4.64)$$

Daqui usando os resultados prévios da literatura [53, 54] se conclui que para $\sigma < 2$ existe um ponto crítico num certo valor de temperatura. Porém de acordo com os resultados de Maier e Schwabl [53], interessante-mente o comprimento de correlação (ξ) perto de T_c diverge exponencialmente:

$$\xi \propto \exp\left(\frac{b}{\sqrt{\tau}}\right), \quad (4.65)$$

com $\tau = |T_c - T|$. A magnetização $\langle \cos(\theta) \rangle$ perto do ponto crítico se comporta na forma:

$$M = \langle \cos(\theta) \rangle \propto \xi^{-(2-\sigma)/2}, \quad (4.66)$$

com $T < T_c$. A relação de escala anterior implica que a magnetização vai a zero exponencialmente quando T se aproxima de T_c . Assim mesmo a susceptibilidade orientacional diverge como:

$$\chi \propto \xi^\sigma, \quad (4.67)$$

na região crítica. Além disto, no trabalho mencionado o conjunto completo de expoentes críticos é achado o que pode ser imediatamente transportado para o nosso caso.

Vamos estudar agora o parâmetro de ordem nemático $G = \langle \cos(\theta) \rangle$ para o sistema original. O cálculo do comportamento crítico de G via grupo de renormalização é uma tarefa complicada devido a que no modelo usado G não é o parâmetro de ordem natural do modelo. Como consequência decidimos proceder da seguinte forma. Na fase ordenada, os rotores do nosso sistema estão submetidos a um campo efetivo h na

direção x que tem uma variação não trivial com a temperatura. Desta forma

$$P(\theta) = \frac{1}{Z} \exp(\beta h(\beta) \cos(\theta)), \quad (4.68)$$

com $Z = \int_0^{2\pi} \exp(\beta h(\beta) \cos(\theta)) d\theta$. Daqui é direto obter que perto da transição ($\beta h(\beta) \rightarrow 0$) temos

$$M \propto h, \quad G \propto h^2, \quad (4.69)$$

ou escrito de outra maneira $G \propto M^2$. Ainda que num tratamento exato o expoente dessa relação seja corrigido, a relação potencial entre as magnitudes M e G ainda significaria que

$$G \propto \exp\left(-\frac{b}{\sqrt{\tau}}\right), \quad (4.70)$$

com $\tau = T_c - T$. Um comportamento diferente do proposto não é de se esperar já que como foi mostrado pelo grupo de renormalização não perturbativo [53], no modelo estudado todas as magnitudes termodinâmicas relevantes tem um comportamento exponencial perto do ponto crítico.

Uma característica interessante dos resultados do grupo de renormalização desenvolvido é que os expoentes críticos calculados e o comportamento do comprimento de correlação, segundo Maier e Schawabl [53], são exatos em qualquer ordem da teoria de perturbações [53]. Ou seja os resultados apresentados dentro desta teoria em principio são exatos.

4.4 Resultados de simulações numéricas

Com o objetivo de testar qualitativamente os resultados teóricos obtidos, foram feitas simulações de dinâmica de Langevin para um sistema com um Hamiltoniano microscópico do tipo 4.1 em duas dimensões. Este tipo de modelos desenvolve uma fase de faixas, na região certa do espaço de parâmetros, e é exatamente nesta classe de modelos que a nossa teoria da fusão de faixas deveria funcionar. A equação de Langevin para o parâmetro de ordem local $\phi(\vec{x})$ se escreve no espaço de Fourier como:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(\vec{k}, t) = -\mathcal{A}_\alpha(k) \phi(\vec{k}, t) - u[\phi^3]_F(\vec{k}, t) + \eta(\vec{k}, t), \quad (4.71)$$

onde $\mathcal{A}_\alpha(k)$ é o conhecido espectro de flutuações que aparece como resultado da transformada de Fourier dos termos quadráticos no Hamiltoniano microscópico original (equação 4.4). Assim mesmo, $[\phi^3]_F(\vec{k}, t)$

representa a transformada de Fourier del termino $[\phi^3]_F(\vec{k}, t)$ e $\eta(\vec{k}, t)$ representa um ruído Gaussiano branco com media zero e correlações $\langle \eta(\vec{k}, t) \eta(\vec{k}', t') \rangle = (2\pi)^2 2T \delta(\vec{k} + \vec{k}') \delta(t - t')$, onde T representa a temperatura efetiva do banho térmico. Foram usadas duas formas específicas das funções $\mathcal{A}_\alpha(k)$, a primeira:

$$\mathcal{A}_3(k) = a_2(k - k_0)^2 - r, \quad (4.72)$$

onde a_2 e r são constantes, contem a dependência linear da interação isotrópica dipolar ($\sigma = 3$) com o módulo do vetor de onda k . A segundo espectro de flutuações utilizado nas simulações foi:

$$\mathcal{A}_1(k) = a_2(k^2 + 2k_0^3/k - 3k_0^2) - r, \quad (4.73)$$

no qual novamente a_2 e r representam constantes. Notemos neste caso o espectro de flutuações contem a presença de uma interação repulsiva do tipo Coulomb devido à presença do termo proporcional a $1/k$ em duas dimensões. Os parâmetros livres foram escolhidos de forma que ambos espectros de flutuações tivessem a mesma forma perto do mínimo dos espectros de flutuações. Com esse objetivo foi fixado $a_2 = 1$ para o sistema dipolar e $a_2 = 1/3$ para o sistema com interações de Coulomb. Em ambos casos foi fixado $r = 1$ e $k_0 = 1$.

A simulação numérica utilizou um esquema numérico implícito de primeira ordem na solução da equação (4.71), um procedimento que garante boa estabilidade numérica ainda quando é utilizado como passo de tempo $dt = 0.1$, como se mostra em trabalhos anteriores [17, 55]. Na sua forma adimensional, a periodicidade das faixas é fixada pela constante da rede dx numa rede construída com dimensão linear igual a $L = MN$, de forma que os vetores de onda da rede se escrevam como $\vec{k} = (k_x/dx, k_y/dx)$ com $k_i = 2\pi n_i/L$ e $dx = \pi/M$. Nesse esquema, o comprimento médio das faixas cobre M sítios de rede e as dimensões lineares do sistema contem em média N faixas duplas. Foi fixado M ($M = 11$) num valor suficientemente grande para garantir os mínimos efeitos da rede possíveis preservando assim a isotropia do modelo.

Inicialmente foi feito uma estimação dos tempos que demora o sistema para equilibrar e para se decorrelacionar partindo de condições iniciais desordenadas as diferentes temperaturas de interesse. A seguir foi feito um estudo sob resfriamento lento o qual mostrou que para temperaturas menores que $T \simeq 0.59$ ($T \simeq 0.45$), o sistema com interação dipolar (Coulomb) encontra-se na fase de baixa temperatura ordenada orientacionalmente para todos os tamanhos de sistemas estudados. Acima destas temperaturas as configurações mostram que o sistema está num estado normalmente chamado de “líquido de faixas”, onde tanto a

correlação posicional quanto a orientacional são finitas. Desta forma para testar qualitativamente as nossas predições teóricas, focamos nosso estudo numérico nas temperaturas $T = 0.57$ para o sistema com interação dipolar e $T = 0.43$ para o sistema com interação de Coulomb. As temperaturas selecionadas representam aproximadamente $0.97T_c$ e $0.96T_c$ para o sistema dipolar e Coulombiano respectivamente. Os tamanhos de sistemas utilizados vão desde $(12 \times 11)^2$ até $(66 \times 11)^2$. A ordem orientacional é quantificada através do campo de vetores diretores locais $\vec{v}(\vec{x}) = \vec{\nabla}\phi(\vec{x})/|\vec{\nabla}\phi(\vec{x})|$ a partir do qual é possível calcular o parâmetro $Q = \langle \cos 2\theta(\vec{x}) \rangle$ e a sua correspondente susceptibilidade χ , onde $\theta(\vec{x})$ é a orientação angular do vetor diretor local.

De acordo com os nossos resultados teóricos é de se esperar que no limite de grandes tamanhos do sistema, a susceptibilidade orientacional para um sistema com interação dipolar ($\sigma = 3$) e para um sistema com interação de Coulomb ($\sigma = 1$) tenha comportamentos qualitativamente diferentes para $T < T_c$. No caso Coulombiano, a natureza da transição de segunda ordem implica que a susceptibilidade terá um limite finito quando o numero de sítios da rede $N \rightarrow \infty$. Por outro lado, para a interação dipolar a transição deveria ser do tipo K.T. o qual implica um aumento monotônico de χ com o tamanho do sistema que diverge no limite termodinâmico para todo $T < T_{KT}$.

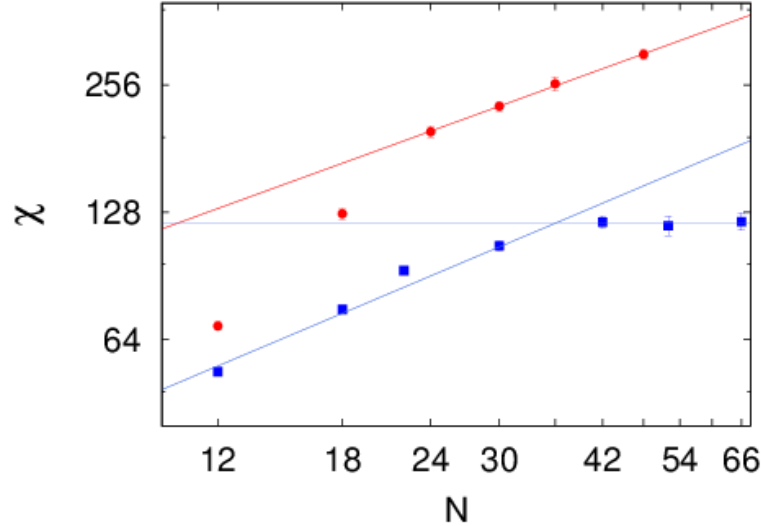


Figura 4.3: Susceptibilidade orientacional do modelo Coulombiano (quadrados azuis) e dipolar (pontos vermelhos) como função da dimensão linear do sistema em escala Log-Log. As linhas contínuas se correspondem com leis de potencias com expoentes 0.7 (linha inferior) e 0.6 (linha superior).

Os resultados da susceptibilidade orientacional como função do tamanho linear do sistema ($N = L/11$), obtidos usando o protocolo de simulação numérica anteriormente explicado, mostram-se na Figura

4.3. Foram consideradas no estudo numérico somente as duas temperaturas mencionadas anteriormente, para as quais o sistema se encontra na fase de baixa temperatura. Embora as limitações computacionais impediram alcançar grandes tamanhos de sistema, é claramente observado que a susceptibilidade do modelo com interação de Coulomb ($\sigma = 1$) primeiramente cresce com N mas eventualmente tem uma mudança no seu crescimento e satura num valor fixo para tamanhos maiores. Por outro lado, a susceptibilidade no sistema com interação dipolar ($\sigma = 3$) para N grande o suficiente mostra um crescimento tipo lei de potencia com as dimensões do sistema, um comportamento consistente com uma fase crítica do tipo K.T.. É claro que não temos elementos suficientes para concluir que χ não irá saturar para maiores N 's, mas a diferença de tendências em ambos sistemas, para valores equivalentes dos parâmetros no Hamiltoniano é uma forte indicativa de que de fato os resultados teóricos são qualitativamente corretos.

4.5 Conclusões

Neste capítulo respondemos questões em aberto até o momento sobre as propriedades topológicas das fases de faixas em sistemas com interações competitivas [50]. Primeiramente foi mostrado que ainda na presença de interações de longo alcance $1/r^\sigma$ uma fase cristalina de longo alcance ou de quase longo alcance é proibida em duas dimensões. Que este tipo de fases não existe em duas dimensões já foi discutido na literatura, porém nunca tinha sido mostrado explicitamente para interações de longo alcance.

Por outro lado, foi feita uma generalização da teoria de fusão de sistemas de faixas. A importância deste desenvolvimento vai além dos sistemas sob estudo neste capítulo. Como veremos no próximo capítulo a presente teoria permite de forma simples a inclusão e o tratamento de flutuações quânticas no modelo. Nesse sentido a técnica desenvolvida apresenta uma aplicabilidade muito maior que aquela considerada padrão até o momento [49].

Os resultados apresentados esclarecem as características físicas da fase nemática em sistemas isotrópicos com interações competitivas. Primeiramente foi mostrado que se a interação repulsiva não for de suficiente longo alcance ($\sigma \geq 2$), as flutuações orientacionais impedem a estabilidade da fase nemática levando o sistema à classe de universalidade K.T., bem conhecida na literatura. No entanto, quando ($\sigma < 2$) a interação efetiva entre os domínios é forte o suficiente para ainda em duas dimensões estabilizar a fase nemática [50].

O Hamiltoniano efetivo obtido para descrever a fase nemática é o mesmo que para um sistema de rotores que além de uma interação de curto alcance ferromagnética possui uma interação dipolar generalizada. Usando resultados conhecidos para este sistema XY dipolar fomos capazes de prever que a transição

nemática nestes sistemas é de segunda ordem. No entanto as propriedades críticas, segundo a literatura [53] apresentam características inusuais, já que ao invés de variar como leis de potências perto do ponto crítico, neste caso, as magnitudes de interesse têm um comportamento exponencial. O cálculo dos expoentes críticos parametrizados em termos do comprimento de correlação no modelo de rotores é possível. De fato mediante o uso da teoria do grupo de renormalização, os expoentes assim como o comportamento do comprimento de correlação perto de T_c são calculados de forma exata [53]. Portanto, considerando que o modelo efetivo proposto descreve corretamente as interações orientacionais no sistema de faixas, temos resultados exatos a qualquer ordem em teoria de perturbações para o comprimento de correlação e para os expoentes críticos das magnitudes de interesse. Neste contexto, foi argumentado mediante uma análise simples por quê é de se esperar que o parâmetro de ordem nemático para o sistema de faixas se anule exponencialmente perto da temperatura de transição nemática quando esta existe.

Para finalizar foram feitos estudos numéricos de dinâmica de Langevin, em sistemas formadores de faixas, para testar qualitativamente as previsões teóricas. Os resultados de simulação mostraram transições de fase qualitativamente diferentes nos casos $\sigma < 2$ e $\sigma > 2$. No caso com interação Coulombiana ($\sigma = 1$), os resultados são consistentes com a existência de uma transição de fase de segunda ordem. Já no caso dipolar ($\sigma = 3$) os resultados indicaram a existência de uma transição de fase do tipo K.T.. Justamente os resultados analíticos apresentados, predizem tal mudança qualitativa ao variar σ . Desta forma, embora não tenham sido testadas em detalhe o conjunto das previsões teóricas obtidas, a comparação dos resultados numéricos e analíticos sugere que a nossa teoria descreve corretamente o fenômeno sob estudo.

