

# Uma introdução às transições de fase e aos fenômenos críticos

*Daniel G. Barci*

Departamento de Física Teórica  
Universidade do Estado do Rio de Janeiro

2020

# Prefácio

Estas notas surgem a partir de um convite para ministrar um curso de verão na Universidade de Havana, Cuba, no verão boreal de 2010. O curso foi organizado pelo Grupo de Física Teórica do Instituto de Cibernética Matemáticas y Física, ICIMAF-Cuba em colaboração o Departamento de Física da Universidade de Havana. A ideia era apresentar os conceitos básicos de transições de fase e introduzir os conceitos mais elaborados do Grupo de Renormalização para um público de físicos, não necessariamente especialistas. Foi um prazer ministrar esse curso, onde tive uma grande audiência de professores e alunos de graduação e pós-graduação de diferentes áreas da física, teóricos e experimentais. Logo após meu regresso ao Brasil, o curso foi estendido e sua estrutura adaptada a um curso semestral de pós-graduação, sendo apresentado no Programa de Pós-Graduação em física da UERJ no segundo semestre de 2010. Devido à demanda que originou, o curso foi repetido nos anos de 2014 e 2015, onde as notas foram ampliadas e aperfeiçoadas. Em 2016, o Premio Nobel para Kosteritz-Thouless e Haldane obrigou a agregar um capítulo especial sobre a famosa transição de Kosterlitz-Thouless que tinha ficado apenas comentada na versão original das notas

Uma das motivações para dar forma de livro às notas de aula é que o tema abordado, especialmente a criticalidade, é um assunto que causou um impacto muito forte no desenvolvimento da física a partir dos anos 80 e tornou-se um assunto interdisciplinar devido à grande quantidade de aplicações que possui, desde sua origem em matéria condensada, passando pela física de altas energias, incluindo astrofísica e cosmologia, como assim também aplicações em áreas como biofísica. É verdade que existem muitos bons livros que abordam cada item deste curso individualmente, porém a maior parte desta bibliografia é esparsa e se encontra em língua inglesa. Acredito que a estrutura do curso, a maneira de introduzir os conceitos e o fato de ser redigido em Português faz destas notas uma contribuição original que pode ser de utilidade para a formação de físicos teóricos atuando em diversas áreas.

*Daniel G. Barci*  
*Rio de Janeiro, 15 julho de 2020*  
ano do Covid....

# Sumário

<b>1</b>	<b>Transições de fase</b>	<b>5</b>
1.1	Breve resumo de termodinâmica . . . . .	6
1.1.1	Postulados da termodinâmica . . . . .	7
1.1.2	Variáveis intensivas, potenciais termodinâmicos e a transformadas de Legendre . . . . .	8
1.2	Classificação de transições de fase . . . . .	13
1.3	Diagrama de fases . . . . .	14
1.3.1	Ferromagnetos uniaxiais . . . . .	15
1.3.2	Fluidos simples . . . . .	16
<b>2</b>	<b>Quebra espontânea de simetria e parâmetros de ordem</b>	<b>18</b>
2.1	A transição ferromagnética . . . . .	21
2.2	A transição líquido-gás . . . . .	27
2.3	A transição Metal-Supercondutor . . . . .	33
2.4	A transição isotrópica/nemática . . . . .	44
2.5	Pontos multicríticos . . . . .	53
2.5.1	Pontos tricríticos . . . . .	54
2.5.2	Pontos bicríticos e tetracríticos . . . . .	56
2.6	O estado supercondutor nemático . . . . .	56
2.7	Leis de escala, criticalidade e universalidade . . . . .	64
2.7.1	Comprimento de correlação . . . . .	64
2.7.2	Leis de potência . . . . .	65
2.7.3	Expoentes críticos e universalidade . . . . .	67
<b>3</b>	<b>Abordagem microscópica</b>	<b>73</b>
3.1	Modelos simples . . . . .	73
3.1.1	O modelo de Ising . . . . .	73
3.1.2	Fluidos simples . . . . .	75
3.2	O modelo de Ising em uma dimensão: solução exata . . . . .	76
3.3	Aproximação de campo médio . . . . .	79
3.4	O critério de Ginzburg e a dimensão crítica superior . . . . .	85
3.5	O modelo de Ising e a teoria de campos $\phi^4$ . . . . .	88
3.5.1	Integrais gaussianas e a transformação de Hubbard-Stratonovich . . . . .	88

3.5.2	Modelo contínuo . . . . .	90
3.6	O hamiltoniano de Ginzburg-Landau e a aproximação de Landau . . .	93
3.7	Correções à aproximação de Landau . . . . .	95
3.7.1	Caso de uma variável real . . . . .	95
3.7.2	Caso de um campo escalar real . . . . .	97
3.7.3	O critério de Ginzburg <i>reloaded</i> . . . . .	98
<b>4</b>	<b>Grupo de Renormalização</b>	<b>101</b>
4.1	A ideia do grupo de renormalização . . . . .	101
4.1.1	O espaço de constantes de acoplamento . . . . .	104
4.2	O modelo de Ising unidimensional . . . . .	107
4.3	O modelo de Ising em dimensão superior . . . . .	110
4.4	Teoria geral . . . . .	112
4.4.1	Variáveis de escala . . . . .	113
4.4.2	Propriedades de escala da energia Livre . . . . .	116
4.4.3	Expoentes críticos . . . . .	118
4.4.4	A função beta . . . . .	119
<b>5</b>	<b>O Grupo de Renormalização em espaço de Fourier</b>	<b>120</b>
5.1	O modelo gaussiano . . . . .	122
5.2	Derivadas de ordem superior . . . . .	125
5.3	Efeitos da rede . . . . .	126
5.4	O ponto fixo gaussiano: análise perturbativa . . . . .	128
5.5	Dimensão crítica superior e efeitos de não localidade . . . . .	135
5.6	Expansão $\epsilon$ -O modelo $O(n)$ . . . . .	136
5.7	Hamiltoniano de Heisenberg com anisotropia cúbica . . . . .	138
<b>6</b>	<b>Dimensão crítica inferior e a transição de Kosterlitz-Thouless</b>	<b>143</b>
<b>7</b>	<b>Dinâmica Crítica</b>	<b>144</b>
7.1	Dinâmica de Langevin . . . . .	145
7.1.1	Equação de Langevin: forma geral . . . . .	145
7.1.2	Método de Martin-Siggia-Rose. . . . .	146
7.1.3	Generalização da equação de Langevin para um campo . . . . .	148
7.2	Modelo Gaussiano . . . . .	149

# Prólogo

Toda a matéria que observamos no nosso dia a dia, corpos sólidos, atmosfera, água, organismos biológicos (incluindo nos mesmos!), é constituída por um número muito grande de moléculas. Elas são os tijolos fundamentais da física macroscópica, ou seja, a física da *nossa escala*, que poderia ser caracterizada por algumas unidades de medida como o metro, o quilograma e o segundo. Gosto de pensar que estas são as unidades “humanas”: avançamos com passos da ordem do metro, nossa massa é da ordem de alguns quilogramas e, como acostumava repetir com insistência meu Mestre, J. J. Giambiagi, “o nosso coração bate apenas uma vez por segundo”.

Durante séculos estudamos a natureza sem sequer conhecer a existência das moléculas. De fato, a termodinâmica, a teoria que descreve a relação entre calor e trabalho, alcançou seu ápice nos séculos XVIII e XIX sem sequer fazer menção à possível estrutura molecular da matéria. Isto começou a mudar no despertar do século XX, quando estudos realizados por Albert Einstein e Langevin, entre outros, conseguiram calcular o número de moléculas contida num mol de gás. Este número enorme, chamado de *constante de Avogadro*, é aproximadamente  $6 \times 10^{23}$ . A descoberta foi a confirmação da teoria molecular da matéria, a qual tinha sido bastante debatida no século XIX. Este avanço teve duas consequências interessantes. Por um lado, dado que a matéria é composta por moléculas poderíamos conhecer suas propriedades a partir de leis mais “fundamentais” como a mecânica (clássica ou quântica) e o eletromagnetismo, que descrevem o movimento de cada uma destas moléculas. Aparece deste modo um pensamento reducionista. A ideia que qualquer sistema complexo pode ser entendido a partir de uma teoria que descreve o comportamento das partes constituintes deste sistema começou a deslumbrar uma grande quantidade de cientistas que, até hoje, têm este tipo de pensamento como fio condutor nas suas pesquisas. O reducionismo científico teve logros importantes. Hoje podemos entender o comportamento molecular partindo dos átomos que compõem cada molécula. Por sua vez, descobrimos que estes átomos são formados por elétrons e um núcleo que também contem prótons e neutrons na sua composição, os quais por sua vez, são estruturados em pequenos blocos chamados quarks! A ideia essencial, defendida por físicos de muito renome, como Stephen Hawking entre outros, é que se tivermos uma teoria que descreve os *tijolos fundamentais* da natureza, então, teremos compreendido a natureza em sua totalidade, restando apenas um trabalho de engenharia dedicado ao cálculo de sistemas particulares a partir das leis “fundamentais” já conhecidas. Um detalhe importante neste processo de redução é que, cada descoberta de um nível mais fundamental de descrição leva a considerar uma

*mudança de escala.* Assim, começando da “unidade humana” o metro, temos que o raio de uma molécula é aproximadamente cem milhões de vezes menor,  $10^{-8}m$ . Por sua vez, um átomo é cem vezes menor que uma molécula,  $10^{-10}m$ . Já o próton,  $10^{-15}m$ , mede cem mil vezes menos que um átomo, sendo o quark ainda mil vezes menor que um próton,  $10^{-18}m$ . Aproximadamente as mesmas relações se verificam com as escalas de massa e tempo. Evidentemente, é muito difícil imaginar escalas tão distantes das humanas e, mais difícil ainda, é imaginar que as leis da física possam manter sua estrutura em cada mudança de escala onde a intuição não é um conceito muito útil. Esta linha de raciocínio levou à formulação das modernas teorias de partículas elementares baseadas na teoria quântica de campos. Ainda, a teoria de cordas é atualmente uma proposta que, eventualmente, poderia levar a esta “Teoria do Todo”.

Por outro lado, o fato da constante de Avogadro ser muito grande trouxe o seguinte problema que não é apenas técnico. Se quisermos descrever um gás a partir do movimento de cada molécula, imaginando que a mecânica é descrita pelas leis de Newton, deveríamos escrever uma equação diferencial vetorial para cada uma das moléculas. Isto fornece um sistema de aproximadamente  $3 \times 10^{23}$  equações diferenciais de segunda ordem acopladas. Para resolvê-las, deveríamos fornecer  $6 \times 10^{23}$  condições iniciais. Ou seja, seria necessário conhecer a posição e velocidade de cada molécula em um tempo dado. Aqui existem dois tipos de dificuldade. Uma delas é “meramente” técnica; obviamente é impossível resolver (sequer escrever!) um número tão grande de equações e condições iniciais. Porém, existe um outro problema mais conceptual e interessante. Mesmo que disponhamos de uma capacidade de cálculo e observação absurdamente grande, o resultado destas equações nos forneceria  $3 \times 10^{23}$  funções que descreveriam a trajetória de cada uma das moléculas em função do tempo. A pergunta é, que informação física relevante poderíamos extrair a partir desses dados? Os observáveis macroscópicos típicos em um gás são o volume, a pressão e a temperatura. De que forma essas quantidades macroscópicas são relacionadas com a trajetória individual de cada uma das componentes de um gás? Por que seria necessário conhecer em detalhe a evolução de  $10^{23}$  variáveis para descrever apenas três variáveis macroscópicas? Estas perguntas foram respondidas parcialmente com o advento da Mecânica Estatística, desenvolvida por Gibbs, Helmholtz, entre outros. A ideia essencial é que para um número limitado de variáveis macroscópicas existe um grande número de estados microscópicos acessíveis com certa probabilidade de ser realizados. Isto permite um tratamento estatístico das equações de movimento microscópicas. Esta teoria teve um amplo êxito já que conseguiu tender uma ponte entre a física microscópica e a termodinâmica de equilíbrio. Deve ser destacado que ainda não possuímos uma teoria similar para descrever processos macroscópicos fora do equilíbrio termodinâmico. A mecânica estatística, na sua formulação original, continua com o princípio reducionista já que, a princípio, ela descreve a física macroscópica a partir de uma escala imediatamente anterior. Neste sentido, uma quantidade macroscópica é descrita como uma *média estatística* de variáveis microscópicas. Por exemplo, a temperatura pode ser entendida como a média estatística da energia cinética das moléculas de um gás. Uma hipótese importante para que a descrição estatística seja consistente é que as *flutuações* ao redor da média devem

ser desprezíveis. Isto só é possível se o tamanho do sistema, número de partículas ou o volume, for extremamente grande, a rigor infinito. Aparece então o conceito de limite termodinâmico para descrever sistemas de tamanho macroscópico.

