

## RESSALVA

Atendendo solicitação do(a)  
autor(a), o texto completo desta tese  
será disponibilizado somente a partir  
de 17/01/2018.



Instituto de Física Teórica  
Universidade Estadual Paulista

---

---

TESE DE DOUTORAMENTO

IFT-T.001/16

O espaço-tempo não comutativo em Teoria Quântica de Campos,  
Matéria Condensada Mole e Física Biológica

Tatiana Ramos Cardoso

Orientador

Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar

Dezembro de 2015

Dedico esta tese à memória de Yehuda Levanon e (e com muito amor) ao meu Guri.

Es denkt in mir.

Nietzsche

## Resumo

Esta tese apresenta o estudo do espaço-tempo não comutativo em teoria quântica de campos e matéria condensada mole, com uma aplicação em física biológica.

No que concerne a teoria quântica de campos, a quantização da eletrodinâmica quântica não comutativa em  $(1 + 1)$  – e  $(2 + 1)$  – dimensões através da representação espectral de Källén-Lehmann foi realizada com o intuito de se buscar efeitos não comutativos à massa dos fótons, que no contexto de baixas dimensões, é gerada dinamicamente em duas dimensões e surge a partir do termo topológico de Chern-Simons no caso tridimensional. Para isso, as contribuições de 1 e 2 partículas para a função de densidade espectral foram consideradas, permitindo que se extraíssem o propagador livre e sua primeira correção, respectivamente.

Em física da matéria condensada mole, foi proposto um modelo para o estudo da anomalia do calor específico em temperaturas intermediárias de sólidos desordenados para uma rede cristalina definida em um espaço não comutativo. Nesta nova interpretação, as posições de cada átomo de uma rede são não comutativas, o que equivale a afirmar que a posição de cada átomo é livre dentro de uma célula espacial definida pela álgebra não comutativa.

A invariância por translações espaciais assegurada pela teoria não comutativa permitiu a construção de uma rede bidimensional e também estruturas tridimensionais, ambas compostas por átomos idênticos. Foi constatado o surpreendente surgimento de modos óticos em consequência da não comutatividade das posições dos átomos. Uma singularidade proporcional ao parâmetro não comutativo  $\theta$  foi encontrada no espectro vibracional da rede, caracterizando uma singularidade de van Hove, que por sua vez é a origem do pico de Bóson presente na curva de calor específico reduzido. No limite em que  $\theta \rightarrow 0$ , mostrou-se que existe um incremento em calor específico para a curva com  $\theta \neq 0$ , e que pode ser atribuído aos modos óticos que surgiram naturalmente neste modelo e que são proporcionais a  $\theta$ .

Sobre a aplicação do modelo não comutativo em física biológica, foi escolhida a  $L$ – cisteína, um aminoácido que apresenta o pico de Bóson em sua curva de calor específico reduzido. Para este propósito, foi necessário desenvolver uma simplificação em sua estrutura porque, uma vez pertencente ao grupo espacial  $P2_12_12_1$  com quatro moléculas em uma célula unitária, gera uma estrutura inicialmente ortorrômbica de faces centradas, que foi enfim convertida em uma estrutura cúbica de faces centradas. O modelo para o calor específico de sólidos desordenados foi apropriadamente adaptado e aplicado, e a curva de calor específico reduzido foi obtida e comparada aos dados experimentais.

**Palavras Chaves:** espaço-tempo não comutativo, representação espectral de Källén-Lehmann, fótons massivos, capacidade térmica dos sólidos, modos óticos, espectro vibracional da rede, singularidade de van Hove, pico de Bóson, grupo espacial,  $L$ – cisteína.

**Áreas do conhecimento:** Teoria Geral de Partículas e Campos, Física da Matéria Condensada, Biofísica.

## Abstract

This thesis presents the study of noncommutative spacetime in quantum field theory and soft condensed matter, with an application in biological physics.

As regards the quantum theory of fields, the quantization of the noncommutative quantum electrodynamics in  $(1 + 1)$ - and  $(2 + 1)$ - dimensions through the Källén-Lehmann spectral representation was performed to seek for noncommutative effects to the mass of the photon. In the context of lower dimensions it is dynamically generated in two dimensions and arises from the topological Chern-Simons term in three-dimensional case. Therefore, the contributions of 1 and 2 particles to the spectral density function were considered, allowing one to obtain from the full propagator provided by the Källén-Lehmann spectral representation, the free propagator and its first correction.

In physics of soft condensed matter, a model was built for studying the specific heat anomaly at intermediate temperatures of disordered solids from a new interpretation of noncommutative space. In this new interpretation, the position of each atom that belongs to a lattice are noncommutative, which is to say that the position of each atom is free within a cell space defined by a noncommutative algebra.

The invariance under spatial translations assured by the noncommutative theory allowed the construction of two-dimensional lattice and three-dimensional structures composed by identical atoms. The surprising emergence of optical modes as a result of the noncommutativity of the position of atoms was observed. A singularity proportional to the noncommutative parameter  $\theta$  was found in the vibrational spectrum of a lattice, featuring a van Hove singularity, conversely the origin of the boson peak at reduced specific heat curve. There is an increase in the specific heat curve with  $\theta \neq 0$  in the limit where  $\theta \rightarrow 0$ , which can be attributed to optical modes that have arisen naturally in this model and are proportional to  $\theta$ .