Capítulo 5

Propriedades topológicas de sistemas quânticos de faixas

5.1 Teoria quântica da fusão orientacional em sistemas de faixas

No capítulo anterior foram estudadas a ordem posicional e orientacional de um sistema genérico de faixas clássico. O nosso modelo de partida, embora simples, tem sido utilizado no passado para estudar sistemas tão diferentes quanto: filmes finos ferromagnéticos dipolares [13, 24, 25, 51], sistemas fluidos [31, 49, 56] ou sistemas de elétrons fortemente correlacionados [57, 58, 59, 60]. Neste último caso, tem sido usados inclusive modelos clássicos, no estudo de sistemas quânticos, com o intuito de que determinadas características físicas sejam robustas o suficiente como para se manter em ambas versões de um mesmo modelo pelo menos em regiões específicas do espaço de parâmetros. Embora tal caminho a pesar das suas limitações seja válido, tem condições físicas nas quais os sistemas quânticos e clássicos apresentam uma grande diferença de comportamentos. Em particular, para baixas temperaturas os sistemas quânticos e clássicos normalmente tem comportamentos diferentes, entre outras coisas porque para baixas temperaturas as flutuações relevantes no sistema são as chamadas flutuações quânticas, as quais são essencialmente uma consequência do princípio de incerteza da mecânica quântica. Levando em conta esse fato conhecido, seria extremamente interessante generalizar a teoria apresentada no capítulo anterior, para a fusão de sistemas de faixas, nos quais se tem adicionalmente a presença das flutuações quânticas.

É um procedimento padrão na literatura [61, 62, 63] incluir o caráter quântico em um modelo clássico, pelo menos em primeira aproximação, simplesmente adicionando ao Hamiltoniano em estudo, um termo

de energia cinética da variável dinâmica usada para descrever o sistema. No nosso caso a forma mais natural de procedermos seria incluir um termo de energia cinética no Hamiltoniano elástico, para o campo de deformação $u(\vec{r})$, equação 4.33. Para construir a função de partição é utilizado o formalismo quântico no qual a função de partição é calculada como:

$$\mathcal{Z} = \int D[u(\vec{r}, \tau)] e^{-S[u(\vec{r}, \tau)]}, \quad (5.1)$$

onde $S[u(\vec{r}, \tau)]$ representa a ação associada ao sistema para uma dada evolução ao longo tempo imaginário. Como vemos o campo de deformação u foi promovido e agora representa um campo dinâmico que contém uma dimensão extra. A extensão do intervalo de integração ao longo da direção do tempo imaginário τ , tomando como convenção $\hbar = 1$, se estende do zero até $\tau_{max} = \beta = (k_B T)^{-1}$. Adicionalmente, devem ser impostas condições periódicas de fronteira para o campo de deformação $u(\vec{r}, \tau)$ na direção τ . A explicação para isso se encontra no fato de que basicamente, os modos $\hat{u}(\vec{k}, \omega)$ como em qualquer outro sistema elástico, representam fônons. E conhecido que os fônons são bósons independentemente da natureza das partículas que formam o sistema, considerando então o formalismo de Matsubara para bósons é natural impor as condições periódicas sobre $u(\vec{r}, \tau)$ ao longo da direção τ .

Vamos proceder então com a formulação do problema no contexto quântico. A ação do nosso problema pode ser obtida, como explicado anteriormente, adicionando a energia cinética dos fônons a nosso Hamiltoniano clássico inicial (Eq.4.33):

$$\mathcal{S} = \frac{B}{2} \int_0^\beta d\tau \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left[\rho \partial_\tau \hat{u}(\vec{k}, \tau) \partial_\tau \hat{u}(-\vec{k}, \tau) + (k_x^2 + \lambda^2 k^{\sigma-2} k_y^4) \hat{u}(\vec{k}, \tau) \hat{u}(-\vec{k}, \tau) \right], \quad (5.2)$$

onde o parâmetro ρ^{-1} mede a intensidade das flutuações quânticas no sistema. Embora o problema inicial seja quântico o formalismo utilizado permitiu a transformação do mesmo num problema clássico numa dimensão maior, no qual todas as ferramentas desenvolvidas no capítulo anterior são aplicáveis com modificações leves. É simples perceber que, como no caso clássico, a ação 5.2 permite considerar de forma geral o caso onde temos uma interação repulsiva relevante ($\sigma < 2$), e o caso no qual somente interações de curto alcance são relevantes ($\sigma = 2$).

Antes de avançar nos aspectos técnicos, expliquemos melhor qual é o nosso foco no momento. A continuação será mostrado como desenvolver uma teoria da fusão de sistemas de faixas a qual considera simultaneamente as flutuações térmicas e quânticas, considerando as duas igualmente relevantes. Tal teoria deveria permitir recuperar os resultados já mostrados para o caso clássico e em particular aqueles obtidos por

Toner e Nelson [49] no limite de altas temperaturas ou flutuação quântica nula. No nosso conhecimento uma teoria quântica que descreva a fusão de sistemas de faixas e que permita recuperar os resultados da teoria clássica, não tem sido desenvolvida ainda. Tal teoria resultaria relevante no entendimento das propriedades dos chamados cristais líquidos eletrônicos [64] e possivelmente nos sistemas de átomos frios com interação dipolar ou Coulombiana [65, 66].

Para continuar vamos definir a transformada de Fourier de nosso campo de deformações $\hat{u}(\vec{k}, \tau)$ no espaço de frequências na forma:

$$\hat{u}(\vec{k}, i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{-i\omega_n \tau} \hat{u}(\vec{k}, \tau), \quad (5.3)$$

onde as frequências, de acordo com a condição de periodicidade na direção temporal para o campo $\hat{u}(\vec{k}, \tau)$, estarão dadas por $\omega_n = 2\pi n/\beta$. De acordo com a definição anterior podemos reescrever a nossa ação no espaço (\vec{k}, ω) como:

$$\mathcal{S} = \frac{B\beta}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_n (\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k^{\sigma-2} k_y^4) \hat{u}(\vec{k}, i\omega_n) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega_n). \quad (5.4)$$

Esta é uma ação quadrática a partir da qual é direto concluir que a correlação $\langle \hat{u}(\vec{k}, i\omega_n) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega_n) \rangle$ se escreve como:

$$\langle \hat{u}(\vec{k}, i\omega_n) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega_n) \rangle = \frac{k_B T}{B (\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k^{\sigma-2} k_y^4)}. \quad (5.5)$$

A partir desta função de correlação Gaussiana, é possível calcular os observáveis de interesse nesse mesmo nível de aproximação. No entanto, para construir uma teoria não trivial para a fusão da fase de faixas ordenadas orientacionalmente, precisamos incluir na nossa descrição o papel das deslocações, excitações de baixa energia relevantes na fusão da ordem orientacional nos sistemas de faixas. A descrição do campo de deformação criado por uma deslocação no caso quântico, usando a formulação funcional a princípio é simples. Basicamente devemos incluir no quadro clássico, discutido no capítulo anterior, duas novas características:

- i) Deve ser incorporado um termo temporal na equação de movimento de Euler, o qual leva em conta a dinâmica do campo de deformação da deslocação u_D considerando a forma da ação de partida.
- ii) A possibilidade de movimento das deslocações, as quais realizam trajetórias no espaço tempo com a única restrição da periodicidade na direção temporal.

Primeiramente é importante perceber que a condição 4.34 agora têm que ser válida para a nossa deslocação quântica para todo tempo imaginário $\tau \in [0, \beta]$, considerando que em todo momento o contorno de integração é escolhido fechando-se ao redor da deslocação. A equação de Euler para a nossa ação inicial

vem dada por:

$$-\frac{\delta\mathcal{S}}{\delta\hat{u}(-\vec{k}, -i\omega_n)} = -(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})\hat{u}(\vec{k}, i\omega_n) = 0. \quad (5.6)$$

Usando agora o procedimento análogo ao do caso clássico, percebemos que é preciso adicionar um termo de fonte na equação da forma $md\partial_x\delta(x - x_0(\tau))\Theta(y - y_0(\tau))$, o qual é consistente com uma deslocação em movimento com trajetória $\vec{r}_0(\tau)$. Escrevendo então a equação de movimento apropriada chegamos a:

$$-(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})\hat{u}(\vec{k}, i\omega_n) = md\frac{k_x}{k_y} \int_0^\beta \frac{d\tau}{\beta} e^{-i\omega_n\tau - i\vec{k}\cdot\vec{r}_0(\tau)}. \quad (5.7)$$

A solução desta equação é obviamente:

$$\hat{u}(\vec{k}, i\omega_n) = -md\frac{k_x}{k_y} \frac{\int_0^\beta \frac{d\tau}{\beta} e^{-i\omega_n\tau - i\vec{k}\cdot\vec{r}_0(\tau)}}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \quad (5.8)$$

Partindo desta expressão seria possível calcular $u(\vec{r}, \tau)$ realizando a transformada inversa de Fourier da expressão 5.8, esse resultado é particularmente esclarecedor quando se escreve da seguinte forma:

$$\begin{aligned} u(\vec{r}, \tau) &= \int_0^\beta \frac{d\tau'}{\beta} \int d^2\vec{r}' m\delta(\vec{r}' - \vec{r}_0(\tau')) \int \frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2} \sum_n e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}') + i\omega_n(\tau-\tau')} \\ &\times -d\frac{k_x}{k_y} \frac{1}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Considerando esta expressão é obvio que a função de Green do campo de deformação de uma deslocação isolada será:

$$G(\vec{k}, i\omega_n) = -d\frac{k_x}{k_y} \frac{1}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \quad (5.10)$$

Agora é possível repetir o mesmo procedimento utilizado no caso para deduzir a contribuição à ação proveniente da interação entre deslocações. Mas antes é interessante comentar alguns pontos importantes sobre a dinâmica das deslocações no nosso caso.

É de conhecimento geral, que normalmente as deslocações não podem se deslocar de forma arbitrária no interior de um cristal. Especificamente devido ao chamado “glide constraint”, o qual estipula que as deslocações estão proibidas de se mover no cristal de forma paralela às faixas. Esse tipo de movimento no interior de um cristal implicaria na destruição ou criação de partículas, o qual obviamente violaria a conservação da massa. No entanto, se analisarmos essa questão veríamos que a física do nosso sistema é bem diferente. De fato, podemos perceber que as deslocações no nosso caso estão compostas por um dado número de pares de faixas com densidades opostas, o que significa que trasladar a deslocação ao longo das

faixas conserva a media local do parâmetro de ordem, o que implica que a conservação da massa ou carga não é afetada por essa classe de movimento.

É interessante esclarecer esse ponto devido a que no cálculo apresentado não são considerados nenhum vínculo dinâmico associado ao movimento das deslocações. Essa é uma diferença importante com as teorias que descrevem a dinâmica das deslocações em cristais, onde o “glide constraint” tem importantes consequências físicas. Como explicado anteriormente, no nosso caso, devido a que as faixas estão distribuídas em pares de densidades opostas estender o contrair o numero par de faixas que formam uma deslocação não afeta a conservação da massa. Isso acontece porque a media local do parâmetro de ordem não é alterada pela adição e subtração de iguais quantidades de massa.

Procedamos agora com a construção de uma ação efetiva para o sistema de deslocações em interação. Como no caso clássico primeiramente promovemos o campo deltaico de uma deslocação ao caso onde de fato temos um campo de deslocações, nesse caso o campo de deformação será:

$$u_D(\vec{k}, i\omega_n) = G(-\vec{k}, -i\omega_n)\hat{m}(\vec{k}, i\omega_n), \quad (5.11)$$

onde $G(\vec{k}, i\omega_n)$ vem dado pela expressão 5.10. Em total analogia com o caso clássico podemos escrever a ação inicial na forma simétrica seguinte:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_d = & \frac{B\beta}{2} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_n \left(\rho h_0(\vec{k}, i\omega_n) h_0(-\vec{k}, -i\omega_n) + h_1(\vec{k}, i\omega_n) h_1(-\vec{k}, -i\omega_n) \right. \\ & \left. + \lambda^2 h_2(\vec{k}, i\omega_n) h_2(-\vec{k}, -i\omega_n) \right). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Os campos componentes neste caso serão dados pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} h_0(\vec{k}, i\omega_n) &= i\omega_n G(-\vec{k}, -i\omega_n)\hat{m}(\vec{k}, i\omega_n) \\ h_1(\vec{k}, i\omega_n) &= ik_x G(-\vec{k}, -i\omega_n)\hat{m}(\vec{k}, i\omega_n) \\ h_2(\vec{k}, i\omega_n) &= -k_y^2 k^{\frac{\sigma}{2}-1} G(-\vec{k}, -i\omega_n)\hat{m}(\vec{k}, i\omega_n). \end{aligned} \quad (5.13)$$

Os quais podem ser escritos na forma:

$$\begin{aligned}
h_0(\vec{k}, i\omega_n) &= i\omega_n \left(\frac{-dk_x}{k_y(\rho\omega_n^2 + k_x^2)} + \frac{dk_x \lambda^2 k^{\sigma-2} k_y^3}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2)(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})} \right) \hat{m}(\vec{k}, i\omega_n) \\
h_1(\vec{k}, i\omega_n) &= ik_x \left(\frac{-dk_x}{k_y(\rho\omega_n^2 + k_x^2)} + \frac{dk_x \lambda^2 k^{\sigma-2} k_y^3}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2)(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})} \right) \hat{m}(\vec{k}, i\omega_n) \\
h_2(\vec{k}, i\omega_n) &= dk_x \frac{k_y k^{\frac{\sigma}{2}-1}}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})} \hat{m}(\vec{k}, i\omega_n).
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Olhando cuidadosamente a expressão previa percebemos que como no caso clássico contribuições espúrias, devido à descontinuidade introduzida na função $u_D(\vec{r}, \tau)$, aparecem nas funções h_0 e h_1 . Desconsiderando os termos espúrios é possível chegar nas expressões certas para os campos h_0 e h_1 :

$$\begin{aligned}
h_0(\vec{k}, i\omega_n) &= \frac{id\lambda^2 \omega_n k_x k_y^3 k^{\sigma-2} \hat{m}(\vec{k}, i\omega_n)}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2)(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})} \\
h_1(\vec{k}, i\omega_n) &= \frac{id\lambda^2 k_x^2 k_y^3 k^{\sigma-2} \hat{m}(\vec{k}, i\omega_n)}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2)(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}.
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Com os resultados obtidos para h_0 , h_1 e h_2 é possível chegar na primeira contribuição à ação efetiva para o campo de deslocções em interação:

$$\mathcal{S}_d = \frac{\beta}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \sum_n \frac{Bd^2 \lambda^2 k_x^2 k_y^2 k^{\sigma-2}}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2)(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})} \hat{m}(\vec{k}, i\omega_n) \hat{m}(-\vec{k}, -i\omega_n). \tag{5.16}$$

É possível perceber que esta equação representa o análogo quântico da expressão 4.44, obtida no problema clássico. A continuação é incluída nesta ação (Eq. 5.16), o custo intrínseco da distribuição de deslocções, ou seja, o custo da só existência das deslocções considerando nula a interação entre elas. Desta forma a expressão resultante para ação no problema quântico será:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_{dT} &= \frac{B\beta}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \sum_n \left(\frac{1}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2)} \frac{d^2 \lambda^2 k_x^2 k_y^2 k^{\sigma-2}}{(\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})} + 2E_d a^2 \right) \\
&\times \hat{m}(\vec{k}, i\omega_n) \hat{m}(-\vec{k}, -i\omega_n).
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Esta expressão como era de se esperar esta em perfeita analogia com a equação 4.45 deduzida no problema clássico. Seguindo então o procedimento mostrado no capítulo anterior, calculamos a correlação orientacional

incluindo as flutuações quânticas:

$$\langle \hat{\theta}(\vec{k}, i\omega_n) \hat{\theta}(-\vec{k}, -i\omega_n) \rangle = k_B T \frac{d^2 k_x^2 + 2E_d a^2 k_y^2 (\rho\omega_n^2 + k_x^2)/B}{B d^2 \lambda^2 k_x^2 k_y^2 k^{\sigma-2} + 2E_d a^2 (\rho\omega_n^2 + k_x^2) (\rho\omega_n^2 + k_x^2 + \lambda^2 k_y^4 k^{\sigma-2})}. \quad (5.18)$$

Considerando agora o limite de longos comprimentos de onda ($k \rightarrow 0$) e baixas temperaturas ($\omega_1 \rightarrow 0$) observamos que até a contribuição dominante a função de correlação se escreve como:

$$\langle \hat{\theta}(\vec{k}, i\omega_n) \hat{\theta}(-\vec{k}, -i\omega_n) \rangle = \frac{k_B T}{4E_d a^2 \rho\omega_n^2/d^2 + B \lambda^2 k_y^2 k^{\sigma-2} + 2E_d a^2 k_x^2/d^2}. \quad (5.19)$$

Dada a forma obtida para a correlação orientacional é direto concluir que a ação correspondente a tal função de correlação será:

$$\mathcal{S}_{oG} = \frac{\beta}{2} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \sum_n \left(\frac{4E_d a^2}{d^2} \rho\omega_n^2 + \frac{2E_d a^2}{d^2} k_x^2 + B \lambda^2 k^{\sigma-2} k_y^2 \right) \hat{\theta}(\vec{k}, i\omega_n) \hat{\theta}(-\vec{k}, -i\omega_n). \quad (5.20)$$

A ação final obtida é tal que reproduz a física da ação clássica no limite de flutuação nula, que contrario a intuição significa $\rho \rightarrow \infty$. Isto significa que foi construída uma teoria quântica da fusão de faixas que tem como limite clássico a teoria apresentada no capítulo anterior, para sistemas com interações de suficiente largo alcance ($\sigma < 2$) [50], e a teoria desenvolvida por Toner e Nelson [49] quando as interações são efetivamente de curto alcance ($\sigma \geq 2$).