A ideia que todos os sistemas físicos, químicos, biológicos e até sociais sejam regidos pelas mesmas leis microscópicas, não implica que sistemas macroscópicos possam ser re-construídos a partir destas leis. Um exemplo intuitivo na *nossa escala* é o clima. Muitos fenômenos climáticos podem ser considerados como consequência da interação dinâmica da atmosfera e os mares. A rigor, conhecemos muito bem a física microscópica de cada processo que ocorre tanto na atmosfera quanto no mar. Porém, somos incapazes de prever com certa precisão quando vai chover e quanto numa determinada região num intervalo de tempo dado. Existe uma linha de pensamento reducionista que acredita que o problema é “apenas” de capacidade de cálculo, já que conhecemos todas as leis fundamentais do problema. Porém, não pode ser descartada a existência de princípios fundamentais que não são relacionadas diretamente com as componentes do sistema. De fato, existem “leis fundamentais” que dependem da escala e da complexidade do sistema e não estão necessariamente relacionadas com as leis microscópicas. Esta diferença entre reducionismo e construtivismo, ou ainda, a discussão do sentido de “princípio fundamental” começou a ser discutido por Phil Anderson no contexto da chamada quebra espontânea de simetria, fenômeno fundamental para a descrição de transições de fase. A partir desta discussão, surge o conceito, um tanto confuso, de comportamentos *emergentes*. Uma descrição muito precisa, no contexto da física teórica, foi discutido recentemente por S. Kivelson, definindo o comportamento emergente como qualquer propriedade qualitativa que ocorre apenas quando o número de componentes do sistema tende a infinito. Neste contexto se encontra o assunto principal deste livro: as transições de fase.

Dentro das transições de fase, os fenômenos críticos ocupam um lugar especial. Quando a matéria se encontra em estado crítico, as flutuações de qualquer observável ocorrem em todas as escalas possíveis. O comportamento dos principais observáveis não dependem da microscopia, e sistemas tais quais ferromagnetos e fluidos, tão diferentes do ponto de vista microscópico, têm essencialmente o mesmo comportamento. Esta ideia de universalidade se encaixa dentro dos comportamentos emergentes que precisam de princípios fundamentais para serem explicados.

Ao longo do livro, pretendemos esclarecer conceitos fundamentais tecidos neste prólogo como *mudança de escala, flutuações, universalidade*, os quais permearam toda a física teórica na década do 70/80, e ainda hoje são conceitos de extrema relevância na nossa compreensão da natureza.

No capítulo §1 introduzimos as principais ferramentas para a descrição das transições de fase. Descrevendo em detalhe a teoria fenomenológica de Landau, com vários exemplos que ajudam a esclarecer conceitos. Nos concentramos em dois sistemas típicos, os ferromagnetos e os líquidos simples e introduzimos conceitos como universalidade e leis de escala desde o começo. No capítulo §3 estudamos o mesmo problema desde o ponto de vista microscópico. A ferramenta básica é a mecânica estatística com a qual descrevemos modelos simples que ajudam a compreender a região de aplicabili-

dade da teoria de Landau. É discutido em detalhe como as aproximações usuais falham ao nos aproximarmos a um estado crítico. Neste contexto, o Grupo de renormalização surge como uma resposta aos problemas que apresenta a criticalidade. Desenvolvemos esta teoria no capítulo §4. O capítulo §6 é dedicado a um novo tipo de transição de fase, chamada de Kosterlitz-Thouless, onde os aspectos topológicos são fundamentais. A explicação desta transição foi reconhecida com o prêmio Nobel em Física 2016. No último capítulo, §7 resumimos alguns aspectos dinâmicos de transições de fase.

# Capítulo 1

## Transições de fase

Desde a época do ensino fundamental, aprendemos que a matéria pode ser encontrada essencialmente em três estados: sólido, líquido ou gasoso. O exemplo mais próximo, com o qual temos contato desde criança, é a água. Normalmente, encontramos a água em estado líquido. Porém, se ela for resfriada a temperaturas abaixo de  $0^{\circ}C$ , será transformada em gelo, apresentando-se em estado sólido. No outro extremo, a água líquida virará vapor de água (estado gasoso) se for aquecida acima de  $100^{\circ}C$ . Curiosamente, a composição química da água pura ( $H_2O$ ) é exatamente a mesma seja seu estado líquido, sólido ou gasoso. O que muda nestes três estados são as propriedades físicas macroscópicas, como por exemplo a densidade, o volume, a fluidez, etc. Esta mudança radical do comportamento de uma substância é um exemplo do fenômeno físico chamado de *transição de fase*. Outro exemplo é dado pelos materiais ferromagnéticos; compostos que contêm tipicamente ferro ( $Fe$ ), ou o níquel ( $Ni$ ). Estes materiais apresentam uma magnetização espontânea. No dia a dia temos contato com este fenômeno ao colarmos lembranças nos pequenos ímãs de geladeira. Se esquentarmos uma substância ferromagnética acima de uma certa temperatura, a magnetização é perdida e o material deixa de ser um ímã. As temperaturas de transição dependem do material, mas geralmente para os ímãs domésticos ficam entre  $300^{\circ}C$  e  $500^{\circ}C$ . A *mudança de estado*, do estado magnetizado a temperatura mais baixa para o estado "normal" sem magnetização a temperaturas mais altas, também é uma *transição de fase*. Esta transição específica é chamada de transição ferromagnética/paramagnética. Ao longo dos próximos capítulos vamos invocar repetidamente estas duas transições, pois são casos muito intuitivos para sua compreensão. Porém, na natureza existem inúmeros exemplos de transições de fase. Além das conhecidas transições líquido, sólido, gás, também existem estados intermediários entre cristais e líquidos chamados de cristais líquidos. Isto abre a porta para vários outros tipos de transições, algumas das quais estudaremos como exemplos neste capítulo. Existem outras transições de fase que acontecem quando a matéria é submetida a condições extremas de temperatura, pressão e campo magnético. Um exemplo importante é a supercondutividade. Os materiais metálicos apresentam resistência à passagem de corrente elétrica, o que se traduz em perdas de energia a través de calor. Porém, se eles forem resfriados suficientemente, abaixo dos  $30^{\circ}K$  ou

$-243^{\circ}\text{C}$ ! para os metais mais simples, o material começa a conduzir eletricidade sem perda de energia nenhuma, ou seja sem resistência! Isto também é uma transição de fase e pode ser explicada pela mesma teoria que descreve a transição líquido/vapor ou a transição ferromagnética. Existem também exemplos de transições de fase fora da área da matéria condensada. Em particular as modernas teorias cosmológicas estão fortemente baseadas na teoria de transições de fase. Retrocedendo no tempo, antes de uma centésima de segundo da “criação” ou “big-bang”, o universo era quente e muito denso. De fato, a matéria como a conhecemos agora se encontrava em outra fase. A ideia é que tudo começa com uma forma simétrica de matéria e, conforme o universo foi se expandindo e esfriando, vários tipos de transições de fase foram acontecendo. Em cada transição o universo ficou menos simétrico, o que deu origem à grande variedade de matéria que conhecemos hoje, como prótons, elétrons, etc. Independente dos detalhes específicos, a teoria geral das transições de fase que abordamos aqui tem aplicação direta nas teorias de evolução cosmológica.

O estudo das propriedades físicas de uma transição de fase tem se tornado um assunto fascinante devido a que com poucas ideias muito simples podem ser entendidas uma grande quantidade de fenômenos aparentemente desconexos de grande complexidade. Existem inúmeras propriedades que definem um estado da matéria macroscópica. Por exemplo, o volume, a densidade, a magnetização, a condutividade, a viscosidade, etc. Estas propriedades geralmente dependem de condições externas como temperatura, pressão, campo magnético, campo elétrico, etc. A teoria que descreve a relação entre os observáveis macroscópicos é a termodinâmica. Por esse motivo, vamos começar este capítulo com um pequeno resumo de termodinâmica, fazendo ênfase no formalismo necessário para descrever transições de fase. Depois, apresentamos a teoria de Landau para transições de fase estudando vários exemplos que ilustram o fenômeno e as técnicas necessárias para sua descrição.

## 1.1 Breve resumo de termodinâmica

A termodinâmica é uma teoria fenomenológica, desenvolvida ao longo de muitos anos de observações experimentais. Embora seja uma teoria empírica, ela foi reformulada a partir de alguns postulados básicos. A termodinâmica trata essencialmente das propriedades macroscópicas da matéria em equilíbrio. A ideia essencial é que o estado de equilíbrio termodinâmico de um sistema pode ser caracterizado por algumas poucas variáveis macroscópicas que não dependem do tempo. A pergunta essencial que a termodinâmica tenta responder é: qual o estado de equilíbrio que um sistema macroscópico atingirá, após alguns vínculos sejam removidos de um sistema. Esta pergunta pode ser respondida levando em conta postulados muito gerais. Para simplificar a discussão, a maioria das vezes vamos tratar um tipo de sistema chamado *sistema simples* ou *fluido puro*. Um fluido puro é um sistema macroscópico homogêneo, isotrópico, e eletromagnética assim como quimicamente inativo. Por outro lado um sistema composto pode ser considerado como um conjunto de fluidos puros separados por algum

vínculo.

### 1.1.1 Postulados da termodinâmica

- *Primeiro postulado*

O estado de equilíbrio de um fluido puro é completamente caracterizado pela sua energia interna  $U$ , o volume  $V$  e a quantidade de matéria, indicada pelo número de moles, ou o número de partículas  $N$ . Se o sistema for composto por um conjunto de  $k$  sistemas simples, o estado ficaria caracterizado pelo número de partículas de cada componente químico,  $N_1, \dots, N_k$ .

- *Segundo postulado*

Existe uma função chamada “entropia”, que depende de todas as variáveis extensivas do sistema e é definida para todos os estados de equilíbrio. No caso de um sistema simples,  $S \equiv S(U, V, N)$ , cujo *máximo* caracteriza a configuração de equilíbrio do sistema.

- *Terceiro postulado*

A entropia de um sistema composto é “aditiva” sobre cada uma das componentes do sistema. Também, é uma função contínua, diferenciável e monotonamente crescente da energia.

Para um sistema de  $k$  componentes, a propriedade aditiva se exprime como

$$S(U_1, V_1, N_1, \dots, U_k, V_k, N_k) = \sum_{i=1}^k S_i(U_i, V_i, N_i) \quad (1.1)$$

Por outro lado, para um fluido simples, a aditividade da entropia implica

$$S(\lambda U, \lambda V, \lambda N) = \lambda S(U, V, N), \quad (1.2)$$

onde  $\lambda$  é um número real qualquer. Desta forma, a entropia é uma função homogênea de primeiro grau.

- *Quarto postulado*

A entropia é nula em um estado em que  $(\partial U / \partial S)_{V, N} = 0$

A entropia  $S(U, V, N)$  é a equação fundamental de um sistema termodinâmico. Ela contém a informação completa do sistema em equilíbrio. As propriedades matemáticas expressadas no terceiro postulado implicam que esta função pode ser invertida, podendo escrever a energia interna do sistema como  $U \equiv U(S, V, N)$ . Esta equação também pode ser considerada fundamental já que contém exatamente a mesma informação sobre qualquer estado de equilíbrio. Podemos trabalhar então na *representação de entropia*, ou na *representação de energia* de forma completamente equivalente.