On the application of the noncommutative model in biological physics, the aminoacid *L*-cysteine was chosen due to the presence of a boson peak in the reduced specific heat curve. For this proposal, it was necessary to develop a simplified version of this structure, once it belongs to the space group  $P2_12_12_1$  with four molecules in a unit cell, which initially generates an orthorhombic face-centered structure, converting it into a cubic face-centered structure. The model for the specific heat of disordered solids was adapted and applied appropriately, and low specific heat versus temperature curve was obtained and compared to experimental data.

**Keywords:** noncommutative spacetime, Källén-Lehmann spectral representation, massive photon, heat capacity of solids, optical modes, vibrational spectrum of a lattice, van Hove singularity, boson peak, space group, *L*-cysteine.

**Knowledge Field:** General Theory of Particles and Fields, Condensed Matter Physics, Biophysics.

## Agradecimentos

Agradeço a Deus pela coragem e por ter conduzido meu caminho da maneira mais nonsense, mas que faz tudo parecer certo agora. Valeu Deus, muito obrigada.

Meu mais profundo agradecimento à minha família: meus pais, Cleunice e José Aparecido, minha irmã Poliana Cardoso e o Gabriel.

Meu agradecimento ao meu companheiro Rodrigo Bufalo, principalmente por seu entusiasmo com as minhas ideias, por nossas calorosas discussões, por seu estímulo ao meu crescimento intelectual contínuo, pelo grande físico teórico cuja competência o precede, por me tornar uma pessoa melhor e colorir meus dias.

Agradeço ao meu melhor amigo Fábio Lúcio Alves, que me acompanha desde a minha jornada da graduação e só me dá orgulho.

Agradeço ao amigo Thiago Peixoto. Obrigada por sua amizade, prontidão e pelas discussões frutíferas sobre física e a vida. E muito obrigada pela ajuda com as unidades recíprocas, jamais me esquecerei. À amiga Adriana Araújo, porque se eu enxergo um possível espaço-tempo não comutativo permeando todo o universo e quebrando as simetrias de Lorentz foi graças às nossas discussões.

Agradeço aos amigos Daneele, Nathaly, Ana Lúcia, Almeida, Luan, Ernane e Henrique, que fizeram meus dias no IFT suaves e doces. Também às amigas Flávia e Ana, por dividirmos por tanto tempo um lar. Às meninas da UFABC, Thamires, Erika e Taciana, e em especial, à Mariana, pela acolhida, o carinho e paciência em me explicar sobre física aplicada em biologia. Às, também físicas e maravilhosas, Gegê e Luciene.

Agradeço aos funcionários da biblioteca do IFT, à dona Meire e às copeiras Dona Cleide e Dona Jô que sempre foram muito atenciosos e carinhosos comigo.

Por fim, agradeço aos professores: Professora Valéria, Professora Anca, Professora Angsula, Professor Herculano, Professor Luciano, Professor Eric, Professor Orlando, por sua contribuição à minha formação, por conselhos e sugestões, pelas oportunidades e por trabalhos em conjunto. Em particular, agradeço ao meu primeiro orientador, o Professor Antonio, que me orientou desde o primeiro ano da minha graduação em Física até meu mestrado e que nunca cerceou minha necessidade de imaginar e enxergar ilustrativa e ludicamente a Física. Em especial, ao meu orientador, o Professor Pimentel, por TUDO.

Também agradeço à CAPES pelo auxílio financeiro.

## Prefácio

Esta tese resume uma parte de meus estudos durante o meu período de doutoramento no Instituto de Física Teórica (IFT), contemplando o estudo de um espaço-tempo não comutativo em teoria de campos, matéria condensada e biologia.

Este prefácio tem como propósito esclarecer como foi imprescindível ter uma base conceitual forte em teoria de campos, o apoio de meu orientador em todos os meus questionamentos e ideias, e a minha intrepidez para tornar possível a aplicação de um espaço não comutativo para a descrição de sólidos desordenados e sua aplicação em biologia.

Meu principal interesse quando decidi realizar meu doutorado no IFT estava em aprender sobre teoria quântica de campos, e por isso sou imensamente agradecida de ter tido o apoio do meu orientador de graduação e mestrado, o professor Antonio Soares de Castro, para seguir meus estudos sob a orientação do professor Bruto Max Pimentel. Foi uma escolha muito feliz.

À parte da solidez que obtive enquanto física teórica, e o enriquecimento cultural em física que só sua supervisão pode proporcionar, aprendi com o professor Pimentel em nossos queridos cafés a importância da leitura das referências originais sempre que se enveredar por um novo estudo. Isso porque as referências originais estão sempre em uma linguagem que aborda o problema de uma maneira simples, e deixa muito claro o que se pretende fazer e qual a ideia para se tentar resolver o problema. Mais que isso, o professor Pimentel sempre me encorajou a alcançar novos voos, aproveitar as oportunidades e aprender o máximo que puder.

Assim, e como não poderia ser diferente, inicio citando a primeira referência em um espaço-tempo não comutativo que vem de Snyder [1], em uma tentativa de resolver o problema da divergência na autoenergia do elétron. Isso porque esta divergência pode ser eliminada com a atribuição, à mão, de um termo de *cut-off* (que é um artifício matemático que contorna o problema da divergência estabelecendo um parâmetro de escala arbitrário), ao preço da perda da simetria translacional. Deste modo, um espaço não comutativo talvez fosse uma alternativa para resolver este problema, uma vez que poderia estabelecer um *cut-off* natural para a teoria, já que a não comutatividade do espaço-tempo implica em sua fragmentação em células de pequeninos tamanhos em que imperam as flutuações quânticas. O menor tamanho destas células seria, portanto, uma escala natural da teoria, ao ganho da preservação de sua invariância por translação. Por fim, a ideia acabou sendo abandonada devido ao grande sucesso da teoria da renormalização.