Para estudar as propriedades orientacionais do sistema de faixas em maior profundidade, necessitamos considerar a forma completa da ação e não somente seu limite Gaussiano. A forma geral será aquela que permita recuperar as propriedades de simetria de um sistema de rotores com modulo fixo ($|\vec{n}(\vec{x}, \tau)|^2 = 1$). A condição do modulo do vetor de orientação ser fixo, esta relacionada com o fato de estarmos considerando um regime onde só as flutuações orientacionais do vetor orientação das faixas é relevante. A possível flutuação da largura das faixas e os seus efeitos no ordenamento orientacional do sistema é desconsiderado, devido a que se entende que na região onde o sistema se ordena orientacionalmente as flutuações do comprimento de modulação são desprezíveis.

Em analogia com o caso clássico estudado no capítulo anterior, é direto concluir que a forma geral completa da ação será:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_g &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2 x \left[g_0 (\partial_\tau \vec{n})^2 + g_1 (\vec{\nabla} \cdot \vec{n})^2 + g_2 (\vec{\nabla} \times \vec{n})^2 \right] + \frac{g}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2 x \int d^2 x' \\ &\times \Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \left(\frac{\vec{n}(\vec{x}, \tau) \cdot \vec{n}(\vec{x}', \tau)}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} - (\sigma + 2) \frac{\vec{n}(\vec{x}, \tau) \cdot (\vec{x} - \vec{x}') \vec{n}(\vec{x}', \tau) \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+4}} \right). \quad (5.21) \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
g_0 &= \frac{4E_d a^2}{d^2} \rho \\
g_1 &= \gamma_y \\
g_2 &= \frac{2E_d a^2}{d^2} \\
g &= c\gamma_{nl}.
\end{aligned} \tag{5.22}$$

A ação proposta coincide com aquela que obtivemos para o vetor diretor das faixas no limite de pequenos desvios (Eq.5.20), e simultaneamente é consistente com as simetrias de um sistema de rotores de modulo constante. Como discutido no capítulo 4 a ação proposta não apresenta uma forma consistente com as simetrias de um cristal liquido. Isso faz total sentido considerando que os constituintes microscópicos de nosso sistema não têm a simetria de rotações em π que apresentam as moléculas de um cristal liquido. É importante destacar que isto é um fato importante e não um simples detalhe matemático. A diferença nas propriedades de simetria dos constituintes básicos é no fim das contas a responsável pela estabilidade da fase com ordem de longo alcance, predita para $\sigma < 2$ a temperatura finita.

É natural, que a escalas maiores que o comprimento de modulação, justamente como no caso clássico [49, 52], a anisotropia nas constantes elásticas efetivas desapareça o que resulta numa simplificação da forma funcional da ação efetiva. Como resultado desta renormalização das constantes de interação para longos comprimentos de onda, é possível chegar na seguinte forma geral da ação:

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_o &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2x [g_0(\partial_\tau \vec{n})^2 + g_1(\partial_\mu \vec{n})^2] + \frac{g}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2x \int d^2x' \Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \\
&\times \left(\frac{\vec{n}(\vec{x}, \tau) \cdot \vec{n}(\vec{x}', \tau)}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} - (\sigma + 2) \frac{\vec{n}(\vec{x}, \tau) \cdot (\vec{x} - \vec{x}') \vec{n}(\vec{x}', \tau) \cdot (\vec{x} - \vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+4}} \right),
\end{aligned} \tag{5.23}$$

onde ainda o campo de vetores diretores satisfaz a mesma condição de normalização local do problema original: $|\vec{n}(\vec{x}, \tau)|^2 = 1$. Não é difícil perceber que o ação efetiva anterior guarda relação com o Hamiltoniano efetivo obtido para sistemas clássicos 4.58. Considerando então, que o Hamiltoniano efetivo clássico pode ser encontrado como o limite de altas temperaturas da ação anterior, a teoria quântica resultante da fusão orientacional em sistemas de faixas tem como limite clássico a teoria generalizada de fusão de faixas apresentada no capítulo 4 [50] e como caso particular aquela desenvolvida por Toner e Nelson [49].

5.2 Transição quântica orientacional em sistemas com interações de curto alcance.

Nesta seção vamos nos concentrar no estudo da ação efetiva obtida para os graus de liberdade orientacionais (Eq. 5.23), no caso em que temos interações efetivas de curto alcance $\sigma \geq 2$. Neste cenário a interação não local na equação 5.23 pode ser desprezada, devido a que no limite de longos comprimentos de onda resulta subdominante frente as contribuições locais à ação. Conseqüentemente no presente caso podemos restringir a nossa atenção à ação simplificada:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{osr} &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2x [g_0(\partial_\tau \vec{n})^2 + g_1(\partial_\mu \vec{n})^2] \\ &= \frac{g}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2x [(\partial_\tau \vec{n})^2 + (\partial_\mu \vec{n})^2], \end{aligned} \quad (5.24)$$

onde a ultima igualdade pode ser obtida mediante uma simples re-escala das variáveis espaciais. Novamente, o comportamento não trivial do presente modelo resulta do vínculo: $|\vec{n}(\vec{x}, \tau)|^2 = 1$, herdado do problema geral (Eq. 5.23). Como explicado anteriormente, o vínculo imposto é baseado na consideração de que as flutuações orientacionais do padrão de faixas, na região onde a quebra da simetria rotacional acontece, dominam sobre as flutuações locais de compressão ou expansão do sistema. Assim os graus de liberdade relevantes são somente aqueles associados à orientação local do padrão.

Por outro lado, é direto perceber que a solução do nosso problema original têm sido mapeada na solução do modelo XY clássico em “três” dimensões. É muito importante chamar a atenção sobre o fato de que para qualquer β finito a extensão do sistema na direção do tempo imaginário é finita também. Assim só a temperatura zero ($\beta \rightarrow \infty$), as propriedades do sistema serão aquelas do modelo XY clássico em $d = 3$ no limite termodinâmico. Isso por sua vez significa, que só neste caso é possível a existência de uma fase com ordem orientacional de longo alcance, dado que a dimensão crítica inferior do modelo XY clássico é dois.

O problema em consideração tem sido extensamente estudado em diferentes contextos [64, 67, 68, 69]. Conseqüentemente vamos nós limitar a discutir as principais características do diagrama de fases deste modelo no plano g versus T . É possível provar que para qualquer temperatura finita, as flutuações térmicas destroem a ordem orientacional de longo alcance. No entanto, para valores suficientemente elevados de g , tem lugar uma transição de Kosterlitz-Thouless [69]. Desta forma o sistema passa de um estado desordenado para um estado com ordem orientacional de quase longo alcance, onde as correlações decaem como leis de potência. Perto da linha de transição a temperatura finita as flutuações térmicas divergem e em consequência

o sistema comporta-se efetivamente como o seu análogo clássico [61], desta forma é esperado que seja um mecanismo de quebra de pares de vórtices ligados o que produz a transição, pelo menos para temperaturas suficientemente elevadas. Na medida que as temperaturas aproximam-se de zero a janela de temperaturas e g 's na qual o sistema comporta-se efetivamente como um sistema clássico vai diminuindo até chegar no limite de $T = 0$, onde tais considerações não são mais validas.

A temperatura zero, é simples mostrar que uma fase com ordem orientacional de longo alcance é estável, pelo menos para valores de g grandes o suficiente. Por outro lado para valores suficientemente pequenos de g é possível mediante teoria de perturbações obter que as correlações orientacionais decaem exponencialmente [61]. Desta forma fica clara a existência de uma transição de fase quântica, para algum valor intermediário do parâmetro g . Este valor (g_c) define o chamado Ponto Crítico Quântico (P.C.Q.) e como discutido na literatura [67, 68, 69] tal transição de fases é de segunda ordem.

Como discutido na literatura [69, 61] o diagrama de fases qualitativo do modelo XY quântico em duas dimensões tem a forma mostrada na figura 5.1. A linha tracejada que parte da origem do diagrama

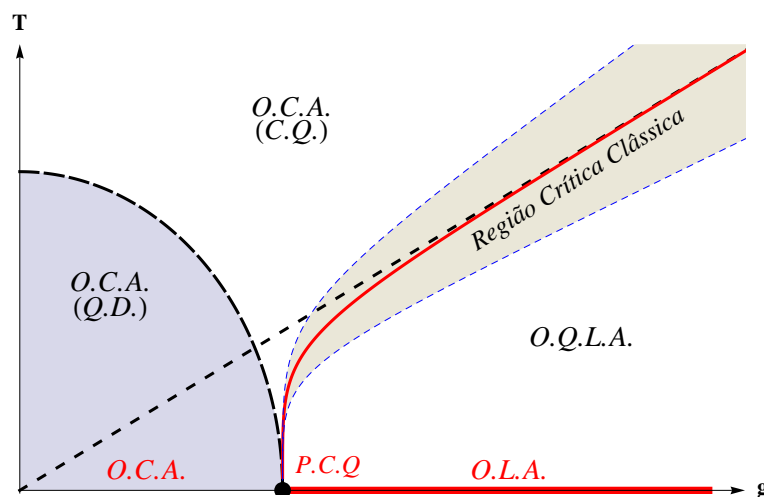


Figura 5.1: Diagrama de fases qualitativo do modelo XY quântico [67]. A natureza das regiões assim como a notação utilizada é explicada no texto.

g contra T representa a linha de transição KT do modelo XY clássico ($T_c = 0.89\pi g$). Como vemos no limite de altas temperaturas, para valores suficientemente elevados de g , existe uma região perto da linha de transição, onde as propriedades críticas de modelo são as obtidas classicamente. De fato, inclusive a temperatura crítica do modelo quântico se aproxima assintoticamente daquela do modelo clássico (Fig. 5.1). O ponto crítico quântico ($T = 0, g = g_c$) separa as regiões, a temperatura zero, onde o estado fundamental do

sistema é qualitativamente diferente. De um lado temos, para baixos valores de g , um regime dominado pelas flutuações quânticas no qual o sistema apresenta somente ordem orientacional de curto alcance (O.C.A.). Do outro lado, para valores de g maiores que g_c , o estado fundamental do sistema apresenta uma ordem orientacional de longo alcance (O.L.A.) (Fig. 5.1). A temperatura finita, para valores de g maiores que g_c na região abaixo da linha de transição KT têm-se uma fase com ordem orientacional de quase longo alcance (O.Q.L.A.), como mencionado anteriormente. Adicionalmente, espera-se a existência de um “crossover” na região $g \lesssim g_c$ [69, 70, 61], ao passar da região quântica desordenada (Q.D.) para a região crítica quântica (C.Q.) (Fig. 5.1). A distinção entre essas regiões vem dada pela dependência do comprimento de correlação ξ como função da temperatura: na região quântica desordenada espera-se que o comprimento de correlação seja uma constante independente da temperatura. Já na região crítica quântica o comprimento de correlação $\xi \propto T^{-1}$ [69, 70].

Uma descrição mais detalhada das características físicas do modelo é muito complicada, particularmente no que se refere à predição de expoentes críticos de qualidade (a temperatura zero) ou a descrição de outras propriedades do modelo para baixas temperaturas como a linha crítica, a susceptibilidade, etc. O problema da determinação dos expoentes críticos a temperatura zero tem sido resolvido via simulações computacionais [67, 68]. Isso tem permitido a boa caracterização da classe de universalidade deste modelo. Por outro lado, as propriedades críticas a temperatura finita ao redor do ponto crítico são ainda uma questão em aberto. A principal dificuldade nesta região consiste em considerar simultaneamente o papel dos vórtices e das excitações tipo ondas de spin. Para entender porque ainda a temperatura zero a contribuição dos vórtices é relevante, é suficiente olhar à localização do ponto crítico, via grupo de renormalização perturbativo para o modelo $O(n)$ sigma não lineal [71]. Neste caso ao considerar unicamente como possíveis excitações as ondas de spin se obtém o seguinte resultado:

$$g_c \approx \frac{n-2}{2\pi(d-2)}, \quad (5.25)$$

onde n é o número de componentes do parâmetro de ordem. Como pode-se observar para $d = 3$ e $n \rightarrow 2^+$, $g_c \rightarrow 0^+$. É importante ressaltar que essa propriedade se mantém em qualquer ordem em teoria de perturbações [71]. Isto indica que se somente excitações tipo ondas de spin fossem possíveis no sistema, toda a linha $T = 0$ apresentaria ordem orientacional de longo alcance. Em consequência, são os vórtices as excitações responsáveis pelo valor finito de g_c a temperatura zero. É importante esclarecer este ponto, devido a que a existência da ordem de longo alcance é usualmente interpretada como um indicador da não importância dos vórtices. Desta forma, ainda que em temperatura zero tenha-se uma transição de fase de

segunda ordem os vórtices ainda estão no centro do mecanismo de transição. Desafortunadamente, a natureza deste mecanismo e a física resultante para baixos valores de temperatura são ainda perguntas em aberto.

Uma consequência importante do estudo apresentado é o fato de que para todos aqueles sistemas com $\sigma > 2$, espera-se que as características qualitativas, do diagrama de fases orientacional, serão aquelas discutidas nesta seção. Isto significa que no caso fisicamente relevante de sistemas onde a interação repulsiva é de tipo dipolar ($\sigma = 3$) [65, 66, 62] as propriedades orientacionais deveriam ser aquelas discutidas na presente seção.