### 1.1.2 Variáveis intensivas, potenciais termodinâmicos e a transformadas de Legendre

Embora as equações fundamentais, tanto a energia interna quanto a entropia, dependem de variáveis extensivas, muitas vezes é conveniente introduzir variáveis intensivas, que não dependem do tamanho do sistema. Uma forma intuitiva de introduzir variáveis intensivas é derivando a equação fundamental. Por exemplo, na representação de energia,  $U(S, V, N)$ , poderíamos considerar a função

$$T(S, V, N) \equiv \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, N} \quad (1.3)$$

Pela definição é imediato verificar que  $T(S, V, N)$  é homogênea de ordem zero, isto é:

$$T(\lambda S, \lambda V, \lambda N) = T(S, V, N) , \quad (1.4)$$

o que representa uma variável intensiva. Da mesma forma, poderíamos ter definido variáveis intensivas derivando as funções fundamentais em relação a  $V$  e  $N$ . Uma das motivações para definir estas variáveis é que elas tem uma interpretação física direta e, muitas vezes, são muito mais simples de ser determinadas experimentalmente. A interpretação física surge de forma imediata se compararmos o diferencial exato da energia interna

$$dU = \left( \frac{\partial U}{\partial S} \right)_{V, N} dS + \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S, N} dV + \left( \frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S, V} dN \quad (1.5)$$

com a primeira lei da termodinâmica, ou o princípio de conservação da energia  $\Delta U = \Delta Q + \Delta W$ , onde  $\Delta U$  é a variação de energia interna,  $\Delta Q$  é o calor entregue ao sistema e  $\Delta W$  o trabalho realizado sobre o sistema. Considerando que o trabalho possa ter um origem mecânico e químico, temos que

$$\Delta U = T\Delta S - p\Delta V + \mu\Delta N , \quad (1.6)$$

onde  $T$  é a temperatura,  $p$  a pressão e  $\mu$  o potencial químico. Comparando as equações (1.5) e (1.6) podemos identificar imediatamente a função  $T(S, V, N)$  definida pela equação (1.3) como sendo a temperatura do sistema. De forma análoga, temos que a pressão ( $p$ ) e o potencial químico ( $\mu$ ) vêm dados por,

$$p(S, V, N) \equiv \left( \frac{\partial U}{\partial V} \right)_{S, N} , \quad (1.7)$$

$$\mu(S, V, N) \equiv \left( \frac{\partial U}{\partial N} \right)_{S, V} . \quad (1.8)$$

As equações (1.3), (1.7) e (1.8) são chamadas de *equações de estado* do sistema. Devido à propriedade de homogeneidade da equação fundamental, é suficiente conhecer duas equações de estado para determinar completamente o sistema.

É conveniente expressar a equação fundamental, seja ela na representação de entropia, seja na representação de energia, em termos de alguma variável intensiva. Na representação de energia  $U(S, V, N)$ , gostaríamos de substituir a entropia  $S$ , que neste caso é uma variável extensiva independente, pela temperatura, já que esta última é mais simples de ser determinada experimentalmente. Devemos então definir uma nova função com a informação completa do sistema termodinâmico, cujas variáveis independentes sejam  $(T, V, N)$ , de tal forma que,

$$U(S, V, N) \longrightarrow F(T, V, N) .$$

O procedimento matemático que implementa esta construção é conhecido como *Transformada de Legendre*.

- *Transformada de Legendre*

A transformada de Legendre é uma ferramenta de extrema importância, utilizada em várias áreas da física teórica. Em mecânica analítica é usada para passar da formulação Lagrangiana da teoria, em função de posição e velocidade, para a versão hamiltoniana, em função de posição e momento. Na termodinâmica a transformada de Legendre é a base para a definição de diferentes potenciais termodinâmicos. Na área de teoria de campos e mecânica estatística ela define a “ação efetiva” de uma teoria. Por este motivo, vamos fazer um pequeno parêntese para explicar brevemente seu fundamento geométrico.

Consideremos o caso de uma função real de apenas uma variável real  $y(t)$ . A variável  $t$  poderia ser considerada como o “tempo” numa analogia com a mecânica clássica mas, a princípio, ela é qualquer variável real. Supomos também que a derivada primeira (a velocidade)  $v(t) = dy/dt$  é bem definida. Na figura (1.1) mostramos, como exemplo, uma função  $y(t)$  crescente e côncava. Toda a informação desta curva está contida nos pares ordenados  $(t, y)$ . A ideia é construir outra função  $f(v)$ , cuja variável independente seja apenas a velocidade e que seja completamente equivalente à função  $y(t)$ , ou seja, que possua exatamente a mesma informação. A velocidade  $v$  é a reta tangente à curva em cada ponto. Por outro lado, o mero conhecimento de  $v$  não caracteriza a curva  $y(t)$  de forma unívoca, já que qualquer reta paralela à reta tangente tem exatamente o mesmo valor de  $v$ . Precisamos então de outra condição para determinar unívocamente a curva. Para isto, chamamos de  $f$  ao ponto onde a reta tangente corta o eixo  $y$  como indicado na figura (1.1). Observamos então que os pares  $(v, f)$  caracterizam unívocamente a mesma curva que os pares  $(t, y)$ . Uma simples relação geométrica nos fornece

$$f(v) = y(t) - vt , \tag{1.9}$$

onde, a variável  $t$  já não é independente e deve ser substituída por  $t(v)$ , que é obtida invertendo a equação  $v(t) = dy/dt$ . Esta transformação  $y(t) \rightarrow f(v)$  é conhecida como *transformada de Legendre*.

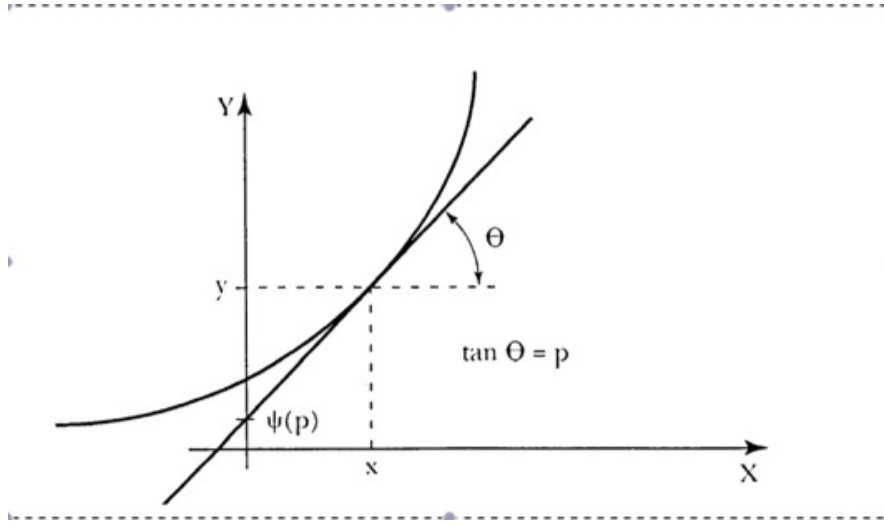


Figura 1.1: Transformada de Legendre

Uma propriedade interessante é que se a função  $y(t)$  é côncava, como na figura, a função  $f(v)$  é convexa. Desta forma, a transformada de Legendre muda a convexidade da função.

Utilizando a ferramenta da transformada de Legendre podemos definir o potencial termodinâmico, chamado de *energia livre de Helmholtz* que é definido por

$$F(T, V, N) = U(S, V, N) - TS, \quad (1.10)$$

onde  $S$  deve ser considerada como uma variável dependente  $S(T, V, N)$  que é calculada invertendo a equação de estado (1.3).

Nesta formulação, o diferencial total é,

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN. \quad (1.11)$$

Desta forma as *derivadas primeiras* da energia livre de Helmholtz fornecem as propriedades físicas do sistema como a pressão, a entropia e potencial químico,

$$p = - \left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_{T, N}, \quad S = - \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{V, N}, \quad \mu = \left. \frac{\partial F}{\partial N} \right|_{T, V} \quad (1.12)$$

As *derivadas segundas* da energia livre de Helmholtz fornecem observáveis tais como a compressibilidade

$$\kappa = \left. \frac{\partial p}{\partial V} \right|_{T, N} = - \left. \frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right|_{T, N} \quad (1.13)$$

ou o calor específico a volume constante,

$$C_V = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{V,N} = - T \left. \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right|_{V,N} \quad (1.14)$$

Utilizando o mesmo formalismo, podemos definir outros potenciais termodinâmicos, substituindo algumas das variáveis extensivas pela sua variável intensiva conjugada. Um caso importante é a *energia livre de Gibbs*, dada por

$$G(T, p, N) = U(S, V, N) - TS + pV , \quad (1.15)$$

onde  $S$  e  $V$  são variáveis dependentes, sendo calculadas como a inversa das equações (1.3) e (1.7). O diferencial total da energia livre de Gibbs é

$$dG = -SdT - Vdp + \mu dN . \quad (1.16)$$

As derivadas primeiras fornecem, nesta representação,

$$V = - \left. \frac{\partial G}{\partial p} \right|_{T,N} , \quad S = - \left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_{p,N} , \quad \mu = \left. \frac{\partial G}{\partial N} \right|_{T,p} \quad (1.17)$$

enquanto que as derivadas segundas descrevem quantidades como o calor específico a pressão constante

$$C_P = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_{p,N} = - T \left. \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right|_{p,N} \quad (1.18)$$

e a inversa da compressibilidade,

$$\kappa^{-1} = \left. \frac{\partial V}{\partial p} \right|_{T,N} = - \left. \frac{\partial^2 G}{\partial p^2} \right|_{T,N} \quad (1.19)$$

De forma equivalente podem ser construídas diferentes energias livres dependendo quais variáveis intensivas independentes são usadas. Por exemplo a *entalpia* é definida como função de  $(S, p, N)$  por

$$H(S, p, N) = U(S, V, N) + pV . \quad (1.20)$$

ou o *grande potencial termodinâmico* vem dado por

$$\Phi(T, V, \mu) = U(S, V, N) - TS - \mu N . \quad (1.21)$$

como função de  $(T, V, \mu)$ .

Se o sistema considerado não for um fluido puro poderiam existir outras variáveis independentes na definição da energia. Materiais com momento magnético intrínseco apresentam uma energia interna que depende da magnetização  $M$ , que é uma variável

extensiva. Neste caso,  $U \equiv U(S, V, T, M)$ . A variável intensiva conjugada à magnetização é o campo magnético  $H = \partial U / \partial M$ . Podemos definir uma transformada de Legendre para construir uma energia livre

$$F(T, V, N, H) = U(S, V, N, M) - TS - MH, \quad (1.22)$$

que depende da variável intensiva  $H$  e não mais da magnetização. O diferencial total é

$$dF = -SdT - pdV + \mu dN + MdH. \quad (1.23)$$

Desta forma, a magnetização e a suscetibilidade magnética são obtidas a partir de

$$M = - \left. \frac{\partial F}{\partial H} \right|_{T, V, N}, \quad \chi = \frac{\partial M}{\partial H} = - \left. \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right|_{T, V, N} \quad (1.24)$$

Como os potenciais termodinâmicos são funções homogêneas de primeiro grau, sempre tem uma dependência com pelo menos uma variável extensiva independente. Se fizermos a transformada de Legendre para substituir todas as variáveis extensivas por intensivas, o resultado seria zero. No caso de um fluido simples teríamos:

$$\Psi(T, p, \mu) = U - TS + pV - \mu N = 0, \quad (1.25)$$

que é conhecida como relação de Euler da termodinâmica. Dado que os potenciais são extensivos, é imediato deduzir, a partir da relação de Euler,

$$-p(T, \mu) = f(T, n) - \mu n, \quad (1.26)$$

onde a densidade  $n = N/V$  e  $f(T, n) = F(T, V, N)/V$  é a densidade de energia livre de Helmholtz. Nesta última equação, a variável  $n$  tem que ser substituída por  $\mu$  invertendo a relação

$$\mu = \frac{\partial f(T, n)}{\partial n}. \quad (1.27)$$

É útil, em alguns casos, definir uma função de variáveis intensivas independentes

$$W(T, n, \mu) = f(T, n) - \mu n. \quad (1.28)$$

A pressão, dada pelas equações (1.26) e (1.27), pode ser reescrita como a própria função  $W$ , calculada na sua densidade mínima,

$$-p(T, \mu) = W(T, n, \mu)|_{n=n_{\min}}, \quad (1.29)$$

sendo que  $n_{\min}$  é justamente a solução da equação de estado (1.27). Usaremos esta função para analisar a transição líquido-vapor na seção 2.