Contudo, no fim dos anos 90, Seiberg e Witten ressucitam a teoria não comutativa [2], e estabelecem uma representação (conhecida por mapa de Seiberg-Witten) que permite que teorias de gauge possam ser estudadas nesse contexto. A partir daí o que segue são inúmeros estudos e aplicações da teoria não comutativa na física das altas energias. Determinar experimentalmente a estrutura do espaço-tempo não é uma tarefa simples, uma vez que para fazer tal medição seria necessária uma energia absurdamente grande (energias na escala de Planck). Mais que isto, para que seja possível fazer alguma ideia da física que permeia a estrutura do espaço-tempo é necessário o rompimento com as teorias usuais que preservam a simetria de Lorentz. Assim, o



espaço-tempo não comutativo também foi visto com grande interesse porque, à parte do setor de translação, quebra explicitamente a invariância de Lorentz.

Mas como saber a forma da estrutura do espaço-tempo sem que seja possível fazer uma medição precisa? A ideia é simples: procurar, em sistemas físicos simples e robustos teórica e experimentalmente, por desvios que possam ser causados apenas pela estrutura do espaço-tempo. Como um célebre exemplo, o trabalho da professora Anca Tureanu e seus colaboradores sobre o efeito de um espaço-tempo não comutativo nas linhas espectrais do átomo de hidrogênio [3]. Neste trabalho, é mostrado que a linha espectral que corresponde ao Lamb shift (que só pode ser determinado a partir da eletrodinâmica quântica para o caso comutativo) surge naturalmente no espectro obtido a partir da mecânica quântica não relativística. Contudo, a contribuição não comutativa a esta linha é tão pequena que não pode ser detectada experimentalmente.

De qualquer forma, buscar por efeitos de físicas de altas energias em sistemas simples e cotidianos engloba uma espantosa quantidade de conceitos e cálculos, e é por isso que abordar efeitos não comutativos na eletrodinâmica quântica em duas e três dimensões me deixou fascinada, especialmente porque, nestas dimensões, o fóton adquire massa. Assim, procurar por estes desvios, e em uma abordagem axiomática que é a representação espectral de Källén-Lehmann, satisfiz minha ânsia pelo estudo da teoria quântica de campos.

Embora sempre estivesse ciente da pequenez de um possível efeito não comutativo, e a conseqüente impossibilidade de uma medida precisa para detectá-lo - o que contribuiu para que a ideia de um espaço-tempo não comutativo permanecesse confinada ao âmbito teórico - não era possível que eu pudesse livrar-me do conceito da perda de localização devido a seus efeitos.

Então, mais ou menos na metade do meu período de doutoramento, enquanto em nossos cafés, o professor Pimentel e eu conversávamos sobre a física das avalanches, terremotos e outros fenômenos da natureza, e lhe confidenciei sobre um workshop da FAPESP que estava bastante interessada, *At the interface between physics and biology*, recebendo pleno apoio e incentivo. Neste workshop tive a imensa felicidade em conhecer o professor Herculano Martinho, que me proporcionou a oportunidade de realizar um estágio de férias em física aplicada à biologia na UFABC. Foi quando então me deparei com o problema da anomalia do calor específico a temperaturas intermediárias do aminoácido *L*-cisteína. Bom, este problema não se resume à *L*-cisteína, ou a estruturas biológicas, mas a todos os sólidos desordenados que apresentam transição vítrea, o que é conhecido na literatura como o *pico de Bóson*.

Basicamente, o pico de Bóson é um pico na curva de calor específico reduzido (ou seja, calor específico dividido pelo cubo da temperatura versus temperatura), com a forte sugestão na literatura de que seja originado por uma divergência na densidade de estados das excitações de uma rede. O grande problema no estudo dos sólidos desordenados está justamente na falta de uma periodicidade para este sistema. Sem periodicidade, todos os fundamentos da física do estado sólido (zona de Brillouin, teorema de Bloch, por exemplo), ficam seriamente comprometidos - em verdade impossíveis de serem tratados - restando apenas um tratamento a partir de potenciais efetivos.

Arrebatadoramente, ao me deparar com uma figura ilustrativa de uma estrutura formada pelo  $\text{SiO}_2$ , em suas formas amorfa e cristalina, reproduzidas na figura (1), me dei conta de que era possível interpretar a rede cristalina (ordenada) em termos de um espaço não comutativo, e então obter uma rede desordenada.

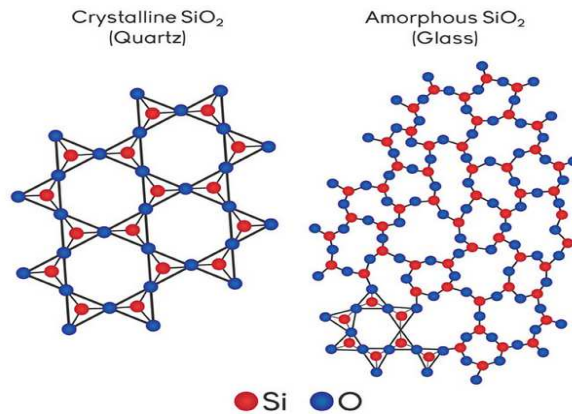


Figura 1: A estrutura das redes amorfa e cristalina de  $\text{SiO}_2$ .