5.3 Transição quântica orientacional em sistemas com interações de longo alcance.

Procedamos agora com a análise do caso quando interações de suficiente longo alcance ($\sigma < 2$) estão presentes. Primeiramente é simples perceber que neste caso a parte não local da ação (Eq. 5.23), como dito anteriormente, tem a forma de uma interação dipolar generalizada. Essa interação é complicada de se tratar devido a sua forma anisotrópica. Com o objetivo de simplificar os cálculos, usaremos um resultado já demonstrado para $\sigma = 1$ para a versão clássica do nosso problema [53]. Em sistemas governados por uma ação da forma (5.23), onde a interação “atractiva” estabiliza localmente a fase orientada, é de se esperar que a classe de universalidade do modelo não mude se a interação dipolar for substituída por uma interação isotrópica que decai com um expoente igual ao da interação original. Isto significa que um modelo mais simples, cuja ação pertence à mesma classe de universalidade que aquela do modelo original (Eq. 5.23) será:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{olr} &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2x [g_0(\partial_\tau \vec{n})^2 + g_1(\partial_\mu \vec{n})^2] - \frac{g}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2x \int d^2x' \Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \\ &\times \frac{\vec{n}(\vec{x}, \tau) \cdot \vec{n}(\vec{x}', \tau)}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

O nosso próximo objetivo será caracterizar as propriedades críticas do modelo anterior (Eq. 5.26). Como vemos a ação proposta corresponde-se à versão quântica do modelo sigma não linear com interações de longo alcance. Para caracterizar as transições de fase neste modelo vamos tirar vantagem de um fato conhecido: o modelo sigma não linear e o sigma linear apresentam à mesma classe de universalidade sempre que ambos sistemas apresentem os mesmos tipos de interações microscópicas e os respectivos parâmetros de ordem em cada modelo compartilham as mesmas propriedades de simetria [61, 72, 73]. Isto significa que ao invés de estudar o modelo original (Eq. 5.26) sujeito à condição de que o modulo do parâmetro do ordem local é fixo,

podemos estudar um modelo mais simples, cuja ação vem dada pela soma da ação original (Eq. 5.26) mais uma contribuição proveniente da presença de um potencial de duplo poço esfericamente simétrico.

Assim a ação usada no estudo das propriedades críticas do modelo será:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{oGL} &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2x [g_0(\partial_\tau \vec{n})^2 + g_1(\partial_\mu \vec{n})^2] - \frac{g}{2} \int_0^\beta d\tau \int d^2x \int d^2x' \Omega(|\vec{x} - \vec{x}'|) \\ &\times \frac{\vec{n}(\vec{x}, \tau) \cdot \vec{n}(\vec{x}', \tau)}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{\sigma+2}} + \int_0^\beta d\tau \int d^2x \left(-\frac{r}{2} \vec{n}(\vec{x}, \tau)^2 + u \vec{n}(\vec{x}, \tau)^4 \right), \end{aligned} \quad (5.27)$$

onde, como de costume r é o parâmetro variado para produzir a transição de fase e u representa o constante de acoplamento da interação quártica. Os nossos próximos passos estarão dirigidos à caracterização das propriedades críticas do modelo ao redor do P.C.Q.. O estudo desta ação para temperatura zero ($\beta \rightarrow \infty$) foi feito no passado por A. Dutta et al. [74]. No entanto, para completude mostramos a seguir os principais passos envolvidos no cálculo, até primeira ordem numa expansão ϵ , dos expoentes críticos associados à transição de fase quântica a temperatura nula.

5.3.1 Resultados a temperatura zero

A ação, neste caso ($T = 0$), pode ser escrita no espaço frequência-momento como:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{oGL} &= \frac{1}{2} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{d\omega}{2\pi} (g_0 \omega^2 + g_1 k^2 + g k^\sigma + r) \vec{n}(\vec{k}, i\omega) \cdot \vec{n}(-\vec{k}, -i\omega) \\ &+ u \int \prod_{i=1}^4 \frac{d^d k_i}{(2\pi)^d} \frac{d\omega_i}{2\pi} \delta\left(\sum_i \omega_i\right) \delta\left(\sum_i \vec{k}_i\right) \\ &\times \vec{n}(\vec{k}_1, i\omega_1) \cdot \vec{n}(\vec{k}_2, i\omega_2) \vec{n}(\vec{k}_3, i\omega_3) \cdot \vec{n}(\vec{k}_4, i\omega_4). \end{aligned} \quad (5.28)$$

Podemos observar que na nossa formulação, a dimensão espacial foi promovida de dois para uma genérica (d), para maior generalidade dos nossos resultados. Com o objetivo de ser consistente com a generalização previa precisamos generalizar também a interação não local na forma $r^{-(2+\sigma)} \rightarrow r^{-(d+\sigma)}$. É possível comprovar que no limite $k \rightarrow 0$, temos diferentes contribuições espaciais dominantes na ação (Eq. 5.28) de acordo com valor de σ . Para $\sigma \geq 2$ o termo k^σ é subdominante em relação ao k^2 , como explicado anteriormente. Por outro lado quando $\sigma < 2$ o termo de interação de longo alcance k^σ , resulta a contribuição espacial relevante. A continuação estudaremos o caso em que a interação de longo alcance é a interação dominante para longos comprimentos de onda.

Desta forma, o propagador Gaussiano é simplesmente escrito como:

$$G_0(\vec{k}, i\omega) = \frac{1}{g_0\omega^2 + gk^\sigma + r}. \quad (5.29)$$

Para determinar os expoentes críticos dentro da aproximação Gaussiana estudam-se como escalam, no ponto fixo Gaussiano, as frequências ω e a “massa” r ante uma re-escala do vetor de onda da forma: $q' = bq$. Essa análise permite obter que:

$$\begin{aligned} \omega' &= b^{\frac{\sigma}{2}}\omega \\ r' &= b^\sigma r. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Esses resultados permitem concluir que o expoente dinâmico a nível Gaussiano será: $z = \sigma/2$, e o expoente crítico, associado à divergência do comprimento de correlação na região crítica será: $\nu = 1/\sigma$. Estudando agora o comportamento da função de correlação $G_0(\vec{k}, i\omega)$ no limite estático, $\omega \rightarrow 0$, é possível mostrar que o expoente crítico da susceptibilidade é: $\gamma = 1$, e que o expoente associado a função de correlação no ponto crítico será: $\eta = 2 - \sigma$. Para maiores informações sobre o significado dos expoentes críticos é a relação entre eles, o leitor pode consultar as referências: [46, 71].

Para corrigirmos os expoentes críticos de campo médio, implementamos o grupo de renormalização perturbativo até um laço ao redor da dimensão crítica superior. A dimensão crítica superior (d_u) no nosso modelo pode ser calculada simplesmente estudando como escala a constante de acoplamento u , da nossa ação (Eq. 5.28), com uma mudança de escala nos comprimentos de onda ($q' = bq$). Não é difícil concluir que a constante de acoplamento do termo quártico escala na forma:

$$u' = b^{-d+\frac{3\sigma}{2}}u, \quad (5.31)$$

o qual implica que a dimensão crítica superior (d_u), acima da qual a constante de acoplamento u resulta irrelevante será: $d_u = 3\sigma/2$.

Usando então as técnicas do grupo de renormalização perturbativo é possível chegar em que as equações do fluxo de renormalização até um laço, seguindo a notação apresentada na referencia [71], serão:

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dl} &= \sigma r + \frac{4u(n+2)K_d\Lambda^d W}{r + g_0W^2 + g\Lambda^\sigma} \\ \frac{du}{dl} &= \epsilon u - \frac{4u^2(n+8)K_d\Lambda^d W}{(r + g_0W^2 + g\Lambda^\sigma)^2}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

onde Λ e W representam o “cut-off” de momento e frequência, respectivamente. Assim mesmo $\epsilon = d_u - d$ para todo d menor que d_u , caso contrario ϵ é fixado igual a zero [71]. Por outro lado, n representa o número de componentes do parâmetro de ordem e K_d é uma constante sem importância. Como explicado por A. Dutta et. al [74], para $\epsilon > 0$ (abaixo da dimensão crítica superior) um ponto fixo não trivial aparece nas equações de renormalização. Linearizando as equações do grupo de renormalização ao redor deste ponto, é possível obter os expoentes críticos como sendo:

$$\nu = \frac{1}{\sigma} + \frac{(n+2)\epsilon}{(n+8)\sigma^2}, \quad \gamma = 1 + \frac{(n+2)\epsilon}{(n+8)\sigma}, \quad \eta = 2 - \sigma. \quad (5.33)$$

Os resultados obtidos são corretos até primeira ordem no parâmetro pequeno ϵ . As técnicas do grupo de renormalização perturbativo têm a vantagem de permitir calcular contribuições de ordem superior, no parâmetro pequeno (ϵ), aos expoentes críticos. No entanto o calculo, já até segunda ordem em potências do parâmetro pequeno, é muito trabalhoso e não oferece por si só grandes benefícios. Para mais informação sobre os principais questões do cálculo dos expoentes críticos até segunda ordem no modelo discutido ver referência [74].

Uma questão sobre a qual vale a pena chamar a atenção neste ponto, é sobre o fato de que no caso fisicamente relevante da interação Coulombiana ($\sigma = 1$) vemos que para duas dimensões $d > d_u$ e portanto $\epsilon = 0$. Isto significa que no caso da interação Coulombiana os expoentes críticos calculados a nível de campo médio são exatos. Desta forma, considerando as equações (5.33), concluímos que no caso Coulombiano a transição orientacional quântica a temperatura zero têm exatamente os seguintes expoentes críticos:

$$\nu = 1, \quad \gamma = 1, \quad \eta = 1. \quad (5.34)$$

Este é um resultado original do nosso estudo que permite a caracterização completa da transição quântica orientacional para sistemas de faixas com interação repulsiva Coulombiana.

5.3.2 Resultados a temperatura finita

O método utilizado a seguir no nosso estudo das propriedades de baixas temperaturas do modelo (5.27) é descrito no livro de S. Sachdev, “Quantum Phase Transitions” [61], o mesmo é por sua vez uma adaptação de métodos que combinam renormalização com “finite size scaling” [75, 76]. A técnica desenvolvida consiste em integrar todos os modos de frequência diferente de zero na direção do tempo imaginário.

O resultado é uma ação efetiva, para o modo de frequência zero, cujos constantes de acoplamento são renormalizadas pelas flutuações quânticas. A função de correlação para esta ação efetiva de frequência nula, equivale à susceptibilidade estática do problema original. A análise das propriedades desta quantidade, como veremos, permite uma caracterização bastante ampla das características do modelo na vizinhança do Ponto Crítico Quântico [61].

A ação efetiva para o modo de frequência zero será da forma [61]:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_T &= \frac{\beta}{2} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} (gk^\sigma + R) \vec{n}(\vec{k}) \cdot \vec{n}(-\vec{k}) + \beta U \int \prod_{i=1}^4 \frac{d^d k_i}{(2\pi)^d} \delta \left(\sum_{i=1}^4 \vec{k}_i \right) \\ &\times \vec{n}(\vec{k}_1) \cdot \vec{n}(\vec{k}_2) \vec{n}(\vec{k}_3) \cdot \vec{n}(\vec{k}_4), \end{aligned} \quad (5.35)$$

com constantes de acoplamento R e U , dadas por:

$$\begin{aligned} R &= r + 4u(n+2) \frac{1}{\beta} \sum_{n \neq 0} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{g_0 \omega_n^2 + gk^\sigma + r} \\ U &= u - 4u^2(n+8) \frac{1}{\beta} \sum_{n \neq 0} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(g_0 \omega_n^2 + gk^\sigma + r)^2}, \end{aligned} \quad (5.36)$$

onde $\omega_n = 2\pi n/\beta$. Como pode ser observado, as constantes de acoplamento R e U são exatamente aquelas que se obtém via renormalização perturbativa até um laço, considerando nas somas internas somente frequências de Matsubara não nulas.

O nosso objetivo agora será estudar a forma da linha crítica e o comportamento da susceptibilidade estática na vizinhança do P.C.Q.. Para simplicidade no cálculo e sem perda de generalidade, no que segue vamos fixar $g = g_0 = 1$. É importante entender que neste caso temos essa liberdade, devido a que no modelo sob estudo o parâmetro que produz a transição de fase é a “massa” r . Assim fixar as constantes de acoplamento não altera qualitativamente a forma do diagrama de fases r vs. T , em particular, não altera as propriedades universais do modelo. Por outro lado, essa escolha simplifica grandemente a comparação dos nossos resultados com aqueles apresentados na literatura. Como veremos é possível aproveitar os resultados conhecidos para o problema análogo, com $\sigma = 2$, na solução do problema com σ menor do que dois [61]. Isso devido a que é possível mostrar um mapeamento do problema original com interação k^σ naquele com interação k^2 em dimensão efetiva $d^* = 2d/\sigma$.

Embora não é um resultado direto, é possível mostrar que a susceptibilidade satisfaz a relação de escala geral [61]:

$$\chi(q) = \frac{1}{\delta R} \psi_{d^*}^{-1} \left(\frac{q^{\frac{\sigma}{2}}}{(\delta R)^{\frac{1}{2}}}, \frac{U}{\beta (\delta R)^{\frac{4-d^*}{2}}} \right), \quad (5.37)$$

onde $\psi_{d^*}(q, u)$ é a chamada função de “crossover” tri-crítico [77, 78, 61]. O desvio na “massa” δR é calculado como:

$$\delta R = R - R_c = R + 4U(n+2) \frac{g_\sigma}{\beta} \int \frac{d^{d^*} k}{(2\pi)^{d^*}} \frac{1}{k^2}, \quad (5.38)$$

onde o parâmetro g_σ vem dado por:

$$g_\sigma = \frac{2(2\pi)^{d^*} S_d}{\sigma(2\pi)^d S_d^*}. \quad (5.39)$$

Este parâmetro resulta da mudança de variáveis nas integrais no espaço de momentos. O termo S_d representa à area de uma esfera d -dimensional. A função de “crossover” tri-crítico pode ser calculado considerando diferentes tipos de aproximações. No limite de N grandes, sendo N o numero de componentes do campo \vec{n} , é possível obter que $\psi_{d^*}(q, u) = q^2 + \Pi_{d^*}(u)$, onde $\Pi_d(u)$ vem dada pela solução da equação:

$$\Pi_d(u) + 8uN \frac{\Gamma(\frac{4-d}{2})}{(4\pi)^d (d-2)} \Pi_d(u)^{\frac{d-2}{2}} g_\sigma = 1. \quad (5.40)$$

Como podemos observar a definição da função de “crossover” tri-crítico $\Pi_d(u)$, para um dado σ , é praticamente a mesma que se tem no caso $\sigma = 2$ se considerarmos que a dimensão do sistema é $d^* = 2d/\sigma$. A única diferença entre ambos casos é a presença do fator g_σ . Isso sugere que o conjunto de transformações necessárias para estabelecer a equivalência entre ambos casos não está completa. No entanto, é possível mostrar que após uma redefinição da constante de acoplamento do termo quártico, na forma $g_\sigma u \rightarrow u'$ a equivalência entre ambos problema se faz completa.