Temos portanto que a estrutura de uma teoria que descreve o equilíbrio termodinâmico é baseada em pares de variáveis conjugadas, por exemplo,  $(S, T)$ ,  $(V, p)$ ,  $(N, \mu)$ ,  $(M, H)$ , etc. As energias livres, ou também chamados potenciais termodinâmicos, são

descritos em termos de uma das variáveis destes pares, consideradas como independentes, enquanto que a variável conjugada é definida como a derivada primeira do potencial termodinâmico. Os diferentes potenciais são relacionados via uma transformação de Legendre. Frisamos novamente que todas as formulações são completamente equivalentes, o uso de uma u outra representação depende do problema a ser tratado, ou seja, de quais são as variáveis mais convenientes a ser consideradas como independentes. Como regra geral, tentamos escolher como variáveis independentes aquelas quantidades que são constantes no sistema em estudo. Isto reduz a dimensionalidade do problema matemático a ser resolvido.

## 1.2 Classificação de transições de fase

Devido à conservação da energia ou, à primeira lei da termodinâmica, a energia livre em qualquer representação é, por definição, uma função contínua. Em uma transição de fase a energia livre apresenta *singularidades* para valores específicos das variáveis independentes. Desta forma podemos classificar as transições de fase classificando o tipo de singularidades que aparecem. O caso mais evidente é quando alguma das *derivadas primeiras* da energia livre é descontínua. Neste caso, a transição de fase é chamada de *transição de primeira ordem* ou descontínua. Transições de fase de primeira ordem são aquelas que envolvem um calor latente. Durante a transição, o sistema absorve ou liberta energia, sendo que a temperatura do sistema permanece constante. Na transição descontínua, o sistema apresenta *coexistência de fases*. Isto é, algumas partes do sistema completaram a transição e outras não. A fusão do gelo ou a ebulição da água são os exemplos mais próximos de transições de primeira ordem com os quais convivemos a diário.

Pode acontecer também que as derivadas primeiras da energia livre sejam contínuas mas as *derivadas segundas* apresentem singularidades. Neste caso, a transição de fase é chamada de *segunda ordem* ou contínua. No geral, a transição de segunda ordem é caracterizada por uma suscetibilidade divergente, um comprimento de correlação infinito e um decaimento das correlações em forma de lei de potência. Exemplos de transições de fase de segunda ordem são a transição ferromagnética, a transição supercondutora e a transição superfluida.

Uma forma intuitiva de entender a diferença entre os dois tipos de transição surge da observação da variação da energia livre de Gibbs, quando variamos a temperatura de forma infinitesimal. A variação  $\delta G$  não pode ser descontínua devido a conservação da energia. Então, se definindo a densidade de energia livre  $g = G/V$ , a variação de energia poderá ter duas origens diferentes, ora muda a densidade de energia  $\delta G = V\delta g$  ora muda o volume  $\delta G = g\delta V$ . No primeiro caso, a transição de fase será de segunda ordem enquanto que no segundo caso a transição será de primeira ordem. No caso de primeira ordem, a variação do volume ocorre porque a nova fase aparece localizada em regiões do material como mostrado na figura (1.2). Aparecem assim bolhas da nova fase dentro da fase original. O volume desta bolha tem energia menor que a inicial.

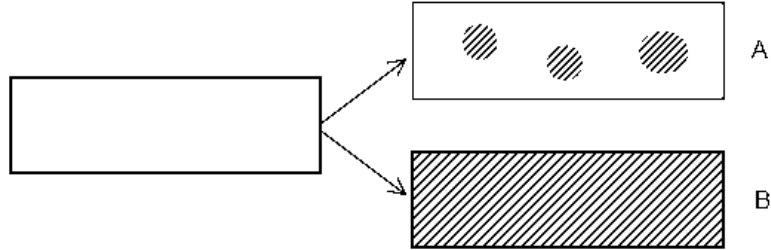


Figura 1.2: A transição de primeira ordem, B transição de segunda ordem

Por este motivo, as bolhas tendem a crescer para minimizar a energia livre. Este crescimento é proporcional ao volume da bolha  $\sim r^3$  (onde  $r$  é o raio da bolha). Por outro lado, a tensão superficial contribui de forma positiva para energia, crescendo com a área  $\sim r^2$ . Desta concorrência entre um efeito volumétrico e outro superficial surge um raio crítico, acima do qual as bolhas nucleadas crescerão ocupando todo o espaço, completando desta forma a transição de fase. Neste contexto as duas fases podem coexistir na temperatura de transição. Quando a transição é realizada completamente, as variáveis termodinâmicas mudam descontinuamente, caracterizando uma transição de fase de primeira ordem. Quando a mudança da energia livre ocorre através da densidade de energia,  $\delta G = V\delta g$ , a mudança de fase acontece em todo o volume de forma uniforme. É claro que neste caso não pode haver coexistência de fases, é as propriedades termodinâmicas mudam continuamente na transição. Se produz então uma transição de segunda ordem. Ao longo deste capítulo veremos exemplos onde poderemos detalhar com maior precisão todos estes conceitos.

Existem também transições de fases com características muito peculiares. O exemplo mais famoso é a transição de Kosterlitz-Thouless. Esta transição pode ser considerada contínua mas de ordem infinito, já que não existem singularidades nas derivadas da energia livre. Ainda, como veremos mais adiante, não existem simetrias quebradas na transição. Nesta classe de transições a topologia desempenha um papel fundamental. Estudaremos em detalhe estes aspectos no capítulo §6. Muitas transições de fase quântica, por exemplo, em gases de electrões bidimensionais, pertencem a esta classe.

### 1.3 Diagrama de fases

Um *diagrama de fase* é uma maneira conveniente de representar as diferentes fases que pode apresentar um sistema termodinâmico. Essencialmente, as fases são apresentadas por regiões geométricas num gráfico cujas coordenadas são as variáveis termodinâmicas externas, isto é, aquelas que podem ser manipuladas experimentalmente. O limite entre as regiões, que podem ser pontos, retas ou ainda superfícies, representam as transições de fase. Nesta seção, a título ilustrativo, mostramos dois exemplos típicos,

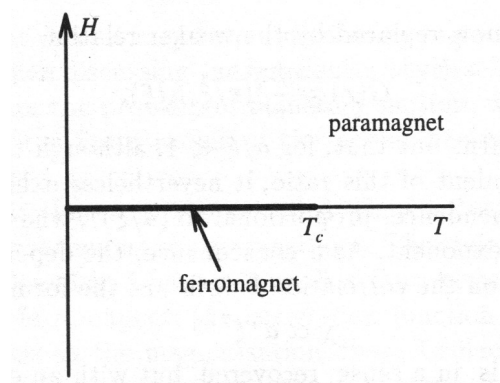


Figura 1.3: magnet

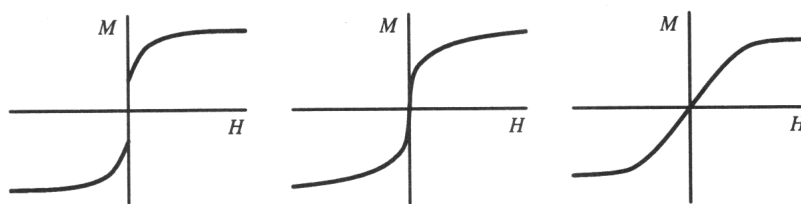
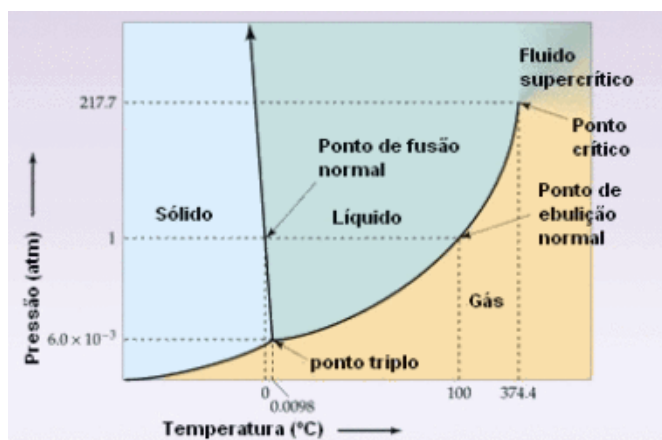


Figura 1.4: magnet-ISO

o ferromagneto uniaxial e o fluido simples, os quais ajudam a visualizar os principais conceitos contidos num diagrama de fases.

### 1.3.1 Ferromagnetos uniaxiais

Na figura 1.3 é mostrado o diagrama de fases típico de um ferromagneto uniaxial. Os eixos de coordenadas são a temperatura  $T$ , no eixo horizontal, e o campo magnético externo  $H$  no eixo vertical. Para  $H \neq 0$  o sistema apresenta uma magnetização  $M$  na mesma direção que  $H$ , é a chamada fase paramagnética do sistema. Quando  $H \rightarrow 0$ , o sistema pode apresentar magnetização, ou não, dependendo da temperatura. Para temperaturas altas  $T > T_c$ , o sistema se encontra em um estado desordenado com  $M = 0$ . Para baixas temperaturas  $T < T_c$ , o sistema apresenta uma magnetização espontânea, mesmo com  $H = 0$ . Esta é a fase ferromagnética. Na figura, a linha obscura representa uma linha de transição de primeira ordem que acaba num ponto crítico onde é de segunda ordem. Para compreender este comportamento, basta observar as isotermas da magnetização em função do campo magnético aplicado (fig. 1.4). Para temperatura menores que a crítica a magnetização muda descontinuamente de sinal ao

Figura 1.5: H<sub>2</sub>O

atravessarmos o eixo  $H = 0$ . Para  $H = 0$  existe uma magnetização espontânea, porém, o sinal da magnetização depende da história da transição. Ou seja, se colocarmos um pequeno campo magnético positivo e depois fazemos o limite  $H \rightarrow 0^+$ , a magnetização será positiva. Se por sua vez, se aplicarmos o campo na direção contrária e depois fizermos  $H \rightarrow 0^-$ , obteríamos uma magnetização negativa. Esta descontinuidade na magnetização (que é uma derivada primeira da energia livre), caracteriza uma transição de fase de primeira ordem. Conforme a temperatura cresce, o salto da descontinuidade fica menor, até desaparecer exatamente no ponto crítico. Neste ponto, a transição entre magnetização positiva e negativa se dá de forma contínua e exatamente no ponto crítico, ela é zero. Porém, como pode ser observado no gráfico,  $\partial M/\partial H \rightarrow \infty$  no ponto crítico. Isto caracteriza uma transição de segunda ordem. Acima da temperatura crítica não existem mais descontinuidades nem da energia livre nem suas derivadas.

### 1.3.2 Fluidos simples

Na figura 1.5 mostramos o diagrama de fases típico de um fluido simples (neste caso  $H_2O$ ). As variáveis termodinâmicas externas são a temperatura e a pressão. Este diagrama é um pouco mais complicado que o diagrama do ferromagneto dado que aqui existem três possíveis fases: líquida, sólida e gasosa. À pressão atmosférica ( $\sim 10^5 Pa$ ) e à temperatura ambiente ( $\sim 300K$ ), a água se encontra em estado líquido, caracterizado essencialmente pela sua densidade  $\rho$ . Se aumentarmos a temperatura ou abaixamos a pressão, a água sofrerá uma transição de fase para o estado gasoso, caracterizado por uma densidade muito mais baixa. Se pelo contrário abaixamos a temperatura, a transição de fase será ao estado sólido (gelo). Existe então um ponto onde as três fases podem coexistir, é o chamado ponto triplo da água. Este ponto é um exemplo dos pontos multicríticos. Este ponto pode representar uma coexistência de três fases, ou

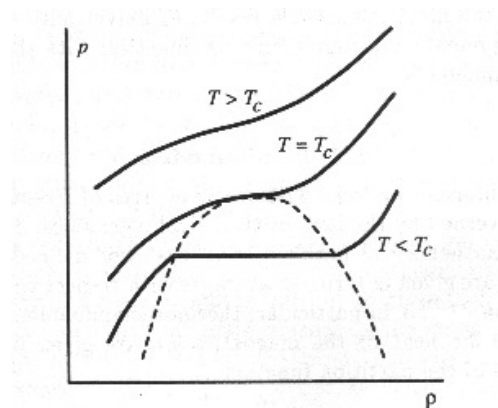


Figura 1.6: H2O-ISO

uma nova fase da matéria completamente diferente às anteriores. Para determinar qual destas duas opções é a correta, é necessário realizar uma análise mais sofisticada, apelando ao “grupo de renormalização” que estudaremos neste curso. A linha de transição líquido-vapor acaba em um ponto crítico onde já não é mais possível distinguir entre estado líquido e gasoso. Esta linha é uma linha de primeira ordem, análoga à linha de transição do ferromagneto uniaxial. Para observar isto é suficiente estudar as isothermas pressão/densidade como mostra a figura 1.6. Para baixas temperaturas,  $T < T_c$ , existe uma coexistência de duas fases com densidades alta (líquido) e baixa (gás). Esta descontinuidade é equivalente à mostrada na figura 1.4 para a magnetização. Conforme nos aproximamos ao ponto crítico, a descontinuidade vai se reduzindo até desaparecer, precisamente no ponto crítico. Neste ponto, a transição é contínua. Observamos então que, perto do ponto crítico, a transição líquido/gás é muito parecida com a transição ferromagnética. De fato se identificarmos

$$\rho_L - \rho_G \rightarrow M \quad (1.30)$$

$$P \rightarrow H \quad (1.31)$$

tanto o diagrama de fases das figuras 1.3 e 1.5 quanto as isothermas 1.4, 1.6 têm a mesma topologia.