Isso porque em um espaço-tempo não comutativo a noção de um ponto no espaço é perdida, uma vez que todos pontos do espaço usual (comutativo) são substituídos por células de tamanho  $|\theta^{\mu\nu}|$  em que as flutuações quânticas impedem uma localização exata de eventos dentro desta célula. Então, eu pensei: e se cada átomo que compõe uma rede desordenada puder ter a sua localização definida por um espaço não comutativo? Dessa forma, cada átomo que corresponde a essa rede desordenada vai ser realocado em qualquer ponto dentro de uma célula proporcional à  $\theta$ , que por sua vez compreende o ponto em que um átomo de uma rede cristalina pode se localizar. O simples fato de um átomo ter a liberdade de se localizar em qualquer ponto dentro dessa célula proporcional à  $\theta$ , garante o aparente caos que as posições em redes desordenadas têm.

Nessa época, o Dr. Rodrigo Bufalo, meu noivo, estava em Helsinki (Finlândia) trabalhando em seu pós-doutorado com os professores Masud Chaichian e Anca Tureanu. Como eu já tinha comentado com ele sobre esses meus pensamentos, substanciados por alguns cálculos que o corroboravam, o Bufalo então comentou sobre a minha ideia com a professora Anca - conhecida principalmente por seus estudos em teoria de campos em um espaço não comutativo aplicado à física de altas energias. A professora Anca então se interessa pela ideia, e pela conveniência do Bufalo estar residindo em Helsinki surge a oportunidade de fazer um estágio na Universidade de Helsinki, para então desenvolver um *modelo teórico para o calor específico de sólidos desordenados a temperaturas intermediárias baseado em um espaço não comutativo*. De fato, essa nova interpretação e aplicação para o espaço não comutativo e sua aprovação pela professora Anca me deixaram ainda mais entusiasmada.

Assim, ao fim de minha estadia em Helsinki eu tinha um modelo teórico para uma rede desordenada em duas e três dimensões, em que a invariância por translação é garantida pela

teoria não comutativa, e que apresentava uma divergência na densidade de estados proporcional ao parâmetro não comutativo  $\theta$ , que por sua vez se refletia como um pico na curva do calor específico reduzido.

Mas ainda faltava sua aplicação para o aminoácido *L*-cisteína. O problema é que a *L*-cisteína é uma molécula composta por 14 átomos, e cada célula unitária que compõe um cristal de *L*-cisteína apresenta 4 moléculas. Eu tinha que simplificar este problema de alguma forma. Então, olhando para um desenho da molécula de cisteína, pensei: e se esses 14 átomos fossem feitos de bolinhas de massinha de modelar? Eu poderia então amassar todas essas bolinhas feitas de massinha, perfazendo um bolão. Assim, a questão mudou para: se a célula unitária da cisteína for representada por uma caixa, aonde eu coloco cada um dos 4 bolões?

A resposta e a esperança de que esta ideia poderia dar certo veio com a leitura de um trabalho de Wigner, em que ele afirma que os cristais podem ter suas propriedades inferidas a partir de suas simetrias [4]. Ou seja, não é necessário conhecer a natureza do cristal, apenas suas simetrias. A estrutura da *L*-cisteína determina que sua cristalização ocorra no grupo espacial  $P2_12_12_1$ , que contém todas as suas simetrias, e é tal que a repetição desta estrutura no espaço gera uma estrutura ortorrômbica de faces centradas. Assim, eu simplifiquei ainda mais o meu problema considerando que a estrutura ortorrômbica seria uma estrutura cúbica de faces centradas. Apliquei o modelo não comutativo, agora para uma estrutura cúbica de faces centradas, e determinei seu calor específico. O professor Herculano Martinho e seu grupo gentilmente me cederam os resultados experimentais para que eu pudesse fazer a comparação entre as curvas experimental e a minha previsão teórica.

Bem... o resultado desta odisséia está nesta tese. Boa leitura!

Tatiana Ramos Cardoso

# Sumário

<b>1</b>	<b>A eletrodinâmica quântica não comutativa</b>	<b>1</b>
1.1	A representação espectral de Källén-Lehmann da eletrodinâmica quântica não comutativa . . . . .	2
1.1.1	A quantização de Weyl e o produto estrela de Moyal . . . . .	4
1.1.2	O mapa de Seiberg-Witten . . . . .	11
1.1.3	A representação espectral de Källén-Lehmann . . . . .	13
1.1.4	A eletrodinâmica quântica não comutativa em $(1 + 1) - e$ e $(2 + 1) -$ dimensões . . . . .	27
1.1.5	O mapa de Seiberg-Witten na NCQED . . . . .	28
1.1.6	As equações de movimento . . . . .	37
1.1.7	Representação de Källén-Lehmann para a NCQED . . . . .	46
1.1.8	Observações finais . . . . .	86
<b>2</b>	<b>O modelo não comutativo para sólidos desordenados</b>	<b>87</b>
2.1	O modelo teórico para o calor específico de sólidos desordenados a temperaturas intermediárias baseado em um espaço não comutativo . . . . .	88
2.2	O oscilador harmônico não comutativo clássico . . . . .	92
2.3	A densidade de estados de uma rede bidimensional não comutativa . . . . .	94
2.3.1	Os mapas de contorno e o parâmetro $\theta$ . . . . .	98
2.3.2	A frequência máxima possível à densidade de estados . . . . .	99
2.4	Uma aproximação para o cálculo da densidade de estados conveniente para sua extensão ao caso tridimensional . . . . .	100
2.4.1	Equação da seção cônica correspondente ao ramo inferior de frequências	101
2.4.2	Equação da secção cônica correspondente ao ramo superior de frequências . . . . .	102
2.4.3	A aproximação para a área a partir da equação secular . . . . .	104
2.5	A rede tridimensional não comutativa . . . . .	110
2.6	Interpretação física da lagrangiana não comutativa . . . . .	113
2.7	A densidade de estados de uma rede cúbica simples não comutativa . . . . .	115
2.7.1	O caso em que $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 \rightarrow 0$ . . . . .	119
2.7.2	O caso em que $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta$ . . . . .	119