Isto significa que todos os resultados conhecidos para a susceptibilidade estática no caso $\sigma = 2$ são aplicáveis para qualquer $\sigma < 2$, se simultaneamente redefinimos a dimensão do nosso problema para d^* é re-escalamos ambas constantes de acoplamento, u e U na forma $g_\sigma u$ e $g_\sigma U$. O conhecimento desta transformação simplifica tremendamente o nosso trabalho, e permite utilizar de forma direta os resultados apresentados na literatura [61] no nosso problema. A seguir discutimos resumidamente os resultados de maior interesse:

- Para $d < \frac{3\sigma}{2}$ ou equivalentemente ($d^* < 3$), temos uma susceptibilidade no ponto crítico da forma $\chi^{-1}(q, r_c, T) = q^\sigma + c_1 T^2$, onde c_1 é uma constante sem importância. Isso implica uma divergência da susceptibilidade estática da forma $\chi(0, r_c, T) \propto T^{-2}$ e uma linha crítica na vizinhança do ponto crítico da forma $r - r_c = -c_1 T^2$.
- Para $\frac{3\sigma}{2} < d < 2\sigma$ i.e. ($3 < d^* < 4$) temos uma divergência da susceptibilidade no ponto crítico da forma $\chi(0, r_c, T) = c_1 u T^{-(\frac{2d}{\sigma}-1)}$, onde c_1 é um fator numérico. Consequentemente a forma da linha

crítica na vizinhança do ponto crítico sera $r - r_c = -cuT^{(\frac{2d}{\sigma}-1)}$, onde novamente, c representa um fator numérico sem importância.

- Para $d > 2\sigma$ o qual corresponde a $d^* > 4$ podemos comprovar que não é preciso realizar nenhum procedimento de renormalização, devido a que tanto a temperatura zero como a temperatura finita estamos trabalhando numa dimensão maior à dimensão crítica superior (D.C.S.). Neste caso a teoria não é renormalizável e a constante de acoplamento quártica é o que se conhece como uma variável irrelevante perigosa. Outra importante consequência de nos encontrarmos acima da D.C.S. é a aplicabilidade da teoria Gaussiana. É bastante simples mostrar que neste caso temos uma susceptibilidade no ponto crítico variando na forma $\chi(0, r_c, T) = c_1 u T^{-(\frac{2d}{\sigma}-1)}$ e uma linha crítica da forma $r - r_c = -cuT^{(\frac{2d}{\sigma}-1)}$, onde c_1 e c são parâmetros não universais.

Agora que as principais características do modelo ao redor do ponto crítico são conhecidas, alguns comentários são necessários. Primeiramente, notemos que existe continuidade no comportamento da linha crítica e na forma em que a susceptibilidade diverge quando a temperatura aproxima-se de zero. Essa continuidade permite conhecer o comportamento das magnitudes de interesse na fronteira de cada intervalo. Uma consequência importante dos nossos resultados é que no caso fisicamente relevante, da interação Coulombiana em duas dimensões ($\sigma = 1, d = 2$), estamos exatamente sobre a fronteira do regime $d > 2\sigma$, em cujo interior a teoria Gaussiana é exata. Isto implica que até correções logarítmicas, os resultados obtidos dentro da aproximação Gaussiana são exatos. Consequentemente espera-se que a susceptibilidade comporte-se como $\chi(0, r_c, T) \propto T^{-3}$ para T se aproximando de zero e uma linha crítica da forma $-\Delta r \propto \Delta T^3$.

De forma geral, para sistemas com interações de longo alcance ($\sigma < 2$) o diagrama de fases qualitativo do sistema terá a forma mostrada na figura 5.2. A região destacada ao redor da linha crítica (linha contínua vermelha) representa a região crítica clássica. Nesta região a física do sistema é dominada pela flutuações térmicas e por tal motivo o modelo nesta região comporta-se efetivamente como o modelo clássico.

Como esperado neste caso, a região abaixo da linha crítica corresponde-se à fase ordenada na qual o sistema apresenta ordem de longo alcance. Já a região delimitada pela linha tracejada corresponde-se a região quântica desordenada na qual o sistema apresenta ordem apenas de curto alcance, nessa região espera-se que as propriedades do sistema sejam independentes da temperatura devido a que este é um regime essencialmente dominado pelas flutuações quânticas. Por outro lado a temperatura finita na região que correspondente ao ponto crítico quântico encontramos a região crítica quântica, nesta região o sistema apresenta ordem só de curto alcance, mas diferentemente da região quântica desordenada, nesta região tem-se uma dependência importante das propriedades do sistema com a temperatura. A dependência das propriedades do sistema com

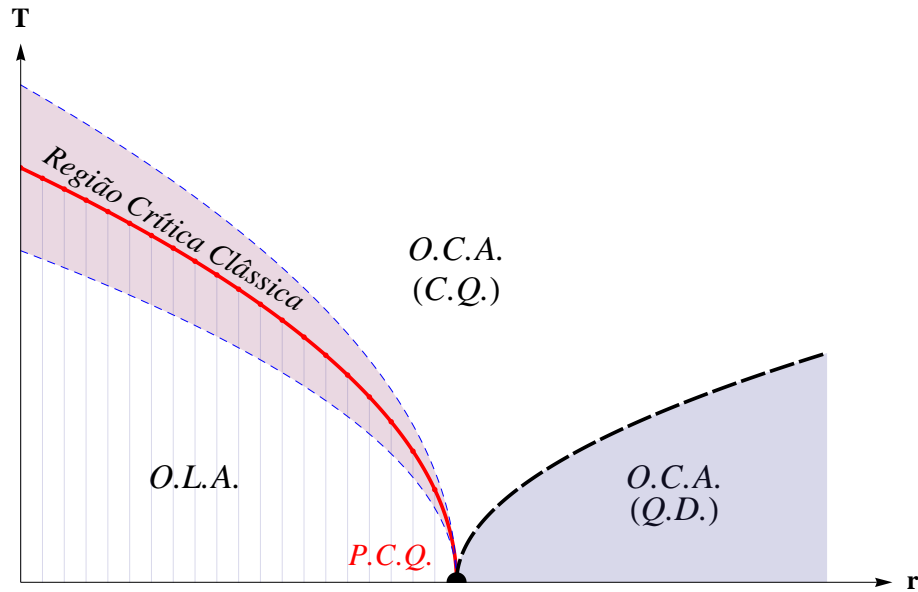


Figura 5.2: Diagrama de fases qualitativo do modelo de rotores com interações de longo alcance ($\sigma < 2$). A natureza das regiões assim como a notação utilizada é explicada no texto.

a temperatura são dedutíveis a partir da forma da susceptibilidade calculada nessa região. A forma específica da susceptibilidade na região crítica quântica, depende do alcance da interação e da dimensão do sistema na forma descrita anteriormente. Desta forma completa-se o estudo da ordem orientacional, em sistemas quânticos de faixas com interações competitivas.

5.4 Cristal de faixas a temperatura zero.

Nesta seção vamos concentrar-nos no estudo de outra propriedade topológica dos sistemas quânticos de faixas: a sua ordem posicional. Esta classe de ordem a temperatura finita pode-se mostrar que não é estável. Já a temperatura zero o sistema ainda quando só possui interações repulsivas de curto alcance, estabiliza uma fase com ordem posicional de longo alcance também chamada de fase esmética. Isto significa que uma fase tipo cristal de faixas, a temperatura zero, existe no modelo estudado independentemente da natureza das interações microscópicas no sistema.

A ordem esmética, dentro dos diferentes tipos de ordens topológicos existentes em sistemas quânticos de faixas, é uma questão ainda pesquisada na literatura em diferentes contextos [79, 80, 81]. Nesta seção pretende-se estudar, no modelo mais simples possível, a quebra da simetria translacional em um sistema de faixas. A modelagem é simplificada grandemente após assumir que o sistema pode-se modelar mediante um

único campo de densidade. Muitos trabalhos presentes na literatura incorporam a interação entre graus de liberdade de diferente natureza, como carga e spin e embora isto é desejável, pois torna os modelos mais realistas, muitas vezes produz tantas complicações que a ao final, não se consegue esclarecer a física relevante do problema. Neste sentido, ainda hoje, não existe na literatura uma teoria bem estabelecida para a transição esmética em sistemas quânticos de faixas. Assim o nosso objetivo a seguir, será a construção de uma teoria para a transição esmética, partindo de um modelo microscópico efetivo. Para isto mostraremos como construir a ação apropriada para descrever a quebra da simetria translacional no sistema e posteriormente usando renormalização perturbativa calcularemos os expoentes críticos da transição em diferentes casos de interesse.

A ordem posicional nos sistemas de faixas pode ser estudado a nível Gaussiano mediante uma ação do tipo 5.4. A seguir é usada uma versão generalizada desta ação que possui em geral n direções “duras” e $d - n$ direções “moles”. Tal ação será:

$$\mathcal{S}_0 = \frac{1}{2} \int \frac{d^n k_{\parallel}}{(2\pi)^n} \frac{d^{d-n} k_{\perp}}{(2\pi)^{d-n}} \frac{d\omega}{2\pi} \left(\rho_0 \omega^2 + \rho_1 k_{\parallel}^2 + \rho_2 k^{\sigma-2} k_{\perp}^4 \right) \hat{u}(\vec{k}, i\omega) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega). \quad (5.41)$$

onde as constantes de acoplamento ρ_0 , ρ_1 e ρ_2 são todas definidas positivas. A notação direção “dura” ou “mole”, faz referencia ao fato de que em determinadas direções o custo energético de flutuações de longo comprimento de onda $k \rightarrow 0$ são muito maiores que em outras. Como vemos da ação 5.41, para perturbações de igual amplitude, aquelas produzidas na direção longitudinal (paralela) terão um custo muito maior que as produzidas na direção transversal (perpendicular), no limite de longos comprimentos de onda.

Como consequência desta ação, a função de correlação Gaussiana será:

$$\langle \hat{u}(\vec{k}, i\omega) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega) \rangle = \frac{1}{\left(\rho_0 \omega^2 + \rho_1 k_{\parallel}^2 + \rho_2 k^{\sigma-2} k_{\perp}^4 \right)}, \quad (5.42)$$

e portanto

$$\langle u^2 \rangle = \int \frac{d^n k_{\parallel} d^{d-n} k_{\perp}}{(2\pi)^d} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{\left(\rho_0 \omega^2 + \rho_1 k_{\parallel}^2 + \rho_2 k^{\sigma-2} k_{\perp}^4 \right)}. \quad (5.43)$$

É possível comprovar que a flutuação quadrática média em duas dimensões $\langle u^2 \rangle$ permanece finita no limite termodinâmico. Isto prova a estabilidade da fase esmética a temperatura zero, pelo menos para flutuações quânticas suficientemente fracas. Por outro lado, é fácil perceber que aumentando a intensidade das flutuações quânticas ($\rho^{-1} \rightarrow \infty$), a flutuação quadrática média do campo de deformação diverge. Consequentemente,

neste limite a fase esmética perde a sua estabilidade inclusive para temperatura zero. Este cenário sugere a existência de uma transição de fase quântica para uma certa intensidade das flutuações.

O nosso objetivo a seguir será a caracterização da transição de fase quântica, entre a fase com ordem posicional de longo alcance (fase esmética) e a fase posicionalmente desordenada. Com tal fim, primeiramente analisamos o papel dos termos usuais de maior ordem na classe de Hamiltonianos sob estudo. Como veremos, é possível mostrar que a temperatura zero esses termos de maior ordem são irrelevantes do ponto de vista do grupo de renormalização. Para continuar discutimos quais termos de ordem superior devem ser considerados para apropriadamente descrever a fase esmética e a transição de fase quântica. Finalmente, nesta seção, se mostra como mediante o uso das técnicas do grupo de renormalização perturbativo, se encontram os expoentes críticos da transição numa expansão até um laço.

5.4.1 Termos de ordem superior na teoria elástica padrão

Para estudar o papel dos termos de maior ordem, na teoria elástica usual de sistemas de faixas, consideraremos o caso onde estão presentes apenas interações de curto alcance em d dimensões. Este é o caso mais estudado na literatura até o momento e por tal razão procedemos fixando $\sigma = 2$. A contribuição dos termos de ordem superior ao quadrático à ação total, de acordo com a teoria elástica generalizada [46, 51, 24] será:

$$\mathcal{S}_i = \frac{1}{2} \int_0^\infty d\tau \int d^d x \left(-v \partial_{\parallel} u (\vec{\nabla} u)^2 + \frac{v}{4} (\vec{\nabla} u)^4 \right). \quad (5.44)$$

O aparecimento destes termos é resultado de considerar qual a contribuição que têm que ser adicionada à ação Gaussiana, para a ação total recuperar a simetria ante rotações do sistema de coordenadas. A dedução da expressão (5.44) encontra-se, por exemplo, no livro de P.M. Chaikin e T.C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* [46].

Considerando a forma da equação (5.44), está implícito que só temos uma direção espacial dura correspondente à direção ao longo da qual se estende a modulação do parâmetro de ordem. Para analisar a relevância dos termos de ordem superior desde a perspectiva do grupo de renormalização, começamos estudando em maior detalhe a ação Gaussiana \mathcal{S}_0 . Consideremos pelo momento que \mathcal{S}_0 inclui um termo de massa r , desta forma a ação Gaussiana tem a forma:

$$\mathcal{S}_0 = \frac{1}{2} \int \frac{d^n k_{\parallel}}{(2\pi)^n} \frac{d^{d-n} k_{\perp}}{(2\pi)^{d-n}} \frac{d\omega}{2\pi} \left(\rho_0 \omega^2 + \rho_1 k_{\parallel}^2 + \rho_2 k_{\perp}^4 + r \right) \hat{u}(\vec{k}, i\omega) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega). \quad (5.45)$$

onde o número de direções espaciais duras n , é igual a um. É possível comprovar que se fossem re-escalados os comprimentos, a frequência e o campo $u(\vec{k}, i\omega)$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} k'_{\parallel} &= bk_{\parallel} \\ k'_{\perp} &= ck_{\perp} \\ u(\vec{k}', i\omega)' &= z^{-1}u(\vec{k}, i\omega) \\ \omega' &= \lambda\omega, \end{aligned} \tag{5.46}$$

exigir a existência de um ponto fixo, com constantes de interação ρ 's finitas, permite concluir que:

$$\begin{aligned} c &= b^{1/2} \\ z &= b^{\frac{d+n+6}{4}} \\ \lambda &= b. \end{aligned} \tag{5.47}$$

Onde, como dito anteriormente, $n = 1$. Neste ponto é simples mostrar que a “massa” r escala como:

$$r' = b^2 r. \tag{5.48}$$

Foquemos então, nos termos de ordem superior novamente. Devido ao caráter anisotrópico da ação Gaussiana (Eq. 5.45), é possível perceber que ao escrever a contribuição de ordem superior (Eq. 5.44) expandida em termos das contribuições longitudinais e transversais, as diferentes combinações de termos contendo derivadas transversais ou longitudinais, escalam de forma diferente. Assim devido a que as diferentes constantes de acoplamento, escalam de forma diferente na contribuição de ordem superior, é necessário escrever a equação (5.44) da seguinte forma generalizada:

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_i &= \int_0^{\infty} d\tau \int d^d x \left(-v_{11}(\partial_{\parallel} u)^3 - v_{12}\partial_{\parallel} u(\vec{\nabla}_{\perp} u)^2 \right. \\ &\quad \left. + v_{21}(\partial_{\parallel} u)^4 + v_{22}(\partial_{\parallel} u)^2(\vec{\nabla}_{\perp} u)^2 + v_{23}(\vec{\nabla}_{\perp} u)^2 \right). \end{aligned} \tag{5.49}$$

Neste ponto, se usamos as relações de escala obtidas para o campo u e para as componentes perpendicular e paralela do vetor de onda, é possível obter as leis de escala das constantes de acoplamento no termo de ordem

superior S_i (Eq. 5.49):

$$\begin{aligned}
v'_{11} &= b^{-\frac{2+d+n}{4}} v_{11} \\
v'_{12} &= b^{-\frac{d+n-2}{4}} v_{12} \\
v'_{21} &= b^{-\frac{d+n+2}{2}} v_{21} \\
v'_{22} &= b^{-\frac{d+n}{2}} v_{22} \\
v'_{23} &= b^{-\frac{d+n-2}{2}} v_{23}.
\end{aligned} \tag{5.50}$$

Considerando agora que $d \geq 2$ e $n = 1$, podemos comprovar que todos os termos envolvidos na contribuição de ordem superior à ação S_i são irrelevantes no sentido do grupo de renormalização. Este é um resultado muito interessante pois basicamente implica que não é esta contribuição aquela responsável pela transição de fase entre a fase com ordem posicional de longo alcance e a fase desordenada a temperatura zero.