## Capítulo 2

# Quebra espontânea de simetria e parâmetros de ordem

Uma fase termodinâmica pode ser caracterizada por propriedades locais ou globais. As propriedades locais podem ser determinadas pelo comportamento de uma função na vizinhança de um ponto no espaço. Neste tipo de abordagem, a *simetria* desempenha um papel fundamental na descrição tanto das fases quanto das transições de fase. Contrariamente, propriedades globais envolvem integrais de funções estendidas ao sistema todo. Neste caso, a caracterização matemática relevante é a topologia. Temos assim duas maneiras de caracterização de fases completamente diferentes. Chamamos estas fases de topológicas e não-topológicas para diferenciá-las. Neste capítulo começamos o estudo das transições de fase não-topológicas, onde a simetria é a base para a construção da teoria. No capítulo §6 estudaremos um caso onde a topologia é o elemento central.

O conceito de simetria e conseqüentemente os conceitos de *ordem* e *desordem* podem ser entendidos intuitivamente analisando o caso do ferromagneto uniaxial que já introduzimos na seção anterior. Um material ferromagnético pode ser visualizado como um conjunto de pequenos dipolos magnéticos que estão alinhados segundo um eixo. O dipolo que é uma quantidade vetorial, pode apontar em qualquer uma das duas direções do eixo. É costume chamar a estas direções de *acima e abaixo*, se pensarmos que o eixo no qual os dipolos se alinham é o eixo  $z$  num sistema de coordenadas cartesianas. Consideramos que quando o dipolo aponta para cima a momento magnético é positivo. Contrariamente, o sentido negativo é o dipolo apontando para abaixo. Na figura 2.1 mostramos uma representação típica de dipolos em uma dimensão espacial. A magnetização do sistema,  $M$ , é simplesmente a soma de todos os momentos dipolares do sistema. É claro que se a maior parte dos dipolos apontam, digamos pra cima, a magnetização será positiva. Se a magnetização for negativa, significa que a maioria dos dipolos apontam pra baixo. Por outro lado, se tivermos uma configuração com a metade dos dipolos alinhados na direção positiva e a metade na negativa, a magnetização seria nula. A magnetização máxima é obtida quando todos os dipolos estão *ordenados* apontando em alguma das duas direções possíveis.

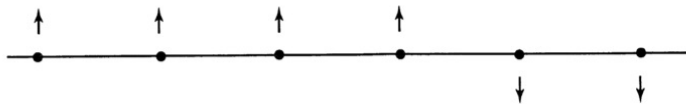


Figura 2.1: Configuração de dipolos num ferromagneto uniaxial unidimensional.

Note que, se  $M \neq 0$ , significa que existe certo grau de *ordem* no sistema, isto é, em média temos uma quantidade maior de dipolos alinhados em uma direção do que na direção contrária. Por outro lado, se  $M = 0$ , nossa representação nos leva a visualizar que os dipolos estão organizados de forma aleatória sem nenhuma ordem particular. Por este motivo, a fase onde o sistema apresenta uma magnetização  $M \neq 0$  é chamada de *fase ordenada*, enquanto que a fase sem magnetização,  $M = 0$ , é a chamada *fase desordenada*. Neste sentido, a magnetização  $M$  é chamada de *parâmetro de ordem*, isto é, um parâmetro que mede a ordem existente no sistema. Podemos entender agora a transição de fase ferromagnética como uma transição ordem-desordem. Para temperaturas altas, as flutuações térmicas fazem com que os dipolos se encontrem desordenados, produzindo uma magnetização nula,  $M = 0$ . Isto é, a temperaturas altas o sistema se encontra na fase desordenada. Abaixo de uma certa temperatura crítica  $T_c$ , dominos de dipolos começa a se ordenar produzindo  $M \neq 0$ . Vemos que para baixas temperaturas sistema se encontra numa fase ordenada. Desta forma, a diminuição da temperatura leva a uma tendência a ordenar o sistema. Existe um aspecto importante que ainda não temos comentado. Na fase ordenada a magnetização é diferente de zero, porém ela pode ser positiva ou negativa. Na ausência de campo magnético as duas orientações são igualmente prováveis. Isto significa que a energia do sistema não depende do sentido da orientação da magnetização. Se pensarmos em uma configuração particular, como por exemplo a da figura 2.1, e trocamos os dipolos positivos pelos negativos e vice versa, a configuração obtida deve ter exatamente a mesma energia que a original. Isto define uma *simetria* no sistema. Se definirmos a energia livre em função do parâmetro de ordem  $F(T, M)$ , ela satisfaz que  $F(T, -M) = F(T, M)$ . Por outro lado se, em vez de olharmos a energia livre focamos o estado de energia mínima, encontramos a seguinte situação: na fase desordenada,  $M = 0$ , o que representa uma fase obviamente simétrica, isto é, se trocarmos a direção de todos os dipolos, a magnetização continuará sendo nula. Por outro lado, na fase ordenada não acontece o mesmo. Suponha uma magnetização positiva  $M = M_0 > 0$ , se trocarmos a orientação dos dipolos obtemos  $M = -M_0 < 0$ . Ou seja, o estado de energia mínima não é simétrico na fase ordenada. Observe que a energia livre sempre é simétrica, já que ela não muda ao variarmos a temperatura, ela representa sempre o mesmo sistema físico. Porém, o estado fundamental não respeita a mesma simetria na fase ordenada. Se diz então que ocorre uma *quebra espontânea da simetria*. A transição de fase desordenada/ordenada pode ser entendida também como uma transição de uma fase *simétrica* para uma fase com *simetria quebrada*.

O mecanismo descrito de quebra espontânea de simetria não é próprio de este exemplo particular. Consideremos uma situação levemente diferente. Imagine que o ferromagneto já não é uniaxial, permitindo que a magnetização possa se orientar em qualquer eixo no espaço. Neste caso o parâmetro de ordem é um vetor  $\vec{M}$ . Na ausência de um campo magnético externo ou de anisotropias intrínsecas do material, todas as orientações serão igualmente prováveis. Desta forma, a energia livre deveria ser invariante perante rotações contínuas da magnetização;  $F(T, R\vec{M}) = F(T, \vec{M})$ , onde  $R\vec{M}$  significa o vetor obtido ao aplicarmos uma matriz de rotação  $R$  ao vetor  $\vec{M}$ . Se diz então que a energia livre é invariante perante o grupo de rotações; o grupo ortogonal em três dimensões  $O(3)$ . Da mesma forma que no caso uniaxial, a fase desordenada é simétrica já que  $\vec{M} = 0$ , sendo obviamente invariante perante rotações. Porém, na fase ordenada  $\vec{M} = \vec{M}_0$ . O estado magnetizado já não é simétrico pois se rotarmos os eixos, obtemos uma *outra magnetização*  $\vec{M}' = R\vec{M}_0$ . A aparição da fase ordenada ao diminuirmos a temperatura produz uma quebra espontânea da simetria.

Tendo estas ideias intuitivas como guia, podemos formular uma teoria geral para descrever transições de fase em termos de quebra espontânea de simetrias. O primeiro passo é definir um parâmetro de ordem,  $\phi$ . Este parâmetro de ordem deve transformar segundo uma representação irredutível de um grupo de simetria  $\mathcal{G}$ . Desta forma  $\phi' = \mathcal{G}\phi$ . Por definição  $\phi = 0$  representa a fase simétrica ou desordenada, sendo que  $\phi \neq 0$  é a fase ordenada ou com simetria quebrada. Nos exemplos anteriores, no caso do ferromagneto uniaxial, o parâmetro de ordem  $\phi = M$ , e o grupo de simetria é o grupo discreto de duas componentes  $Z_2$ . Já no caso do ferromagneto em  $R^3$ , o parâmetro de ordem  $\vec{M}$  é um vetor, isto é, uma das representações irredutíveis do grupo ortogonal  $O(3)$ .

As propriedades do sistema ficarão definidos por uma energia livre que depende do parâmetro de ordem e a temperatura. Quase sempre podemos imaginar um parâmetro de ordem que seja razoavelmente homogêneo na fase ordenada. Nesse caso, a energia livre ficara escrita genericamente em termos de uma função local, como

$$F = \int d^d x f(T, \phi(x)) + c \int d^d x \frac{1}{2} |\vec{\nabla}\phi(x)|^2 \quad (2.1)$$

onde  $f$  é a densidade de energia livre e o segundo termo é a energia necessária para produzir pequenas inhomogeneidades da fase ordenada.  $c$  é um parâmetro fenomenológico que mede a ordem de grandeza de essa energia. Estamos supondo que na fase ordenada é homogênea,  $\phi(x) = \phi$ , então  $F = V f(T, \phi)$ . A ideia da expansão de Landau é que muito perto da transição de fase,  $|\phi| \ll 1$ , já que na fase desordenada ele é zero. ( $|\phi|$  significa a norma do parâmetro de ordem no espaço em que estivermos trabalhando). Podemos fazer então uma expansão em serie de Taylor da densidade de energia livre em termos do parâmetro de ordem

$$f(T, \phi) = f(T) + \frac{1}{2} r \phi^2 - w \phi^3 + u \phi^4 + \dots \quad (2.2)$$

Nesta equação,  $f(T)$  é a densidade de energia livre na fase desordenada, onde  $\phi = 0$ . Para a descrição da transição de fase não é necessário conhecer esta função já que o

que interessa é a diferença  $\Delta f = f(T, \phi) - f(T)$ . Os coeficientes  $r, w, u$  a principio dependem da temperatura. Também, deve ser notado que a equação (2.2) é expressa numa notação simbólica, ou seja,  $\phi^2$  significa a combinação quadrática mais geral que é invariante perante o grupo de simetrias  $\mathcal{G}$ . O mesmo acontece com as outras potências. Note também que não é possível escrever um termo linear  $\sim \phi$ , já que a energia livre deve ser simétrica em relação ao grupo  $\mathcal{G}$ . É claro que um termo linear poderia aparecer no caso de uma quebra explícita da simetria, como por exemplo na presença de um campo magnético externo. De posse da energia livre, podemos escrever a equação de estado,

$$h = \left. \frac{\partial f}{\partial \phi} \right|_T = r\phi - 3w\phi^2 + 4u\phi^3 \quad (2.3)$$

onde  $h$  é a variável conjugada ao parâmetro de ordem  $\phi$ . No caso do ferromagneto,  $h$  é o campo magnético.

Tendo uma expressão fenomenológica para a energia livre e conseqüentemente uma equação de estado, podemos obter qualquer observável termodinâmico a partir desta teoria. A continuação vamos explorar com mais detalhes diferentes exemplos da teoria de Landau para transições de fase.