2.7.3	O calor específico reduzido e o pico de Bóson . . . . .	121
2.7.4	A interação entre primeiros e segundos vizinhos de uma rede cristalina	124
2.8	Observações finais . . . . .	125
<b>3</b>	<b>Uma aplicação em biologia para o modelo não comutativo</b>	<b>127</b>
3.1	O modelo não comutativo e a anomalia do calor específico da <i>L</i> -cisteína . . . .	128
3.1.1	O calor específico do modelo da cisteína . . . . .	139
3.2	Observações finais . . . . .	142
<b>4</b>	<b>Conclusões</b>	<b>143</b>
	<b>Referências bibliográficas</b>	<b>145</b>

# Lista de Figuras

1	A estrutura das redes amorfa e cristalina de $SiO_2$ . . . . .	viii
2.1	As grandes setas indicam a posição do pico de Bóson para a estrutura $SiO_2$ nas fases vítrea e cristalina, bem como o patamar previsto por Debye para o calor específico nestas duas distintas fases, indicadas pelas curvas tracejadas. Imagem obtida em [65]. . . . .	90
2.2	A estrutura das redes amorfa e cristalina de $SiO_2$ . . . . .	91
2.3	Mapas de contorno para o ramo inferior de frequência com $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} = 0.1$ . . . . .	98
2.4	Mapas de contorno para o ramo superior de de frequência com $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} = 0.1$ . . . . .	99
2.5	Gráficos de $\cos \phi$ (em azul) e sua expansão em segunda ordem $1 - \frac{1}{2}\phi^2$ (em vermelho). A curva em preto determina o ponto aleatoriamente escolhido para o intervalo de integração, que leva em conta o fim da coincidência entre os dois gráficos. . . . .	103
2.6	Gráficos de $\cos \phi$ (em azul) e sua expansão em segunda ordem $1 - \frac{1}{2}(\phi - \pi)^2$ (em vermelho). . . . .	109
2.7	Gráfico da densidade de estados de uma rede quadrada não comutativa bidimensional. A reta em preto indica a posição da divergência $\nu_{div}$ , ao passo que a reta em azul simboliza o valor máximo para a frequência $\nu_{max}$ . Aqui $\omega_0 = 1$ e $\omega_\theta = 10000$ . . . . .	110
2.8	Ilustração do cristal cúbico simples para a visualização dos 6 primeiros vizinhos. Imagem obtida em <a href="http://chemwiki.ucdavis.edu">http://chemwiki.ucdavis.edu</a> . . . . .	115
2.9	Curva $\frac{C}{T^3}$ versus $T$ para $\frac{\omega_0}{\omega_\theta} = 0.1$ , $Z = 4$ moléculas e $\omega_0 = 2000 \text{ rad.s}^{-1}$ . A curva em vermelho representa o caso em que $\theta \rightarrow 0$ , ao passo que a curva em azul representa a contribuição não comutativa, $\theta \neq 0$ . . . . .	123
3.1	Uma ilustração da $L$ -cisteína. A bolinha amarela simboliza o elemento enxofre. Analogamente, as bolinhas brancas, vermelhas e cinzas representam os elementos hidrogênio, oxigênio e carbono, respectivamente. Imagem obtida em <a href="https://pt.wikipedia.org">https://pt.wikipedia.org</a> . . . . .	128
3.2	A célula primitiva da cisteína. À esquerda: configuração ortorrômbica. À direita: configuração monoclinica. Imagem obtida em [76]. . . . .	128

3.3	A forma para a molécula da <i>L</i> -cisteína considerada neste modelo. Imagem obtida em <a href="https://pt.wikipedia.org">https://pt.wikipedia.org</a> . . . . .	129
3.4	A aproximação da estrutura ortorrômbica de faces centradas em uma estrutura cúbica de faces centradas. Imagens obtidas em <a href="https://pt.wikipedia.org">https://pt.wikipedia.org</a> . . . . .	129
3.5	Ilustração do cristal cúbico de faces centradas para a visualização dos 12 primeiros vizinhos. A figura conta, ainda, com a identificação dos 6 segundos vizinhos. Imagem obtida em <a href="http://www.physics-in-a-nutshell.com">http://www.physics-in-a-nutshell.com</a> . . . . .	130
3.6	Curva $\frac{C}{T^3}$ versus $T$ relativa à cisteína. A curva em vermelho representa os dados experimentais, enquanto a curva em preto representa a previsão teórica. . . . .	141

# Capítulo 4

## Conclusões

Esta tese apresenta um estudo sobre o espaço-tempo não comutativo em diferentes áreas da física teórica: teoria quântica de campos, física da matéria condensada mole e física biológica, a última um recente e promissor subcampo da física teórica contemporânea.