5.4.2 Construção da teoria efetiva da transição esmética

Para entender o que esta faltando na nossa teoria, precisamos voltar à definição da função de partição de nosso modelo:

$$Z = \int D[\phi] \exp(-S[\phi]). \tag{5.51}$$

Consideremos agora que temos uma modulação em media orientada na direção “ x ”, para o qual o parâmetro de ordem está dado por:

$$\phi = f(k_0 x + k_0 u(\vec{x})). \tag{5.52}$$

Considerando este “ansatz”, como discutido no início deste capítulo, é possível escrever a ação original $S[\phi]$ como:

$$S[\phi] = \Delta S_0 + S_{ef}[u]. \tag{5.53}$$

Onde ΔS_0 representa a ação correspondente ao estado básico e $S_{ef}[u]$ representa a nossa ação efetiva total $S_0[u] + S_i[u]$ (equações 5.41 e 5.49). Assim $S_{ef}[u]$ é usada para construir uma teoria efetiva e uma função de partição efetiva, dada como a integral de configurações do campo de deformação u . Se ao invés de proceder desta forma, seguíssemos o caminho formal de re-escrever a integral de configurações sobre ϕ como uma integral de configurações sobre u mediante via uma mudança de variáveis, perceberíamos que o Jacobiano desta transformação aporta uma contribuição não trivial à integral de configurações. Procedemos então expressando $D[\phi]$ como $\prod_i d\phi_i$ em uma versão discretizada da medida na integral funcional. A seguir

utilizamos a conhecida relação entre ϕ e u para escrever:

$$\begin{aligned} \prod_i d\phi_i &= \prod_i \frac{\partial f}{\partial \xi}(\xi_i) k_0 du_i \\ &= \exp\left(\frac{1}{2} \sum_i \ln\left(\frac{\partial f}{\partial \xi}(\xi_i)^2\right)\right) \prod_i k_0 du_i \\ &\propto D[u] \exp\left(\frac{1}{2} \rho \int_0^\infty d\tau \int d^d x \ln\left(\frac{\partial f}{\partial \xi}(\xi(\vec{x}))^2\right)\right), \end{aligned} \quad (5.54)$$

onde $\partial_\xi f(\xi)$, representa a derivada da função de perfil respeito da fase da modulação, $\xi(\vec{x})$ representa a fase da modulação no ponto \vec{x} e ρ corresponde-se à densidade de pontos do sistema.

Considerando então que a fase da modulação é: $\xi(\vec{x}) = k_0 x + k_0 u(\vec{x})$, escrevemos $\partial_\xi f(\xi)$ diretamente como $f'(k_0 x + k_0 u(x))$, esta notação mostra claramente a dependência do novo termo em u . Desta forma a nossa função de partição é reescrita como:

$$Z = \int D[u] \exp\left(-S_{ef}[u] + \frac{1}{2} \rho \int_0^\infty d\tau \int d^d x \ln[f'(k_0 x + k_0 u(x))^2]\right). \quad (5.55)$$

Analisemos então o resultado anterior. Primeiramente notamos que a função de perfil $f(k_0 x)$ de fato representa a função de perfil media sobre uma certa escala de comprimentos. Se estivermos na presença de uma fase esmética, a media sobre todo o sistema daria como resultado um perfil não trivial. Por outro lado, se estivermos na presença de uma fase com ordem posicional só de curto alcance o perfil médio será uma constante, se a media for feita sobre todo o sistema. Isto significa que a presença do termo adicional que contém a derivada da função de perfil, na função de partição, é um resultado aplicável na região na qual $\langle u^2 \rangle \lesssim \lambda$. Notemos que no nosso caso, a temperatura zero, os modos de Goldstone não são capazes de desordenar o sistema e consequentemente $\langle u^2 \rangle$ permanece finito e pequeno o suficiente numa certa região do espaço de parâmetros. É exatamente este cenário que da suporte à ideia de uma fase esmética.

Para proceder expandimos o termo $\ln[f'(k_0 x + k_0 u(x))^2]$ em potencias de u e substituímos os coeficientes dependentes da posição na expansão, pela sua media sobre o comprimento de modulação $2\pi/k_0$. Como resultado obtemos que o termo original pode ser substituído por um termo da forma $r_0 - ru(x)^2 - 2vu(x)^4$, onde os acoplamentos v e r são dados mediante integrais que envolvem a função de perfil. Este tipo de aproximação resulta valida no regime em que as flutuações do campo u são pequenas, nesta região pode mostrar-se que r e v tomam valores positivos, como deve ser para garantir a estabilidade da fase esmética. Para flutuações quânticas de maior intensidade a fase esmética desestabiliza-se e a transição de fase acontece.

Neste contexto a forma mais simples de modelar esse processo é estudar o que acontece no nosso modelo ao variar r de valores positivos até valores negativos pequenos.

Assim fica claro qual ação deve ser utilizada para estudar a quebra da simetria translacional num estado de faixas posicionalmente ordenadas. Tal ação será:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = & \frac{1}{2} \int \frac{d^n k_{\parallel}}{(2\pi)^n} \frac{d^{d-n} k_{\perp}}{(2\pi)^{d-n}} \frac{d\omega}{2\pi} \left(\rho_0 \omega^2 + \rho_1 k_{\parallel}^2 + \rho_2 k^{\sigma-2} k_{\perp}^4 \right) \hat{u}(\vec{k}, i\omega) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega) \\ & + \int_0^{\infty} d\tau \int d^d x \left(\frac{r}{2} u(x, \tau)^2 + v u(x, \tau)^4 \right), \end{aligned} \quad (5.56)$$

onde o parâmetro ρ foi absorvido na redefinição apropriada dos coeficientes r e v . No estudo das propriedades críticas da transição esmética faremos uso novamente das técnicas do grupo de renormalização perturbativo. Isto permitira obter valores não triviais para os expoentes críticos associados a transição.

A ação Gaussiana que contém os termos dominantes da ação original se escreve na forma:

$$\mathcal{S}_{e0} = \frac{1}{2} \int \frac{d^n k_{\parallel}}{(2\pi)^n} \frac{d^{d-n} k_{\perp}}{(2\pi)^{d-n}} \frac{d\omega}{2\pi} \left(\rho_0 \omega^2 + \rho_1 k_{\parallel}^2 + \rho_2 k_{\perp}^{\sigma+2} + r \right) \hat{u}(\vec{k}, i\omega) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega), \quad (5.57)$$

onde foi utilizado que a contribuição dominante do termo $k^{\sigma-2} k_{\perp}^4$ na ação original, será $k_{\perp}^{2+\sigma}$. Agora procedamos como anteriormente a determinar como o vetor de onda e o campo u da ação Gaussiana, escalam ante uma modificação da escala de comprimentos. Após uma re-escala do tipo (5.46) e exigindo a existência de um ponto fixo, com valores finitos das constantes de acoplamento, obtemos que:

$$\begin{aligned} c &= b^{\frac{2}{2+\sigma}} \\ z &= b^{\frac{6+2d+(n+3)\sigma}{2(2+\sigma)}} \\ \lambda &= b \\ r' &= b^2 r, \end{aligned} \quad (5.58)$$

onde, como explicado anteriormente, n representa o número de direções espaciais duras no modelo. Agora podemos estudar como as constantes de acoplamento do termo quártico (v) escala ante uma mudança na escala de comprimentos. Escrevendo o termo quártico no espaço de momento e frequência pode-se obter de forma direta que:

$$v' = b^{\frac{6+3\sigma-\sigma n-2d}{2+\sigma}} v. \quad (5.59)$$

Considerando o resultado anterior é direto concluir que a dimensão crítica superior será $d_v = (6+3\sigma-\sigma n)/2$. Utilizando então uma expansão diagramática até um laço, típica nas teorias ϕ^4 , podemos chegar nas seguintes equações de fluxo para as constantes de acoplamento renormalizadas:

$$\begin{aligned}\frac{dr}{dl} &= 2r + \frac{4v(n_0 + 2)K_d\Lambda^d W}{r + \rho_0 W^2 + \rho_1 \Lambda^2 + \rho_2 \Lambda^{\sigma+2}} \\ \frac{dv}{dl} &= \epsilon v - \frac{4v^2(n_0 + 8)K_d\Lambda^d W}{(r + \rho_0 W^2 + \rho_1 \Lambda^2 + \rho_2 \Lambda^{\sigma+2})^2},\end{aligned}\quad (5.60)$$

onde $\epsilon = \frac{2}{2+\sigma}(d_v - d)$ e Λ e W representam os valores de corte superiores do vetor de onda e da frequência respectivamente. Como no passado, o parâmetro K_d representa um fator dimensional sem importância e n_0 corresponde-se com o numero de componentes do campo $u(x, \tau)$, um no nosso caso. Como podemos verificar, para $d < d_v$ existe um ponto fixo não trivial. Linearizando então as equações do fluxo de renormalização na vizinhança do ponto crítico é possível obter que:

$$\begin{aligned}\xi &\propto (|\delta r|)^{-\nu}, \quad \nu = \frac{1}{2} + \frac{(n+2)\epsilon}{(n+8)4} \\ \chi &\propto (|\delta r|)^{-\gamma}, \quad \gamma = 1 + \frac{(n+2)\epsilon}{(n+8)2}.\end{aligned}\quad (5.61)$$

Agora é simples calcular os valores específicos destes expoentes em duas dimensões como função de σ , o que resulta em:

$$\begin{aligned}\nu &= \frac{1}{2} + \frac{1}{6} \frac{(1+\sigma)}{(2+\sigma)} \\ \gamma &= 1 + \frac{1}{3} \frac{(1+\sigma)}{(2+\sigma)} \\ \alpha &= \frac{1}{2} - \frac{(1+\sigma)}{2(2+\sigma)}.\end{aligned}\quad (5.62)$$

Assim para $\sigma \geq 2$ temos:

$$\nu = \frac{5}{8}, \quad \gamma = \frac{5}{4}, \quad \alpha = \frac{1}{8}.\quad (5.63)$$

Estes valores são os correspondentes a sistemas com interações de curto alcance. Em particular, sistemas com interação repulsiva do tipo dipolar pertence a esta categoria, assim os valores calculados representam aproximações dos expoentes críticos exatos destes sistemas. Por outro lado, um caso fisicamente relevante de sistema com interação de longo alcance será o caso onde a interação repulsiva seja a interação Coulombiana

($\sigma = 1$), neste caso teríamos:

$$\nu = \frac{11}{18}, \quad \gamma = \frac{11}{9}, \quad \alpha = \frac{1}{6}. \quad (5.64)$$

Desta forma completa-se o estudo das propriedades críticas da transição esmética em sistemas quânticos de faixas.

Na presente seção mostramos como construir a ação, para descrever a quebra da simetria translacional num sistema de faixas, na presença de flutuações quânticas. Adicionalmente consideramos, que o sistema só tem um grau de liberdade relevante, modelado como um dado campo de densidade, que apresenta modulações espacialmente distribuídas. Este é o caso mais simples possível, onde pode-se estudar a quebra espontânea da simetria translacional. A pesar da aparente simplicidade, como mostrado, a teoria elástica usual não é capaz de captar o mecanismo por trás da quebra da simetria translacional. Foi preciso a construção de uma nova teoria efetiva, para descrever a transição esmética. A nossa conclusão neste sentido é que na medida que a flutuação quadrática média do campo de deformação $\langle u^2 \rangle$ diminui, produto de diminuição das flutuações quânticas, eventualmente chegamos num estado com desvio médio ($\sqrt{\langle u^2 \rangle}$) da ordem do comprimento de modulação. Neste estado, a ação efetiva para o campo de deformação não é mais invariante ante translações arbitrárias e as flutuações posicionais passam a ter maior custo energético, isto faz com que o sistema desenvolva uma rigidez adicional, o qual é responsável pela estabilização da fase tipo cristal.

Os resultados apresentados esclarecem varias propriedades da transição esmética, em particular foram calculados o conjunto de expoentes críticos para diferentes classes de sistemas: aqueles com interações de curto alcance ($\sigma \geq 2$) os quais pertencem a mesma classe de universalidade e aqueles com interações de longo alcance ($\sigma < 2$) para os quais as propriedades críticas dependem do alcance da interação (σ). A construção de uma teoria generalizada para descrever, a fase tipo cristal de um sistema de faixas com interações de longo alcance é um dos principais resultados obtidos neste capítulo, devido as possíveis implicações na compreensão desta classe de fases, em materiais tecnologicamente interessantes.

5.5 Conclusões

Neste capítulo foram estudadas as propriedades topológicas de sistemas de faixas na presença de flutuações quânticas e térmicas. Com este objetivo foi desenvolvida uma técnica, análoga àquela mostrada no capítulo 4, capaz de descrever a transição orientacional em sistemas quânticos de faixas com interações de curto ou longo alcance. No nosso conhecimento não existe uma teoria para a fusão de sistemas de faixas

aceita pela comunidade, que partindo dos graus de liberdade “microscópicos” obtenha a ação efetiva que descreve a quebra da simetria rotacional num sistema de faixas. Existem muitos trabalhos dedicados ao estudo da fase nemática nos chamados “cristais líquidos eletrônicos” e em outros sistemas quânticos fortemente correlacionados, no entanto a metodologia de trabalho utilizada comumente consiste em estudar ações efetivas do tipo Ginsburg-Landau propostas seguindo argumentos de simetria. Embora esse caminho e legítimo, deduzir a forma da ação efetiva a partir de uma teoria microscópica é muito mais esclarecedor da física, dos mecanismos envolvidos nas transições de fase.

Como resultado do nosso estudo foi mostrado que o problema da transição de fase orientacional em sistemas quânticos de faixas com interações competitivas em duas dimensões é mapeável ao problema da transição à fase ordenada de um sistema de rotores quânticos em igual dimensão. Assim para sistemas com interações de suficiente curto alcance ($\sigma \geq 2$) o modelo de rotores equivalente, apresenta somente interações locais, como era de se esperar. No entanto, em sistemas com interações repulsivas de longo alcance ($\sigma > 2$) se produz efetivamente uma interação atrativa não local, entre os dipolos elementares que formam as faixas. Este mecanismo clássico sobrevive no sistema quântico e é o responsável pelo estabelecimento de fases com ordem orientacional de longo alcance em sistemas com $\sigma < 2$.