## 2.1 A transição ferromagnética

Voltamos a considerar o caso do ferromagneto uniaxial agora com um pouco mais de detalhe. Apenas para lembrar as condições do sistema, consideramos um material ferromagnético onde a magnetização  $M$  pode estar alinhada apenas em um eixo que podemos escolher como o eixo  $z$ . Porém, a magnetização pode estar orientada ao longo do eixo positivo ou negativo. A energia livre deve ser então simétrica perante a transformação  $M \rightarrow -M$ . Isto corresponde ao grupo de transformações  $\mathcal{G} = Z_2$ , o grupo discreto de dois elementos. Isto força a que na expansão em serie de Taylor da densidade de energia livre, equação (2.2), apenas podem existir termos com potências pares, já que qualquer termo com potência ímpar quebraria explicitamente a simetria  $Z_2$ . Temos então que,

$$f(T, M) = f(T) + \frac{1}{2}r M^2 + u M^4 + \dots \quad (2.4)$$

Nesta expansão supomos que  $u > 0$ , o que permite cortar a serie de Taylor nessa potência. Se por qualquer motivo  $u < 0$ , devemos considerar o termo  $\sim M^6$  para garantir a estabilidade da teoria. Esperamos que para baixas temperaturas um estado ferromagnético, portanto deveríamos ter pelo menos um mínimo de  $f$  diferente de zero. Para lograr isto permitimos que o coeficiente do termo quadrático mude de sinal em uma temperatura  $T_c$ :

$$r = a(T - T_c) \quad (2.5)$$

onde  $a$  é uma constante positiva qualquer. A função  $f(M)$  para diferentes temperaturas é mostrada na figura 2.2. A primeira observação é que a energia livre tem simetria

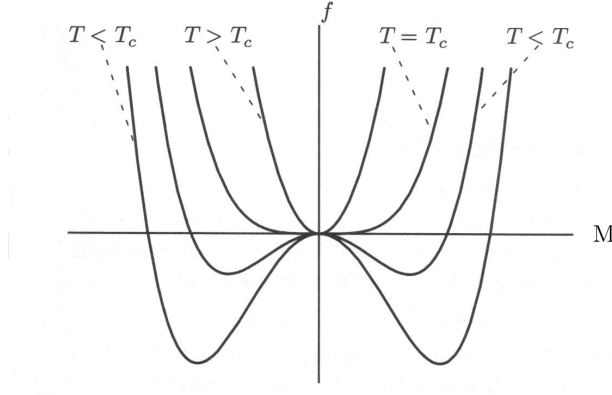


Figura 2.2: f-Ising

$M \rightarrow -M$  qualquer que seja a temperatura. Para  $r > 0$ , ou  $T > T_c$ , a energia livre tem apenas um mínimo em  $M = 0$  como é mostrado na figura. Para  $T < T_c$  ou  $r < 0$ , a função desenvolve dois mínimos com energia degenerada. Isto é a marca principal da quebra espontânea de simetria. A aparição de dois mínimos é associada ao grupo de simetria  $Z_2$ . Exatamente na temperatura crítica  $T = T_c$  ou  $r = 0$ , o curva tem um mínimo com curvatura zero, o que sinaliza o ponto de transição ou ponto crítico. Podemos estudar de forma quantitativa este comportamento a través da equação de estado (2.3), no caso ela tem a seguinte forma,

$$h = \frac{\partial f}{\partial M} = r M + 4u M^3, \quad (2.6)$$

onde  $h$  é o campo magnético.

Para  $h = 0$  as soluções são:

$$M = \begin{cases} 0 & \text{se } T > T_c \\ \pm(-r/4u)^{1/2} & \text{se } T < T_c \end{cases} \quad (2.7)$$

obtendo de forma explícita o valor dos mínimos descritos na figura 2.2. Para obter explicitamente  $M(T)$ , substituímos o valor de  $r$  para  $T < T_c$ , obtendo

$$M \sim (T_c - T)^{1/2} \Theta(T_c - T) \quad (2.8)$$

onde  $\Theta(T_c - T)$  é a função de Heaviside. A função da equação (2.8) é mostrada na figura 2.3. Portanto, o comportamento do parâmetro de ordem com a temperatura (para  $T < T_c$ ) é uma lei de potências dada por  $M \sim (T_c - T)^\beta$ , onde  $\beta$  é chamado de *expoente crítico*. A teoria de Landau prediz  $\beta = 1/2$  para o ferromagneto com simetria  $Z_2$ .

A suscetibilidade pode ser calculada derivando implicitamente a equação (2.6) em relação a  $h$ ,

$$\left[ r + 12uM^2 \right] \frac{\partial M}{\partial h} = 1 . \quad (2.9)$$

Substituindo o valor de  $M$  dado pela equação (2.7) obtemos

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = \begin{cases} 1/r & \text{se } T > T_c \\ 1/(2|r|) & \text{se } T < T_c \end{cases} . \quad (2.10)$$

Portanto, a suscetibilidade também é uma lei de potências perto da transição de fase com a forma,

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma} . \quad (2.11)$$

A teoria de Landau prediz  $\gamma = 1$  para o presente exemplo.

A dependência de  $M(h)$  com o campo magnético  $h$  na temperatura crítica  $T_c$ , pode ser calculada facilmente da equação de estado (2.6). O resultado é

$$M = \left( \frac{h}{4u} \right)^{1/3} \sim h^{1/\delta}, \quad T = T_c \quad (2.12)$$

onde  $\delta = 3$  é outro expoente crítico.

O calor específico

$$C_v = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \quad (2.13)$$

também pode ser calculado de forma simples nesta aproximação. Na equação 2.4, observamos que a energia livre tem essencialmente dois termos. O primeiro é uma função analítica da temperatura e o segundo contém a dependência no parâmetro de ordem. Portanto, o calor específico também terá duas contribuições. Uma contendo uma função monótona  $-T(\partial^2 f(T)/\partial T^2)$ , a qual dá conta dos graus de liberdade que não dependem do ordenamento, e a outra contribuição,  $c_V = -T(\partial^2 f(T, M)/\partial T^2)$ , contém a informação dos graus de liberdade que intervêm na transição de fase. Dado que  $f(T, M_{\min})$  é negativa para  $T < T_c$  e zero para  $T > T_c$

$$f(T, M_{\min}) = \begin{cases} 0 & \text{se } T > T_c \\ -r^2/(16u) & \text{se } T < T_c \end{cases} , \quad (2.14)$$

o calor específico  $c_V$  será positivo como ditam as condições de estabilidade termodinâmica.

$$c_V = \begin{cases} 0 & \text{se } T > T_c \\ Ta^2/(8u) & \text{se } T < T_c \end{cases} \quad (2.15)$$

Vemos que esta componente do calor específico tem uma descontinuidade em  $T = T_c$  indicando a presença de uma transição de fase de segunda ordem.

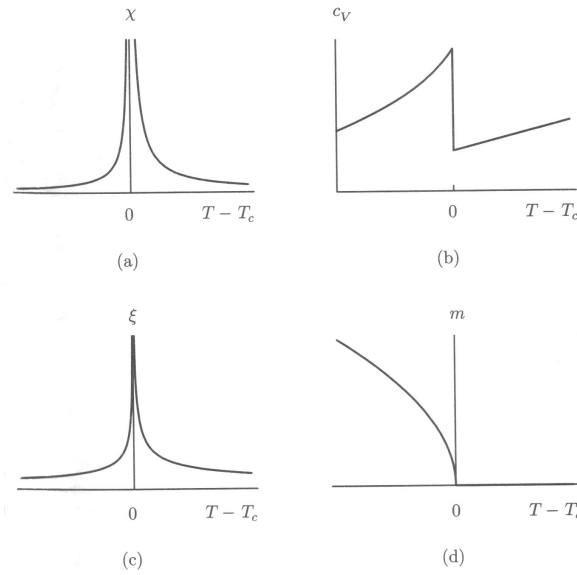


Figura 2.3: derivatives-Ising

A magnetização, suscetibilidade e calor específico em função da temperatura são mostrados na fig. 2.3. Observamos o comportamento típico de uma transição de fase de segunda ordem, isto é, o parâmetro de ordem cresce continuamente na temperatura crítica, enquanto que as derivadas segundas como a suscetibilidade e o calor específico tem singularidades. A suscetibilidade apresenta uma divergência e o calor específico é descontínuo de acordo com a teoria de Landau.

### suscetibilidade não-local e comprimento de correlação

Podemos ter uma visão mais profunda da transição de fase estudando pequenas deformações locais do parâmetro de ordem. Para isto consideremos que a magnetização pode flutuar com a posição,  $M = M(x)$ . A energia livre terá a forma

$$F[M] = \int d^d x c |\vec{\nabla} M|^2 + \frac{1}{2} r M^2(x) + u M^4(x) \quad (2.16)$$

onde o parâmetro  $c$  mede a energia necessária para produzir uma flutuação suave em torno do valor homogêneo da magnetização. Para escrever esta energia livre tem sido desprezados termos proporcionais à derivada segunda do parâmetro de ordem. Observamos agora que  $F[M]$  é uma funcional da magnetização  $M(x)$ . Podemos definir então a equação de estado,

$$h(x) = \frac{\delta F[M]}{\delta M(x)} \quad (2.17)$$

onde  $\delta$  significa derivada funcional e  $h(x)$  é um campo magnético inhomogêneo.

A suscetibilidade não local é definida por

$$\chi(x, x') = \frac{\delta M(x)}{\delta h(x')}, \quad (2.18)$$

representando a variação da magnetização num ponto  $x$ , devido à variação do campo magnético num outro ponto  $x'$ . Muitas vezes, resulta mais simples calcular primeiro a inversa da suscetibilidade que é definida como

$$\chi^{-1}(x, x') = \frac{\delta h(x)}{\delta M(x')} = \frac{\delta^2 F}{\delta M(x') \delta M(x)} \quad (2.19)$$

onde na última igualdade fizemos uso da equação de estado (2.17). Calculando explicitamente  $\chi^{-1}$  usando as eqs. (2.19) e (2.16) obtemos

$$\chi^{-1}(x, x') = (r + 12uM^2 - c\nabla^2) \delta(x - x'). \quad (2.20)$$

Para inverter o operador diferencial no regime em que  $M$  é homogêneo, é mais simples trabalhar no espaço de Fourier,

$$\chi^{-1}(q) = r + 12u M^2 + c q^2. \quad (2.21)$$

A inversão agora é direta, obtendo

$$\chi(q) = \frac{1}{r + 12u M^2 + c q^2}, \quad (2.22)$$

a qual pode ser rescrita como

$$\chi(q) = \frac{\chi}{1 + (q\xi)^2}, \quad (2.23)$$

onde  $\chi$  é a suscetibilidade local dada pela equação (2.10), e

$$\xi = \frac{c^{1/2}}{\sqrt{r + 12uM^2}} = \begin{cases} (c/r)^{1/2} & \text{se } T > T_c \\ [c/(-2r)]^{1/2} & \text{se } T < T_c \end{cases} \quad (2.24)$$

é o chamado *comprimento de correlação*.

A existência de um comprimento de correlação  $\xi$  pode ser deduzido simplesmente por argumentos dimensionais. Considere a energia livre  $F$  da eq. (2.16). Se  $M$  for adimensional, então  $r$  tem unidades de (energia)  $\times$  (comprimento) $^{-d}$  ( $[r] = [EL^{-d}]$ ). Portanto  $[c] = [EL^{d-2}]$ . Então  $(c/r)^{1/2} \sim \xi$  deve ter unidades de comprimento. Com estes argumentos podemos introduzir um comprimento que não dependa da temperatura como

$$\xi_0 = \left( \frac{c}{r(T=0)} \right)^{1/2} = \left( \frac{c}{aT_c} \right)^{1/2} \quad (2.25)$$

Este comprimento define a escala microscópica, já que as constantes fenomenológicas  $c, a, T_c$  só podem ser determinadas conhecendo detalhes microscópico do sistema. Perto da transição de fase, o comprimento de correlação, eq. (2.24) escala com a temperatura da seguinte forma,

$$\xi = \xi_0 \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu}. \quad (2.26)$$

A combinação  $t = (T - T_c)/T_c$  é chamada de temperatura reduzida, sendo ela adimensional  $[t] = 1$ .  $t > 0$  representa temperaturas acima da temperatura crítica, enquanto  $t < 0$  para temperaturas abaixo da crítica. O expoente  $\nu$ , também é chamado de expoente crítico e, na presente aproximação tem o valor  $\nu = 1/2$ . É interessante observar que, conforme nos aproximarmos do ponto crítico  $t \rightarrow 0$ , o comprimento de correlação é arbitrariamente grande. Mostramos este comportamento na figura 2.3.