O espaço-tempo não comutativo tem sua origem na teoria quântica de campos, e este é o ponto de partida deste estudo: os efeitos de um espaço-tempo não comutativo na eletrodinâmica quântica em duas e três dimensões, particularmente na massa que os fótons apresentam nestas particulares extensões da eletrodinâmica quântica usual (em quatro dimensões). Em duas dimensões, a massa do fóton é gerada dinamicamente, ou seja, por meio das correções quânticas ao propagador livre, a autoenergia do fóton, e é diretamente afetada por efeitos não comutativos. Em três dimensões, a massa para o fóton é admitida através do termo topológico de Chern-Simons, e mais uma vez a autoenergia do fóton sofreu efeitos não comutativos. Para os dois casos, as correções não comutativas se aplicam apenas à autoenergia do fóton - o propagador livre em ambas distintas dimensões não apresenta nenhum efeito devido ao espaço-tempo não comutativo.

Em física da matéria condensada mole, a interpretação de uma rede desordenada em termos do espaço não comutativo, em que a cada átomo que pertence a rede é permitido uma incerteza em torno de sua posição tal que o efeito dessas incertezas nas posições resulta em uma rede desordenada, mostra ser um modelo que compreende de forma natural os fenômenos do pico de bóson e o incremento no patamar do calor específico de sólidos desordenados a temperaturas intermediárias.

Neste modelo, cada átomo da rede experimenta uma força de restauração proporcional ao seu deslocamento mais uma nova força que aparece como efeito da não comutatividade na posição dos átomos na rede, com uma forma análoga à força de Lorentz, e que tem como principal efeito causar uma divergência na densidade de estados - uma singularidade de van Hove - e o surgimento de modos óticos onde são esperados apenas modos acústicos. Portanto, neste modelo, o surgimento de modos óticos é um efeito unicamente não comutativo. Cabe por fim ressaltar que este modelo parte de primeiros princípios, ou seja, da dinâmica de uma rede. Não havia, até o presente momento, nenhuma teoria baseada em primeiros princípios com



tamanho alcance na literatura.

A contribuição em física biológica se deve à aplicação do modelo não comutativo na descrição da anomalia do calor específico do aminoácido *L*-cisteína, apresentando uma satisfatória concordância com os dados experimentais.

Apesar de algumas aproximações que à primeira vista pareciam descaracterizar a molécula da *L*-cisteína, ao basear o modelo apenas nas simetrias de seu grupo espacial  $P2_12_12_1$ , e simplificar sua estrutura original, ortorrômbica de faces centradas, em uma estrutura cúbica de faces centradas, a exigência de que o calor específico reduzido fosse expresso em unidades de  $\frac{J}{mol.K^4}$  implica na substituição de um valor para o volume pelo número de moléculas de *L*-cisteína em uma célula unitária,  $Z$ , desta forma independente do caráter ortorrômbico original. Como resultado, a previsão teórica das curvas  $\frac{C}{T^3}$  versus  $T$  e sua contraparte experimental exhibe a forte sugestão de que o modelo não comutativo para sólidos desordenados é adequado inclusive para materiais biológicos que apresentem a tal anomalia em seu calor específico, presupondo apenas o conhecimento de seu grupo espacial e o número de unidades-fórmula de sua célula unitária.

# Referências Bibliográficas

- [1] Snyder, H.S., **Quantized space-time**, Phys. Rev. **71**, 38 (1947).
- [2] Seiberg, N. e Witten, E., **String theory and noncommutative geometry**, J. High Energy Phys. **9**, **32** (1999).
- [3] Chaichian, M., Sheikh-Jabbari, M.M. e Tureanu, A., **Hydrogen atom spectrum and the Lamb shift in noncommutative QED**, Phys. Rev. Lett. **86**, 2716 (2001).
- [4] Wigner, E.P., **Symmetry principles in old and new physics**, Bull. Amer. Math. Soc. **74**, 793 (1968).
- [5] Sakurai, J.J., *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, California, 1967.
- [6] Series, G.W., *Spectrum of atomic hydrogen*, Oxford University Press, London, 1957.
- [7] Huggins, W., **On the spectrum of the flame of hydrogen**, Proc. Roy. Soc. (London) **30**, 576 (1854).
- [8] Bohr, N., **On the constitution of atoms and molecules**, Philos. Mag. Series **26**, 6 (1913).
- [9] Schrödinger, E., **An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules**, Phys. Rev. **6**, 28 (1926).
- [10] Dirac, P.A.M., **The Quantum Theory of the electron**, Proc. Roy. Soc. (London) **117**, 610 (1928).
- [11] Lamb, W.E., e Retherford, R.C., **Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method**, Phys. Rev. **72**, 241 (1947).
- [12] Schweber, S.S., *QED and the Men who made it*, Princeton Series in Physics, 1994.
- [13] Hänsch, T.W., Schawlow, A.L. e Series, G.W., **The spectrum of atomic hydrogen**, Sci. Am. **240**, 94 (1979).
- [14] Schaposnik, F.A., **Three lectures on noncommutative field theories**, arXiv:0408132v1 [hep-th] (2004).
- [15] Schwinger, J., **Gauge invariance and mass**, Phys. Rev. **128**, 2425 (1962).