O mapeamento do problema original num problema de rotores quântico, permitiu deduzir as propriedades críticas da transição nemática. Isto em parte devido a resultados prévios da literatura para essa classe de modelos e em parte devido a cálculos apresentados neste capítulo. Assim foi possível a construção qualitativa dos diagramas de fase para a ordem orientacional como função da temperatura e da intensidade das flutuações quânticas para sistemas que apresentem interações repulsivas de curto ou de longo alcance. Uma das consequências do trabalho desenvolvido é a caracterização completa da transição nemática a temperatura zero, em sistemas com interações de curto alcance, devido ao conhecimento das propriedades críticas do modelo XY em $3D$ via simulações numéricas [64, 67, 68]. Por outro lado, um dos principais resultados obtido no presente capítulo é a predição dos expoentes críticos exatos da transição nemática, para o sistema com interação repulsiva Coulombiana. Do ponto de vista físico o estudo deste caso é interessante, devido ao grande número de sistemas nos quais a interação repulsiva Coulombiana compete com alguma interação atrativa de curto alcance, produzindo fases anisotrópicas de faixas.

A existência de tais fases anisotrópicas em vários sistemas é um fato já comprovado experimentalmente [82, 83]. No entanto a caracterização rigorosa dos diagramas de fase e das transições que acontecem nestes sistemas não é possível ainda devido às limitações do ponto de vista experimental. Neste sentido embora os nossos resultados não possam ser comparados diretamente com resultados experimentais, para expoentes críticos por exemplo, ainda podem contribuir ao entendimento dos mecanismos que produzem

comportamentos anisotrópicos em sistemas quânticos de faixas. Neste capítulo justamente, foi mostrada a existência de um mecanismo microscópico capaz de produzir comportamentos anisotrópicos em sistemas de faixas com interações repulsivas de longo alcance. Seria interessante em futuros trabalhos aperfeiçoar o presente modelo de forma que seja possível calcular a resposta do sistema a perturbações externas, como campos elétricos ou gradientes de temperatura. Isto permitiria o cálculo de quantidades como a condutividade elétrica ou térmica de forma analítica, o que por sua vez facilitaria a comparação com resultados experimentais considerando que tais magnitudes são medíveis experimentalmente com relativa facilidade.

Por ultimo, mas não menos importante, foi estudado no presente capítulo a fase esmética, que existe nos sistemas quânticos de faixas, a temperatura zero. Após a construção de uma teoria efetiva para descrever o campo de deformação das faixas, foram calculados os expoentes críticos da transição à fase esmética. Uma das questões que vale a pena discutir neste momento é qual é a possível relação entre as fases esmética e nemática estudadas neste capítulo. Lembrando que a fase esmética só existe a temperatura zero, vemos que apenas sobre a linha $T = 0$ é de se esperar uma transição de fase entre a fase esmética e a fase nemática. A questão como os nossos resultados refletem essa transição é analisada a seguir.

Primeiramente é importante perceber que quando se tem uma densidade de deslocções finita das equações (5.19) e (4.51), podemos concluir que a função de correlação posicional será:

$$\begin{aligned} \langle \hat{u}(\vec{k}, i\omega) \hat{u}(-\vec{k}, -i\omega) \rangle &= \frac{1}{k_y^2} \langle \hat{\theta}(\vec{k}, i\omega) \hat{\theta}(-\vec{k}, -i\omega) \rangle \\ &= \frac{k_B T}{k_y^2 (4E_d a^2 \rho \omega^2 / d^2 + B \lambda^2 k_y^2 k_x^{\sigma-2} + 2E_d a^2 k_x^2 / d^2)}. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Este resultado implica que a flutuação posicional quadrática média $\langle u^2 \rangle$, diverge no limite termodinâmico, uma vez que se têm no sistema uma densidade finita de deslocções. Assim este resultado indica que o mecanismo de perda da ordem posicional não está relacionado às deslocções. Já que como mostrado anteriormente uma densidade finita de deslocções instabiliza completamente a fase esmética. É claro que isto não significa que na fase esmética não possam existir deslocções isoladas, no entanto segundo a nossa análise, a quantidade delas nesta fase teria que ser sempre uma quantidade estatisticamente irrelevante, de forma a não alterar a estabilidade da fase.

Por outro lado, considerando o fato conhecido de que a transição nemática é produzida pela quebra de pares de deslocções com o conseqüente aumento da mobilidade das mesmas, é possível concluir que as transições esmética e nemática acontecem em regimes completamente diferentes em termos da intensidade das flutuações quânticas. É importante aclarar que na fase esmética, além da ordem posicional de longo alcance também existe ordem orientacional de longo alcance, este é um resultado simples de mostrar a partir

da equação (4.51). Desta forma, considerando a discussão previa, é possível concluir que o diagrama de fases qualitativo nos sistemas quânticos de faixas a temperatura zero, independentemente do alcance das interações repulsivas, têm a forma mostrada na figura (5.3).

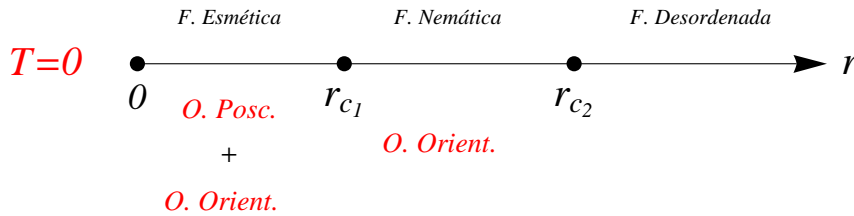


Figura 5.3: Diagrama de fases qualitativo para os sistemas quânticos de faixas a temperatura zero. Os valores r_{c_1} e r_{c_2} , indicam os pontos críticos quânticos das transições esmética-nemática e nemática-desordenada respectivamente. Como explicado no texto, na fase esmética os sistemas apresentam tanto ordem posicional quanto orientacional, enquanto que na fase nemática os sistemas apenas possuem ordem orientacional.

Embora o diagrama de fases qualitativo apresentado, seja válido para sistemas tanto com interações tanto de curto como de longo alcance, existem diferenças importantes no comportamento de ambas classes de sistemas na vizinhança de $T = 0$, como explicado a seguir. Para sistemas com interações de curto alcance a temperatura finita, a ordem orientacional é apenas de quase longo alcance (fase KT) na fase “ordenada”, enquanto que a temperatura zero a fase orientacional apresenta ordem de longo alcance. Isto significa que para a ordem orientacional, a linha $T = 0$ com $r \in [0, r_{c_2})$, é de fato uma linha crítica de primeira ordem que termina em um ponto ($T = 0, r = r_{c_2}$), onde a transição é de segunda ordem. Diferentemente, em sistemas com interações de suficiente longo alcance ($\sigma < 2$), a ordem orientacional não apresenta nenhuma transição conforme nos aproximamos à linha $T = 0$ com $r \in [0, r_{c_2})$.

Por outro lado, sobre a ordem posicional sabemos que a mesma é instável a temperatura finita, e que a temperatura zero a fase esmética é estável. Isto permite concluir que para a ordem posicional, a linha $T = 0$ com $r \in [0, r_{c_1})$ será uma linha crítica de primeira ordem, que termina em um ponto ($T = 0, r = r_{c_1}$) de transição de segunda ordem. Não é difícil perceber que esta propriedade do diagrama de fases é comum a sistemas com interações de curto ou longo alcance.

Assim completa-se o estudo das propriedades topológicas de sistemas quânticos de faixas. Os resultados apresentados neste capítulo mostram a riqueza de comportamentos exibida por estes sistemas, as fases estudadas e outras não discutidas nesta Tese, tem atraído nos últimos anos o interesse da comunidade científica devido às muitas potenciais aplicações destes materiais.

Capítulo 6

Conclusões gerais

Nesta tese de doutorado foram estudadas alguns aspectos das fases anisotrópicas em sistemas isotrópicos com interações competitivas. Em particular, sistemas nos quais existe uma interação de curto alcance atrativa e outra de longo alcance repulsiva. Ao longo do nosso estudo focamos em alguns pontos como: as propriedades locais destes sistemas, a existência de uma fase nemática e as condições para o estabelecimento da ordem orientacional ou posicional no limite termodinâmico, tanto em sistemas clássicos como em quânticos. Nestes aspectos encontramos vários resultados de interessantes, dentro dos quais se destacam os seguintes:

- A evidência de uma forte dependência nas propriedades locais destes sistemas frente a variações “menores” do espectro de flutuações.
- A existência de uma anomalia no módulo de compressibilidade dos sistemas de faixas numa classe maior de sistemas do que tinha sido proposto anteriormente. Isto de acordo com a literatura [32], deve derivar numa classe maior de sistemas que apresentem uma transição inversa no diagrama de fases $H - T$.
- O surgimento da solução nemática, além da solução desordenada, como solução do conjunto de equações da SCSA para um sistema genérico com competição.
- O estabelecimento da transição de fase contínua, isotrópica-nemática, no contexto da SCSA.
- A inexistência de uma fase com ordem posicional de longo alcance ou de quase longo alcance em sistemas clássicos para todo alcance da interação repulsiva.

- O surgimento de uma interação atrativa efetiva, nos sistemas de faixas, capaz de estabilizar uma fase com ordem orientacional de longo alcance sempre que a interação repulsiva ($1/r^\alpha$) for de suficiente longo alcance ($\alpha < 2$). Neste caso o sistema apresenta uma transição orientacional de segunda ordem com características especiais.
- Nos sistemas estudados, aqueles com interações repulsivas com $\alpha \geq 2$ pertencem a classe de universalidade K-T.
- A construção de uma teoria generalizada da fusão orientacional em sistemas de faixas, a qual permite mostrar que o estudo da ordem orientacional em sistemas de faixas é mapeável no estudo da fase ordenada de um sistema de rotores. Esse mapeamento sobrevive com a adequada generalização ainda quando no problema original tenhamos interações de longo alcance.
- A extensão a sistemas quânticos de faixas, da teoria clássica da fusão orientacional. Neste contexto foi possível mostrar que o problema quântico da fusão orientacional é novamente mapeável no estudo de um sistema de rotores, quânticos neste caso.
- A utilização de resultados prévios discutidos na literatura assim como das técnicas do grupo de renormalização, permitiram a caracterização da transição orientacional quântica em sistemas com interações tanto de curto alcance ($\sigma \geq 2$) quanto de longo alcance ($\sigma < 2$).
- A descrição dos diagramas de fases qualitativos para a ordem orientacional do sistema de faixas nos diferentes casos possíveis.
- A demonstração da existência da fase esmética a zero temperatura para sistemas quânticos, assim como a determinação dos expoentes críticos não triviais para a transição da fase tipo cristal à fase posicionalmente desordenada.

6.1 Lista de Publicações

- *Stochastic dynamics in real time for discrete-variable classical models.*
arXiv preprint arXiv:1503.03346 (2015). Alejandro Mendoza-Coto, Rogelio Díaz-Méndez, Guido Pupillo
- *Nature of Long-Range Order in Stripe-Forming Systems with Long-Range Repulsive Interactions.*
Phys. Rev. Lett. 114, 116101 (2015). Alejandro Mendoza-Coto, Daniel A. Stariolo, and Lucas Nicolao.
- *Nematic phase in stripe-forming systems within the self-consistent screening approximation.*
Phys. Rev. E 88, 062140 (2013). Daniel G. Barci, Alejandro Mendoza-Coto, and Daniel A. Stariolo.
- *Asymptotic dynamics of a frustrated model with spherical constraint.*
J. Magn. Magn. Mat., 345, 111, (2013). Alejandro Mendoza-Coto, R. Díaz-Méndez
- *Coarse-grained models of stripe forming systems: Phase diagrams, anomalies, and scaling hypothesis.*
Phys. Rev. E 86, 051130 (2012). Alejandro Mendoza-Coto and Daniel A. Stariolo.
- *Dynamics of systems with isotropic competing interactions in an external field: a Langevin approach.*
Eur. Phys. J. B 81, 309 (2011). R. Díaz-Méndez, A. Mendoza-Coto, R. Mulet, L. Nicolao, and D. A. Stariolo.

Apêndice A

A “*Self Consistent Screening Approximation*” no estudo da fase nemática.

Nesta seção mostramos os principais passos que conduzem à *Self Consistent Screening Approximation* (SCSA) usada para mostrar a existência da fase nemática em modelos tipo o modelo Brazovskii [12]. O Hamiltoniano efetivo de Ginzburg-Landau para um sistema isotrópico com um vetor de onda k_0 não nulo e parâmetro de ordem com simetria $O(n)$, pode ser escrito convenientemente no espaço recíproco como a soma de uma parte livre (Gaussiana):

$$H_0 = \int_{\Lambda} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{i=1}^n \phi_i(\vec{k}) (r_0 + A(k - k_0)^2) \phi_i(-\vec{k}), \quad (\text{A.1})$$

e uma parte de interação:

$$\mathcal{H}_i = v \int \left(\prod_{i=1}^4 \frac{d^2k_i}{(2\pi)^2} \right) \sum_{j,l=1}^n \phi_j(\vec{k}_1) \phi_j(\vec{k}_2) \phi_l(\vec{k}_3) \phi_l(\vec{k}_4) \delta^2(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 + \vec{k}_4), \quad (\text{A.2})$$

onde n é o número de componentes do parâmetro de ordem vetorial $\vec{\phi}(\vec{x})$. Note que a parte de interação é $\mathcal{O}(n)$ maior que a parte livre. Assim, para ter uma energia extensiva bem definida para n grande, é natural considerar que a interação v seja $\mathcal{O}(1/n)$. Desta forma, uma expansão em potências de v é equivalente a uma expansão em potências de $1/n$ [84, 85]. O limite $n \rightarrow \infty$ corresponde ao modelo esférico, o qual é solúvel exatamente [46]. A *Self Consistent Screening Approximation* é a primeira correção perturbativa, de ordem $1/n$, ao limite esférico [86].

A função de partição vem dada por:

$$Z(T) = \int \mathcal{D}\phi(\vec{x}) \exp \{ -(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_i) \}, \quad (\text{A.3})$$

onde a dependência com a temperatura foi absorvida nas definições de \mathcal{H}_0 e \mathcal{H}_i . Z pode ser convenientemente escrita em termos de uma expansão da parte de interação:

$$Z(T) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \langle \mathcal{H}_i^l \rangle_0 \int \mathcal{D}\phi(\vec{x}) \exp \{-\mathcal{H}_0\}, \quad (\text{A.4})$$

onde $\langle \dots \rangle_0$ significa média com o peso Gaussiano $P_0 \sim \exp \{-\mathcal{H}_0\}$. Desta expressão é possível escrever uma expansão perturbativa da função de correlação a dois pontos. Esta é:

$$G(\vec{k}) = \frac{\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \langle \phi_i(\vec{k}) \mathcal{H}_i^l \phi_i(-\vec{k}) \rangle_0}{\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \langle \mathcal{H}_i^l \rangle_0}. \quad (\text{A.5})$$

O primeiro termo nesta expansão representa o propagador livre $G_0(\vec{k}) = (r_0 + A(k - k_0)^2)^{-1}$. Organizando a expansão é possível mostrar que a mesma pode ser escrita na forma:

$$G^{-1}(\vec{k}) = G_0^{-1}(\vec{k}) + \Sigma(\vec{k}), \quad (\text{A.6})$$

Conhecida como “equação de Dyson” para as correlações. A função $\Sigma(\vec{k})$, a qual representa correções à função de correlação livre é conhecida como “auto-energia”. A auto-energia tem contribuições de todas as ordens em potências de $1/n$. Os termos de cada ordem em $1/n$ podem ser convenientemente representados por “diagramas de Feynmann” (para detalhes técnicos sobre a construção da representação diagramática ver, por exemplo, [84, 85, 87]). A soma de diagramas até ordem $\mathcal{O}(1/n)$ na equação de Dyson para $G(\vec{k})$ resulta em três diagramas mostrados na figura 1, onde a linha contínua representa um fator $G(\vec{k})$, o segmento descontínuo significa um fator v e o circuito fechado implica uma integração de $G(\vec{k})$ sobre o espaço k .