Para compreender o significado físico do comprimento de correlação, calculamos a suscetibilidade no espaço real. Para isto temos que calcular a anti-transformada de Fourier

$$\chi(x - x') = \chi \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{1 + (q\xi)^2}. \quad (2.27)$$

A integral pode ser re-escrita como

$$\chi(x - x') = c^{-1} |x - x'|^{-(d-2)} Y(|x - x'|/\xi) \quad (2.28)$$

onde

$$Y(\eta) = \int_0^\infty dz z^{d-1} \int \frac{d\Omega_d}{(2\pi)^d} \frac{e^{iz \cos \theta}}{z^2 + \eta}, \quad (2.29)$$

sendo  $d\Omega_d$  a medida de integração sobre os ângulos de uma esfera de dimensão  $d$ . Em três dimensões esta integral tem o valor,

$$Y(\eta) = \frac{1}{4\pi} e^{-\eta} \quad d = 3. \quad (2.30)$$

Portanto a suscetibilidade é

$$\chi(x - x') = \frac{1}{4\pi c} \frac{e^{-|x-x'|/\xi}}{|x - x'|}. \quad (2.31)$$

Observamos que  $\chi(x - x')$  é uma função decrescente de  $|x - x'|$ . Longe do ponto crítico a função vai para zero de forma exponencial. Isto significa que para distâncias  $|x - x'| > \xi$ , a suscetibilidade é praticamente zero. Porém, conforme nos aproximarmos do ponto crítico,  $\xi \rightarrow \infty$  e, na temperatura crítica a suscetibilidade tem a forma de uma lei de potências,

$$\chi(x - x') = \frac{1}{4\pi c} \frac{1}{|x - x'|}. \quad (2.32)$$

A suscetibilidade ainda é decrescente, mas decresce muito lentamente não tendo uma escala característica. Esta lei de escala, é recorrente em qualquer transição de fase continua. No decorrer do texto vamos entender melhor os motivos para que isto ocorra.

É importante ainda analisar o significado físico da suscetibilidade não local para se ter uma compreensão mais apurada do comprimento de correlação. Considerando a aplicação de um campo magnético muito pequeno podemos supor que a variação da magnetização e o campo magnético são proporcionais, é a chamada teoria de resposta linear, ela nos diz que

$$\delta M(x) = \int d^d x' \chi(x - x') h(x'). \quad (2.33)$$

Se ainda aplicamos um campo localizado na origem, algo assim como um solenoide de comprimento infinito mais de raio infinitesimal,  $h(x) = h\delta(x)$ , a magnetização na fase desordenada ( $T > T_c$ ) será

$$M(x) = h\chi(x). \quad (2.34)$$

Portanto, suscetibilidade não local é essencialmente a magnetização produzida num ponto  $\vec{x}$ , devido a um campo magnético local aplicado na origem de coordenadas. Neste sentido, ela é uma medida da correlação entre os graus de liberdade do sistema. Se  $|\vec{x}| \gg \xi$ , a magnetização é praticamente zero, já que a suscetibilidade decai exponencialmente. Isto é, um campo magnético local apenas influencia os graus de liberdade que se encontram a uma distancia  $|\vec{x}| < \xi$ . Porém, perto do ponto crítico, onde  $\xi \rightarrow \infty$  a magnetização é diferente de zero em toda a mostra, o que reflete que os graus de liberdade da amostra toda são correlacionados. Esta é a ideia fundamental que caracteriza um ponto crítico. O fato que todos os graus de liberdade, em todas as escalas, são correlacionados produzem a beleza de este estado da matéria, assim como todas suas dificuldades para uma descrição teórica consistente.

## 2.2 A transição líquido-gás

A transição líquido-gás, em muitos aspectos é similar à transição ferromagnética. De fato, nos dois casos existe uma linha de transição de primeira ordem que acaba num ponto crítico. Por esse motivo é interessante comparar os dois casos. Os diagramas de fase, perto do ponto crítico, estão indicados na fig. 2.4 No caso da transição ferromagnética, a magnetização no ponto crítico é  $m_c = 0$ . Portanto, o parâmetro de ordem  $M$  pode ser escrito como  $M = m - m_c$ . A linha de coexistência é a reta  $h = 0$ , e o ponto crítico fica determinado por  $(h = 0, m_c = 0, T = T_c)$ . No caso da transição líquido/vapor, o diagrama tem a mesma topologia. Podemos definir o parâmetro de ordem de forma parecida ao caso ferromagnético como  $\phi = n - n_c$ , onde  $n_c$  é a densidade no ponto crítico, que agora fica definido por  $(p_c, T_c, n_c)$ . As duas transições têm algumas diferenças mais o menos óbvias. A transição ferromagnética, como descrita anteriormente, é de segunda ordem, enquanto que a evaporação de água normalmente observada é obviamente de primeira ordem. A diferença reside nos diferentes “caminhos” nos quais a transição é realizada. Na figura (2.4) mostramos alguns caminhos equivalentes nos dois tipos de transição. No caso mais intuitivo da água fervendo, geralmente o processo é observado a pressão constante. Neste caminho, a transição é claramente de primeira ordem. O caminho equivalente no caso ferromagnético, seria uma reta

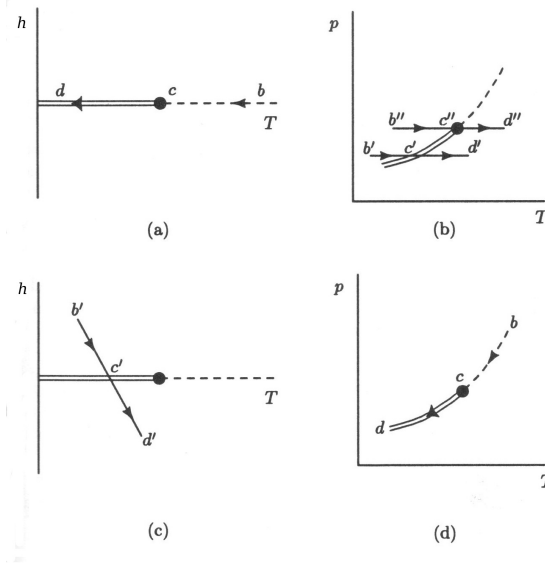


Figura 2.4: Caminhos

obliqua no plano  $H - T$  como mostra a figura. Neste caso, a transição também seria de primeira ordem. A transição de segunda ordem no ferromagneto é observada quando o caminho se faz ao longo da linha  $h = 0$  que, para temperaturas baixas, coincide com a linha de coexistência. O caminho equivalente para um fluido seria uma transformação isocórica (volume constante, ou equivalentemente  $n = \text{constante}$ ), que passe pelo ponto crítico. Ou seja, o caminho deveria ser realizado ao longo da linha  $n = n_c$ . A diferença principal entre os dois diagramas de fase é que a linha de coexistência, em um caso é reta ao longo do eixo da temperatura e, no outro caso, é uma curva de volume constante. Portanto, para descrever a transição líquido-vapor perto do ponto crítico usando uma teoria de Landau, como no caso anterior, teríamos que, primeiramente, identificar o ponto crítico  $(n_c, p_c, T_c)$ , logo depois identificar a equação da isocórica  $n = n_c$ , para finalmente escrever a energia livre em termos dos desvios do parâmetro de ordem sobre esta linha.

Começamos considerando o grande potencial termodinâmico

$$\Phi(T, V, \mu) = F(T, V, N) - \mu N \quad (2.35)$$

onde  $N$  tem que ser escrita em termos de  $\mu$  invertendo a equação

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N}. \quad (2.36)$$

As correspondentes equações de estado são

$$p = -\frac{\partial \Phi}{\partial V} \quad N = -\frac{\partial \Phi}{\partial \mu} \quad (2.37)$$

Dado que  $\Phi$  é extensivo pode ser rescrito em termo de densidades como

$$\Phi(T, \mu, V) = V(f - \mu n) , \quad (2.38)$$

onde  $f = F/V$  e  $n = N/V$ . Desta forma a equação de estado é

$$\frac{\partial \Phi}{\partial V} = -p(T, \mu) = f(T, n) - \mu n \quad (2.39)$$

com  $n = \partial f / \partial \mu$ .

Queremos definir uma densidade de energia livre que tenha uma dependência no parâmetro de ordem. Para isto definimos a função,

$$w(T, \mu, n) = f(T, n) - \mu n \quad (2.40)$$

como foi descrito na seção 1.1.2. A pressão, dada pela equação (2.39), pode ser obtida a partir desta densidade de energia como

$$-p(\mu, T) = w(T, \mu, n)|_{n=n_{\min}} \quad (2.41)$$

onde  $n_{\min}$  é a densidade que minimiza a função  $w(T, \mu, n)$ , isto é,  $\partial w / \partial n = \partial f / \partial n - \mu = 0$ .

A primeira condição para a determinação do ponto crítico  $(T_c, \mu_c, n_c)$  é a equação de estado

$$\frac{\partial w}{\partial n} = \frac{\partial f}{\partial n} - \mu = 0. \quad (2.42)$$

Esta equação fixa uma relação entre  $\mu, n, T$  que deve cumprir qualquer sistema em equilíbrio. Como pode ser observado na figura 1.6, no ponto crítico, a isoterma no plano  $p - n$  tem um ponto de inflexão, o que leva à condição

$$\frac{\partial^2 w}{\partial n^2}(T_c, \mu_c, n_c) = \frac{\partial^2 f(T_c, n)}{\partial n^2} \Big|_{n=n_c} = 0. \quad (2.43)$$

Finalmente, observamos que as duas soluções da equação de estado tem que tender continuamente a uma única solução no ponto crítico, isto leva à condição,

$$\frac{\partial^3 w}{\partial n^3}(T_c, \mu_c, n_c) = \frac{\partial^3 f(T_c, n)}{\partial n^3} \Big|_{n=n_c} = 0. \quad (2.44)$$

As equações (2.42), (2.43) e (2.44) determinam univocamente a posição do ponto crítico  $(T_c, \mu_c, n_c)$ . A partir deste, a pressão crítica é obtida de

$$p_c = -w(T_c, \mu_c, n_c). \quad (2.45)$$

Estamos agora em condições de desenvolver a expansão de Landau no parâmetro de ordem,  $\phi = n - n_c$ , considerando  $|\phi| \ll 1$ . Obtemos,

$$w(T, \mu, n) = w(T, \mu, n_c) - h\phi + \frac{1}{2}r\phi^2 - v\phi^3 + u\phi^4 . \quad (2.46)$$

Diferentemente do caso ferromagnético, não temos aqui argumentos de simetria para anular as potências ímpares. A princípio, os coeficientes  $h, r, v, u$  são funções desconhecidas de  $T, \mu$ , dadas por

$$h(\mu, T) = \mu - \left. \frac{\partial f(T, n)}{\partial n} \right|_{n=n_c} \quad (2.47)$$

$$r(T) = \left. \frac{\partial^2 f(T, n)}{\partial n^2} \right|_{n=n_c} \quad (2.48)$$

$$v(T) = -\frac{1}{3!} \left. \frac{\partial^3 f(T, n)}{\partial n^3} \right|_{n=n_c} \quad (2.49)$$

$$u(T) = \frac{1}{4!} \left. \frac{\partial^4 f(T, n)}{\partial n^4} \right|_{n=n_c} . \quad (2.50)$$

Embora esta expansão seja diferente que o caso da transição ferromagnética, comprovamos a partir das condições (2.42) (2.43) e (2.44) que, no ponto crítico,  $h = r = v = 0$ . Ou seja que, muito perto do ponto crítico, na fase desordenada, a energia livre das duas transições é proporcional à quarta potência do parâmetro de ordem. Podemos então expandir os parâmetros, perto do ponto crítico, em potências de  $\Delta T = T - T_c$  e  $\Delta\mu = \mu - \mu_c$  da seguinte forma,

$$h(\mu, T) = \Delta\mu - b\Delta T + O(\Delta T)^2 \quad (2.51)$$

$$r(T) = a\Delta T + O(\Delta T)^2 \quad (2.52)$$

$$v(T) = g\Delta T + O(\Delta T)^2 . \quad (2.53)$$

O parâmetro  $u(T) \sim u(T_c) \sim u > 0$ , por razões de estabilidade. Sobre a isócara  $n = n_c$ ,  $\phi = 0$ , então  $h(\mu, T) = 0$  (usando a eq. de estado). Isto leva a uma relação linear entre  $\Delta\mu$  e  $\Delta T$  sobre a isócara, dada pela eq. (2.51)

$$\Delta\mu = b\Delta T + O(\Delta T)^2 \quad (2.54)$$

A densidade de energia  $w$ , também pode ser expandida em  $\Delta T$  e  $\Delta\mu$  sobre a isócara  $n = n_c$ , obtendo,

$$w(T, \mu, n_c) = -p_c - \Delta\mu n_c + e\Delta T + O(\Delta T)^2 . \quad (2.55)$$

usando a eq. (2.54) obtemos uma relação linear entre a pressão e a temperatura perto do ponto crítico

$$p - p_c = (bn_c - e)\Delta T + O(\Delta T)^2 . \quad (2.56)$$

Vemos então que a isócara  $P - T$ , que é a linha onde queremos estudar a transição de fase, perto do ponto crítico tem a mesma inclinação na fase ordenada e na fase de coexistência. Ela também apresenta curvatura, mas veremos que esta é diferente nas duas fases.