- [16] de Roo, M. e Stam, K., **Non-perturbative analysis of the infrared properties of QED<sub>3</sub>**, Nucl. Phys. B **246**, 335 (1984).
- [17] Deser, S., Jackiw, R. e Templeton, S., **Topologically massive gauge theories**, Ann. Phys. (N.Y.) **140**, 372 (1982).
- [18] Källén, G., **On the definition of the renormalization constants in Quantum Electrodynamics**, Helv. Phys. Acta **25**, 417 (1952); Lehmann, H., **Über Eigenschaften von Ausbreitungsfunktionen und Renormierungskonstanten quantisierter Felder**, Nuovo Cim. **11**, 342 (1954).
- [19] Schweber, S., *An introduction to Relativistic Quantum Mechanics*, Harper & Row, Publishers, New York (1961); Nishijima, K., *Field Theory and Dispersion Relations*, W. A. Benjamin, Inc. (1969); Källén, G., *Quantum Electrodynamics*, Springer Science (1972); Peskin, M. e Schroeder, D., *An Introduction to Quantum Field Theory*, Westview Press (1995); Weinberg, S., *The Quantum Theory Of Fields - Vol 1: Foundations*, Cambridge University Press (2005).
- [20] Lehmann, H., Symanzik, K. e Zimmermann, W., **The formulation of quantized field theories**, Nuovo Cim. **1**, 205 (1955).
- [21] Nussenzveig, H.M., *Causality and Dispersion Relations*, Academic Press, 1972.
- [22] Heisenberg, W., **Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen**, Z. Phys. **33**, 879 (1925).
- [23] Dirac, P.A.M., **Quantum Mechanics**, PhD Thesis. Cambridge, 1926.
- [24] Kauffmann, S.K., **Unambiguous quantization from the maximum classical correspondence that is self-consistent: the slightly stronger canonical commutation rule Dirac missed**, Found. Phys. **41**, 805 (2011).
- [25] Groenewold, H.J., **On the principles of elementary Quantum Mechanics**, Physica **12**, 405 (1946).
- [26] van Hove, L., **Sur le problème des relations entre les transformations unitaires de la mécanique quantique et les transformations canoniques de la mécanique classique**, Acad. Roy. Belgique Bull. Cl. Sci. **37**, 610 (1951).
- [27] Weyl, H., **Quantenmechanik und Gruppentheorie**, Z. Phys. **46**, 1 (1927).
- [28] Moyal, J.E., **Quantum mechanics as a statistical theory**, Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. **45**, 99 (1949).
- [29] von Neumann, C.W., **Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren**, Math. Annal. **104**, 570 (1931).

- [30] Tureanu, A., *Some aspects of Quantum Field and Gauge Theories on Noncommutative Space-Time*, PhD Thesis. University of Helsinki, 2004.
- [31] Gracia-Bondía, J.M., Várilly, J.C. e Figueroa, H., *Elements of noncommutative geometry*, Springer Science, 2001.
- [32] Galetti, D., *Mecânica Quântica no Espaço de Fase*, Notas de aula da III Escola Mário Schenberg do Departamento de Física da UFPB, João Pessoa, 1996.
- [33] Marcolli, M. e Khalkhali, M., *An invitation to noncommutative geometry*, World Scientific, 2008.
- [34] Pontryagin, L.S., **On dynamical systems close to Hamiltonian systems**, Zh. EKsp. Teor. Fiz. **4**, 234 (1934).
- [35] Bellissard, J., **NCG approach to topological invariants in Condensed Matter Physics: Lecture I**, Workshop "Topological Phases of Condensed Matter", Agosto, 2014.
- [36] Wightman, A.S., **Quantum field theory in terms of vacuum expectation values**, Phys. Rev. **101**, 860 (1956).
- [37] Streater, R.F. e Wightman, A.S., *PCT, spin and statistics, and all that*, Princeton University Press, 2000.
- [38] Rickayzen, G., *Green's Functions and Condensed Matter*, Academic Press, 1980.
- [39] Bjorken, J. e Drell, S., *Relativistic Quantum Fields*, Mc Graw-Hill, 1965.
- [40] Yang, C.N. e Feldman, D., **The S-matrix in the Heisenberg representation**, Phys. Rev. **79**, 972 (1950).
- [41] Barton, G., *Introduction to Dispersion Techniques in Field Theory*, W.A. Benjamin, INC., 1965.
- [42] Chaichian, M., Kulishb, P.P., Nishijima, K. e Tureanu, A., **On a Lorentz-invariant interpretation of noncommutative space-time and its implications on noncommutative QFT**, Phys. Lett. B **604**, 98 (2004);
- [43] Chaichian, M., Prešnajder, P. e Tureanu, A., **New concept of relativistic invariance in noncommutative space-time: twisted Poincaré symmetry and its implications**, Phys. Rev. Lett. **94**, 151602 (2005);
- [44] Tureanu, A., **Twist and spin-statistics relation in noncommutative quantum field theory**, Phys. Lett. B **638**, 296 (2006).
- [45] Grandi, N. e Silva, G.A., **Chern-Simons action in noncommutative space**, Phys. Lett. B **507**, 345 (2001).