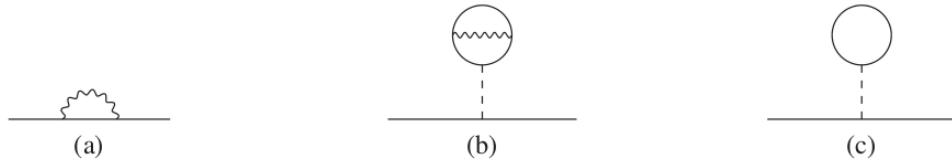


Figura 1

A linha ondulada corresponde a uma soma de infinitos diagramas de $\mathcal{O}(1/n)$, ou a uma interação renormalizada $\mathcal{D}(k)$ (ver Figura 2).

$$\text{~~~~~} = \text{-----} + \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{~~~~~}$$

Figura 2

A SCSA introduz uma contribuição k -dependente (diagrama 1-a). É possível reconhecer dos diagramas 1-b e 1-c o propagador de Hartree (constante), o qual é auto consistentemente renormalizado dentro da

SCSA (ver Figura 3-a). Finalmente, o propagar completo, dado pela equação de Dyson (A.6), é representado diagramaticamente na Figura 3-b.

$$r - r_0 = \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \circ \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} = v \int d^d q G(\vec{q}) \quad (\text{a})$$

$$\text{====} = \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \quad (\text{b})$$

Figura 3

Em soma, as funções que formam a aproximação são dadas por:

$$G(\vec{k}) = \frac{1}{G_0^{-1}(\vec{k}) + \Sigma(\vec{k})} \quad (\text{A.7})$$

$$\Sigma(\vec{k}) = \int \frac{d^2 \vec{q}}{(2\pi)^2} D(\vec{k} - \vec{q}) G(\vec{q}) \quad (\text{A.8})$$

$$D(\vec{k}) = \frac{v}{1 + v\Pi(\vec{k})} \quad (\text{A.9})$$

$$\Pi(\vec{k}) = \int \frac{d^2 \vec{q}}{(2\pi)^2} G(\vec{k} - \vec{q}) G(\vec{q}). \quad (\text{A.10})$$

A energia livre é dada por:

$$F(T) = -\log Z(T), \quad (\text{A.11})$$

onde o fator $k_B T$ foi absorvido na definição de F e a função de partição vem dada por (A.4). Manter termos de até $\mathcal{O}(1/n)$ conduz à SCSA para a energia livre [86, 88]:

$$F(T) = \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \log G^{-1}(\vec{k}) + \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \log D^{-1}(\vec{k}) - \frac{1}{2} \int \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} \Sigma(\vec{k}) G(\vec{k}). \quad (\text{A.12})$$

Referências Bibliográficas

- [1] K. De'Bell, A. B. MacIsaac, and J. P. Whitehead. *Rev. Mod. Phys.*, 72:225–257, Jan 2000.
- [2] O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia. *Nature*, 422:701–704, Apr 2003.
- [3] S. A. Kivelson, E. Fradkin, and V. J. Emery. *Nature*, 393:550–553, Jun 1998.
- [4] E. Fradkin and Steven A. Kivelson. *Phys. Rev. B*, 59:8065–8072, Mar 1999.
- [5] M. Seul, L. R. Monar, L. O’Gorman, and R. Wolfe. *Science*, 254(5038):1616–1618, 1991.
- [6] D. A. Vega, Christopher K. Harrison, Dan E. Angelescu, Matthew L. Trawick, David A. Huse, Paul M. Chaikin, and Richard A. Register. *Phys. Rev. E*, 71:061803, Jun 2005.
- [7] R. Ruiz, J. K. Bosworth, and C. T. Black. *Phys. Rev. B*, 77:054204, Feb 2008.
- [8] G. Malescio and G. Pellicane. *Phys. Rev. E*, 70:021202, Aug 2004.
- [9] A. Imperio and L. Reatto. *J. Chem. Phys.*, 124:164712, 2006.
- [10] E. Edlund and M. N. Jacobi. *Phys. Rev. Lett.*, 105:137203, Sep 2010.
- [11] M. Seul and D. Andelman. *Science*, 267(5197):476–483, 1995.
- [12] S. A. Brazovskii. *Science*, 41(85), 1975.
- [13] T. Garel and S. Doniach. *Phys. Rev. B*, 26:325–329, Jul 1982.
- [14] F. S. Bates, J. H. Rosedale, G. H. Fredrickson, and C. J. Glinka. *Phys. Rev. Lett.*, 61:2229–2232, Nov 1988.
- [15] N. Saratz, A. Lichtenberger, O. Portmann, U. Ramsperger, A. Vindigni, and D. Pescia. *Phys. Rev. Lett.*, 104:077203, Feb 2010.
- [16] S. A. Cannas, M. Carubelli, O. V. Billoni, and D. A. Stariolo. *Phys. Rev. B*, 84:014404, Jul 2011.
- [17] L. Nicolao and D. A. Stariolo. *Phys. Rev. B*, 76:054453, Aug 2007.
- [18] E. Fradkin, S. A. Kivelson, E. Manousakis, and K. Nho. *Phys. Rev. Lett.*, 84:1982–1985, Feb 2000.
- [19] S. A. Kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin, V. Oganessian, J. M. Tranquada, A. Kapitulnik, and C. Howald. *Rev. Mod. Phys.*, 75:1201–1241, Oct 2003.

- [20] M. P. Lilly, K. B. Cooper, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. *Phys. Rev. Lett.*, 82:394–397, Jan 1999.
- [21] R.R. Du, D.C. Tsui, H.L. Stormer, L.N. Pfeiffer, K.W. Baldwin, and K.W. West. *Solid State Communications*, 109(6):389 – 394, 1999.
- [22] C. Won, Y. Z. Wu, J. Choi, W. Kim, A. Scholl, A. Doran, T. Owens, J. Wu, X. F. Jin, H. W. Zhao, and Z. Q. Qiu. *Phys. Rev. B*, 71:224429, Jun 2005.
- [23] A. Vaterlaus, C. Stamm, U. Maier, M. G. Pini, P. Politi, and D. Pescia. *Phys. Rev. Lett.*, 84:2247–2250, Mar 2000.
- [24] Ar. Abanov, V. Kalatsky, V. L. Pokrovsky, and W. M. Saslow. *Phys. Rev. B*, 51:1023–1038, Jan 1995.
- [25] D. G. Barci and D. A. Stariolo. *Phys. Rev. B*, 84:094439, Sep 2011.
- [26] D. G. Barci, L. Ribeiro, and D. A. Stariolo. *Phys. Rev. E*, 87:062119, Jun 2013.
- [27] Sergio A. Cannas, Mateus F. Michelon, Daniel A. Stariolo, and Francisco A. Tamarit. *Phys. Rev. B*, 73:184425, May 2006.
- [28] D. G. Barci and D. A. Stariolo. *Phys. Rev. B*, 79:075437, Feb 2009.
- [29] A. Fisher J. Binney, N. Dowrick and M. Newman. *The Theory of Critical Phenomena*. Oxford University Press, Oxford, 1995.
- [30] D. G. Barci and D. A. Stariolo. *Phys. Rev. Lett.*, 98:200604, May 2007.
- [31] P. C. Hohenberg and J. B. Swift. *Phys. Rev. E*, 52:1828–1845, Aug 1995.
- [32] O. Portmann, A. Gölzer, N. Saratz, O. V. Billoni, D. Pescia, and A. Vindigni. *Phys. Rev. B*, 82:184409, Nov 2010.
- [33] J. Swift and P. C. Hohenberg. *Phys. Rev. A*, 15:319–328, Jan 1977.
- [34] M. Teubner and R. Strey. *J. Chem. Phys.*, 87:3195, 1987.
- [35] M. Lipkin K. Dawson and B. Widom. *J. Chem. Phys.*, 88:5149, 1988.
- [36] O. Portmann, A. Vaterlaus, and D. Pescia. *Phys. Rev. Lett.*, 96:047212, Feb 2006.
- [37] T. O. Menteş, A. Locatelli, L. Aballe, and E. Bauer. *Phys. Rev. Lett.*, 101:085701, Aug 2008.
- [38] E. Rastelli, S. Regina, and A. Tassi. *Phys. Rev. B*, 81:094425, Mar 2010.
- [39] N. Saratz, A. Lichtenberger, O. Portmann, U. Ramsperger, A. Vindigni, and D. Pescia. *Phys. Rev. Lett.*, 104:077203, Feb 2010.
- [40] Alejandro Mendoza-Coto and Daniel A. Stariolo. *Phys. Rev. E*, 86:051130, Nov 2012.
- [41] V. Oganesyan, S. A. Kivelson, and E. Fradkin. *Phys. Rev. B*, 64:195109, Oct 2001.
- [42] D. G. Barci and L. E. Oxman. *Phys. Rev. B*, 67:205108, May 2003.

- [43] M. J. Lawler, D. G. Barci, V. Fernández, E. Fradkin, and L. Oxman. *Phys. Rev. B*, 73:085101, Feb 2006.
- [44] D. G. Barci and D. Reyes. *Phys. Rev. B*, 87:075147, Feb 2013.
- [45] J. Nilsson and A. H. Castro Neto. *Phys. Rev. B*, 72:195104, Nov 2005.
- [46] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995.
- [47] D. A. Stariolo and D. G Barci. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 246, 2010.
- [48] Daniel G. Barci, Alejandro Mendoza-Coto, and Daniel A. Stariolo. *Phys. Rev. E*, 88:062140, Dec 2013.
- [49] John Toner and David R. Nelson. *Phys. Rev. B*, 23:316–334, Jan 1981.
- [50] Alejandro Mendoza-Coto, Daniel A. Stariolo, and Lucas Nicolao. *Phys. Rev. Lett.*, 114:116101, Mar 2015.
- [51] D. Sornette. *J. Phys. France*, 48(1):151–163, 1987.
- [52] Robert A. Pelcovits and B. I. Halperin. *Phys. Rev. B*, 19:4614–4620, May 1979.
- [53] P. G. Maier and F. Schwabl. *Phys. Rev. B*, 70:134430, Oct 2004.
- [54] M. E. Fisher, Shang-keng Ma, and B. G. Nickel. *Phys. Rev. Lett.*, 29:917–920, Oct 1972.
- [55] R. Díaz-Méndez, A. Mendoza-Coto, R. Mulet, L. Nicolao, and D.A. Stariolo. *The European Physical Journal B*, 81(3):309–319, 2011.
- [56] Soft spheres make more mesophases. *EPL (Europhysics Letters)*, 78(4):46004, 2007.
- [57] U. Löw, V. J. Emery, K. Fabricius, and S. A. Kivelson. *Phys. Rev. Lett.*, 72:1918–1921, Mar 1994.
- [58] Rafael M. Fernandes, Jörg Schmalian, and Harry Westfahl. *Phys. Rev. B*, 78:184201, Nov 2008.
- [59] C. Ortix, J. Lorenzana, and C. Di Castro. *Physica B: Condensed Matter*, 404(3–4):499 – 502, 2009. Proceedings of the International Workshop on Electronic Crystals.
- [60] Eduardo Fradkin. *Electronic Liquid Crystal Phases in Strongly Correlated Systems*, volume 843 of *Lecture Notes in Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [61] Subir Sachdev. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2011.
- [62] Georg M. Bruun and David R. Nelson. *Phys. Rev. B*, 89:094112, Mar 2014.
- [63] Aron J. Beekman, Kai Wu, Vladimir Cvetkovic, and Jan Zaanen. *Phys. Rev. B*, 88:024121, Jul 2013.
- [64] Takashi Yanagisawa. *Phys. Rev. B*, 46:13896–13904, Dec 1992.
- [65] J. K. Block and G. M. Bruun. *Phys. Rev. B*, 90:155102, Oct 2014.
- [66] Anne-Louise Gadsbølle and G. M. Bruun. *Phys. Rev. A*, 86:033623, Sep 2012.

- [67] Massimo Campostrini, Martin Hasenbusch, Andrea Pelissetto, Paolo Rossi, and Ettore Vicari. *Phys. Rev. B*, 63:214503, May 2001.
- [68] Kurt Langfeld. *Phys. Rev. D*, 87:114504, Jun 2013.
- [69] C. A. Hooley, S. T. Carr, J. M. Fellows, and J. Schmalian. Berezinskii–Kosterlitz–Thouless-type transitions in $d = 2$ quantum $O(2)$ and $O(2) \times O(2)$ nonlinear sigma models. J.P.S. Conference Proceedings, Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems., The Physical Society of Japan, 2014.
- [70] Sudip Chakravarty, Bertrand I. Halperin, and David R. Nelson. *Phys. Rev. B*, 39:2344–2371, Feb 1989.
- [71] Mehran Kardar. *Statistical Physics of Fields*. Cambridge University Press, 2012.
- [72] Le Gillou J.C. Brézin, E. and J. Zinn-Justin. *Phase Transitions and Critical Phenomena*. Academic Press, London, 1976.
- [73] E. Brézin and J. Zinn-Justin. *Phys. Rev. B*, 14:3110–3120, Oct 1976.
- [74] Amit Dutta and J. K. Bhattacharjee. *Phys. Rev. B*, 64:184106, Oct 2001.
- [75] M. Lüscher. *Physics Letters B*, 118(4–6):391 – 394, 1982.
- [76] Joseph Rudnick, Hong Guo, and David Jasnow. *Journal of Statistical Physics*, 41(3-4):353–373, 1985.
- [77] A D Bruce and D J Wallace. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 9(7):1117, 1976.
- [78] David R. Nelson and Joseph Rudnick. *Phys. Rev. Lett.*, 35:178–181, Jul 1975.
- [79] Leo Radzihovsky. *Phys. Rev. A*, 84:023611, Aug 2011.
- [80] David F. Mross and T. Senthil. *Phys. Rev. B*, 86:115138, Sep 2012.
- [81] Daniel G. Barci, Eduardo Fradkin, Steven A. Kivelson, and Vadim Oganesyan. *Phys. Rev. B*, 65:245319, Jun 2002.
- [82] S. A. Kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin, V. Oganesyan, J. M. Tranquada, A. Kapitulnik, and C. Howald. *Rev. Mod. Phys.*, 75:1201–1241, Oct 2003.
- [83] S. Anissimova, D. Parshall, G.D. Gu, K. Marty, M.D. Lumsden, Songxue Chi, J.A. Fernandez-Baca, D.L. Abernathy, D. Lamago, J.M. Tranquada, and D. Reznik. *Nat. Commun.*, 5, Jul 2014.
- [84] S.-K. Ma. *Modern Theory of Critical Phenomena*. W. A. Benjamin, 1976.
- [85] Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1996.
- [86] A. J. Bray. *Phys. Rev. Lett.*, 32:1413–1416, Jun 1974.
- [87] A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Dover Publications, New York, 1975.
- [88] D. Dominici and Marconi M.-B. *Phys. Lett. B*, 319:171, 1993.