- [46] Jackiw, R. e Templeton, S., **How super-renormalizable interactions cure their infrared divergences**, Phys. Rev. D **23**, 2291 (1981).
- [47] Berestetskii, V.B., Lifshitz, E.M. e Pitaevskii, L.P., *Quantum Electrodynamics*, Pergamon Press, 1982.
- [48] Dyson, F.J., **The radiation theories of Tomonaga, Schwinger, and Feynman**, Phys. Rev. **75**, 486 (1949).
- [49] Bufalo, R., Cardoso, T.R. e Pimentel, B.M., **Källén-Lehmann representation of non-commutative quantum electrodynamics**, Phys. Rev. D **89**, 085010 (2014).
- [50] Keita, K.M., Wu, F. e Zhong, M., **Higher derivative operators in the noncommutative Schwinger model**, Phys.Lett.B **681**, 367 (2009).
- [51] Das, A.K., Frenkel, J. e Schubert, C., **Infrared divergences, mass shell singularities and gauge dependence of the dynamical fermion mass**, Phys. Lett. B **720**, 414 (2013); Del Cima, O.M., Franco, D.H.T. e Piguet, O., **Ultraviolet and infrared perturbative finiteness of massless QED<sub>3</sub>**, Phys. Rev. D **89**, 065001 (2014).
- [52] Jackiw, R., *Fields and Particles*, Springer-Verlag, 1990.
- [53] Hasan, M.Z. e Kane, C.L., Colloquium: Topological insulators, Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010).
- [54] Scharf, G., Wreszinski, W.F., Pimentel, B.M. e Tomazelli, J.L., **Causal approach to  $(2 + 1)$ -dimensional QED**, Ann. Phys. (N.Y.) **231**, 185 (1994); Pimentel, B.M. e Tomazelli, J.L., **What is wrong with Pauli-Villars regularization in QED<sub>3</sub>?**, Prog. Theor. Phys. **95**, 1217 (1996).
- [55] Potting, R., **Källén-Lehmann representation for Lorentz-violating field theory**, Phys. Rev. D **85**, 045033 (2012).
- [56] Laughlin, R., **Quantized Hall conductivity in two dimensions**, Phys. Rev. B **23**, 10 (1981).
- [57] Qi, X.-L. e Zhang, S.-C., **Topological insulators and superconductors**, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
- [58] Petit, A.T. e Dulong, P.L., **Recherches sur quelques points importants de la Théorie de la Chaleur**, Ann. Chim. Phys. **10**, 395 (1819).
- [59] Einstein, A., **Beziehung zwischen dem elastischen Verhalten und der Spezifischen Wärme mit einatomigem Molekül**, Ann. d. Physik. **34**, 170 (1911).
- [60] P. Debye, **Zur Theorie der spezifischen Wärmen**, Ann. d. Physik. **39**, 789 (1912).

- [61] Born, M. e von Kármán, T., **Über Schwingungen in Raumgittern**, Physik. Zeits. **13**, 297 (1912).
- [62] van Hove, L., **The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal**, Phys. Rev. **89**, 1189 (1953).
- [63] Liu, X. e Löhneysen, H.V., **Specific heat anomaly of amorphous solids at intermediate temperature (1 to 30K)**, Europhys. Lett. **33**, 617 (1996).
- [64] Chumakov, A.I. et al, **Equivalence of the boson peak in glasses to the transverse acoustic van Hove singularity in crystals** , Phys. Rev. Lett. **106**, 225501 (2011).
- [65] Zeller, R.C. e Pohl, R.O., **Thermal conductivity and specific heat of noncrystalline solids**, Phys. Rev. B **4**, 2029 (1971).
- [66] Brillouin, L., *Wave Propagation in Periodic Structures*, McGraw-Hill, 1946.
- [67] Goldstein, H., *Classical Mechanics*, Pearson, Addison-Wesley, 1965.
- [68] Born, M., **Lattice dynamics and X-ray scattering**, Proc. London Phys. Soc. **54**, 362 (1942).
- [69] Webster, C.C., *The theory of the specific heat of a body centered cubic lattice*. Masters Thesis. Paper 6676, 1950.
- [70] Flubacher, P., A. J. Leadbetter, J. A. Morrison e Stoicheff, B.P., **The low-temperature heat capacity and the Raman and Brillouin spectra of vitreous silica**, J. Phys. Chem. Solids, **12**, 53 (1959).
- [71] Montroll, E.W., **Dynamics of a square lattice**, Journ. Chem. Phys. **15**, 575 (1947).
- [72] Blackman, M., **On the vibrational spectrum of cubical lattices and its application to the specific heat of crystals**, Proc. Roy. Soc. **148**, 384 (1934).
- [73] Blackman, M., **On the vibrational spectrum of a three-dimensional lattice**, Proc. Roy. Soc. **159**, 416 (1937).
- [74] Blackman, M., **Theory of the specific heat of crystals**, Proc. Roy. Soc. **148**, 365 (1935).
- [75] Smith, H.M.J., **The theory of the vibrations and the Raman spectrum of the Diamond Lattice**, Philos. Trans. R. Soc. Lond. A **241**, 105 (1948).
- [76] Lima, T.A. et al, **Anharmonic transitions in nearly dry L-cysteine I**, J. Phys.: Condens. Matter **24**, 195104 (2012).
- [77] Lima, T.A., Ishikawa, M.S. e Martinho, H.S., **Boson peak as a probe of quantum effects in a glassy state of biomolecules: The case of L-cysteine**, Phys. Rev. E **89**, 022715 (2014).

- [78] Kerr, A.K. e Ashmore, J.P., **Structure and conformation of orthorhombic L-Cysteine**, Acta Cryst. B **29**, 2124 (1973).
- [79] Bonnell, C.R., *The theory of the specific heat of a face-centered cubic lattice*. Masters Thesis. Paper 6761, 1950.