Podemos calcular agora grandezas como por exemplo a compressibilidade  $\kappa_T = \partial n / \partial \mu$ . É mais simples calcular a inversa da compressibilidade como

$$\frac{\partial \mu}{\partial n} = \frac{\partial^2 w}{\partial n^2} \Big|_{n=n_c} = \frac{\partial^2 w}{\partial \phi^2} \Big|_{\phi=0} = n_c^{-2} \kappa_T^{-1} = r \quad (2.57)$$

então,  $\kappa_T \sim 1/r$  ou

$$\kappa_T \sim \frac{1}{|T - T_c|^\gamma} \quad , \quad \gamma = 1 . \quad (2.58)$$

O expoente crítico  $\gamma = 1$ , coincide com o expoente da suscetibilidade do caso ferromagnético. Também, podemos calcular a função de correlação de densidade, da mesma forma que calculamos a suscetibilidade não local no caso ferromagnético. Para isto temos que somar à densidade de energia  $w$ , um termo proporcional a  $|\vec{\nabla}\phi|^2$ . O resultado é,

$$S(q) = \frac{T}{r + cq^2} = n^2 \kappa_T \frac{T}{r + \xi q^2} \quad (2.59)$$

onde, como antes  $\xi = (c/r)^{1/2}$ . O expoente crítico que descreve a divergência do comprimento de correlação é  $\nu = 1/2$ , de forma idêntica ao caso ferromagnético.

Finalmente, para entender como cresce o parâmetro de ordem, temos que calcular a curva de coexistência, que no caso ferromagnético era simplesmente  $h = 0$ . Neste caso, a curva fica definida por

$$T_\ell = T_g \quad (2.60)$$

$$\mu_\ell = \mu_g \quad (2.61)$$

$$n_\ell = n_c + \phi_\ell \quad (2.62)$$

$$n_g = n_c + \phi_g \quad (2.63)$$

onde o subíndice  $\ell$  refere se à fase líquida e o subíndice  $g$  indica a fase gasosa. Os valores do parâmetro de ordem  $\phi_\ell$  e  $\phi_g$  são as soluções de

$$\frac{\partial w(\phi)}{\partial \phi} = r\phi - 3v\phi^2 + 4u\phi^3 - h = 0 \quad (2.64)$$

uma vez resolvida esta equação achamos facilmente a curva de coexistência nos planos  $p - T$  ou  $\mu - T$  resolvendo

$$p_\ell = -w(T, \mu, n_\ell) \quad (2.65)$$

$$p_g = -w(T, \mu, n_g) . \quad (2.66)$$

A estratégia para resolver (2.64) é a seguinte. Separamos a solução em duas partes,

$$\phi = \phi_0 + \Delta\phi \quad (2.67)$$

e escolhemos o valor de  $\phi_0$  de tal forma de eliminar as potências ímpares do funcional  $w(\phi)$ . Desta forma, a equação para  $\Delta\phi$  será muito mais simples, e terá duas soluções  $\pm\Delta\phi$ . De posse destas soluções as densidades ficarão,

$$n_g = n_c + \phi_0 - \Delta\phi \quad (2.68)$$

$$n_\ell = n_c + \phi_0 + \Delta\phi. \quad (2.69)$$

Vemos então que  $\Delta\phi = (n_\ell - n_g)/2$  é essencialmente o parâmetro de ordem.

Substituindo eq.(2.67) em (2.46) obtemos

$$w = -p_c - h(\phi_0)\Delta\phi + \frac{1}{2}r(\phi_0)(\Delta\phi)^2 - v(\phi_0)(\Delta\phi)^3 + u(\Delta\phi)^4, \quad (2.70)$$

onde os coeficientes são

$$h(\phi_0) = h - r\phi_0 + 3v\phi_0^2 - 4u\phi_0^3 \quad (2.71)$$

$$r(\phi_0) = r - 6v\phi_0 + 12u\phi_0^2 \quad (2.72)$$

$$v(\phi_0) = v - 4u\phi_0. \quad (2.73)$$

Se escolhermos  $\phi_0 = v/(4u) = g\Delta T/(4u)$  obtemos  $v(\phi_0) = 0$ . Com esta escolha eliminamos o termo cúbico do potencial  $w$ . Podemos agora escolher  $\Delta\mu$  de tal forma que  $h(\phi_0) = 0$ , com isto

$$h = \frac{ag}{4u}(\Delta T)^2. \quad (2.74)$$

Substituindo estes resultados em (2.70) obtemos finalmente

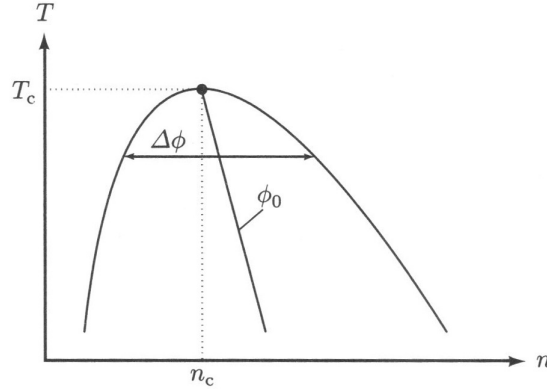
$$w = w(T, \mu, n_c) + \frac{1}{2}r(\phi_0)(\Delta\phi)^2 + u(\Delta\phi)^4 \quad (2.75)$$

Obtemos aqui, perto do ponto crítico, que a densidade de energia livre  $w$ , também chamada de “potencial misto” tem exatamente a mesma forma que a energia livre do ponto crítico ferromagnético. Observe que, embora o sistema liquido-vapor não seja simétrico ao trocar  $n_g \leftrightarrow n_\ell$ , perto do ponto crítico a eq. (2.75) é simétrica perante o grupo  $Z_2$ , já que não varia fazendo  $\Delta\phi \rightarrow -\Delta\phi$ . Este fato se conhece com o nome de *simetria emergente*. Ou seja, num sistema que não é simétrico, emerge uma simetria na proximidade do ponto crítico. O caso do ferromagnetismo é diferente, já que a simetria  $M \rightarrow -M$  se satisfaz em todo o diagrama de fases, não apenas na vizinhança do ponto crítico.

Em pose da eq. (2.75) é muito simples calcular o valor do parâmetro de ordem, obtendo

$$\Delta\phi = \pm \left( -\frac{a}{4u}\Delta T \right)^{1/2} + O((\Delta T)^{3/2}) \quad (2.76)$$

Vemos aqui que o expoente crítico  $\beta = 1/2$  que controla o crescimento do parâmetro de ordem é idêntico ao caso ferromagnético. Na figura (2.5) desenhamos o parâmetro de ordem em função da temperatura e densidade. Vemos que a curva não é simétrica

Figura 2.5:  $T_n$ 

em relação ao eixo  $n = n_c$ . Essa simetria é infinitesimal ao redor do ponto crítico. Na figura (2.6) mostramos dados experimentais para vários tipos de líquidos bem conhecidos. Observamos que todos eles ajustam perfeitamente à mesma dependência do parâmetro de ordem. Isto é uma mostra do fenômeno de “universalidade” que estudaremos mais adiante. Note porém que, o expoente crítico que melhor ajusta estes dados experimentais é  $\beta = 1/3$  e não  $\beta = 1/2$  como acabamos de calcular. Este desvio será estudado em detalhe no estudo das flutuações do parâmetro de ordem.

## 2.3 A transição Metal-Supercondutor

Muitos metais, quando esfriados suficientemente, apresentam a propriedade de poder conduzir carga elétrica sem resistência. Esta propriedade é chamada de supercondutividade. O comportamento típico da resistência em função da temperatura é mostrado na figura 2.7. Observamos que no comportamento metálico “normal”, a resistência é uma função crescente da temperatura, devido a que, conforme a temperatura aumenta, diferentes processos de espalhamento eletrônico contribuem para produzir dissipação de energia. Para temperaturas muito baixas, o único processo efetivo é o espalhamento por impurezas, dando lugar a uma resistência remanente que caracteriza a densidade de impurezas no material. Porém, em muitos materiais, existe uma temperatura crítica, na qual a resistência é descontínua, caindo a zero, para valores de  $T < T_c$ , como mostrado na figura.

Outra característica importante do estado supercondutor tem a ver com seu comportamento magnético. O material, na sua fase supercondutora  $T < T_c$  expulsa qualquer campo magnético do seu interior. Este efeito, chamado de efeito Meissner, é ilustrado esquematicamente na figura 2.8.

Existem dois comportamentos qualitativamente diferentes de materiais supercondutores. Na literatura são chamados de supercondutores Tipo I e Tipo II, cujos diagramas

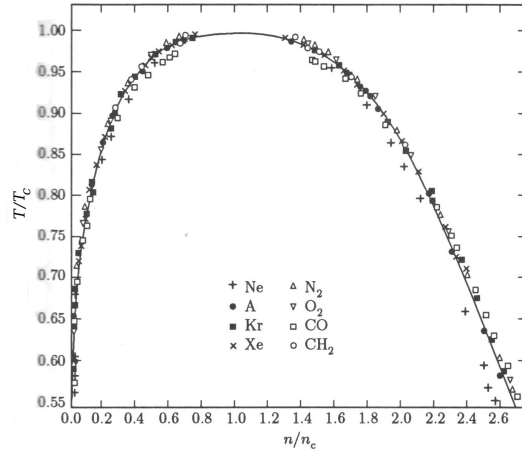


Figura 2.6: TnExp

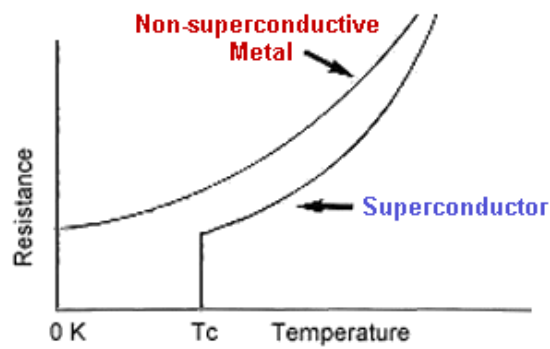


Figura 2.7: resistividade

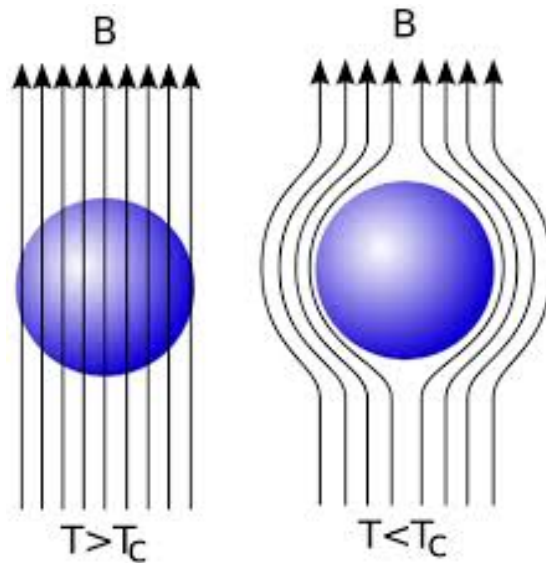


Figura 2.8: Efeito Meissner

de fases são mostrados na figura 2.9. No diagrama de fase do supercondutor do Tipo I, existe uma linha de primeira ordem no diagrama  $H - T$ , que separa as fases metálica e supercondutora. No interior da fase supercondutora,  $T < T_c$  e  $H < H_c$ , a resistência é zero e o campo magnético também é zero. Isto significa que o material responde ao campo magnético externo com uma magnetização que se opõe ao campo aplicado, de forma tal de cancelar seu efeito no interior do material. Desta forma, o material supercondutor é um diamagneto perfeito com suscetibilidade  $\chi = -1$ . Mostramos este comportamento na figura 2.10. Para temperaturas  $T < T_c$  existe um campo magnético crítico  $H_c$ , onde a magnetização é descontínua, separando a fase metálica da supercondutora. Já no supercondutores do Tipo II, a magnetização é contínua. A partir

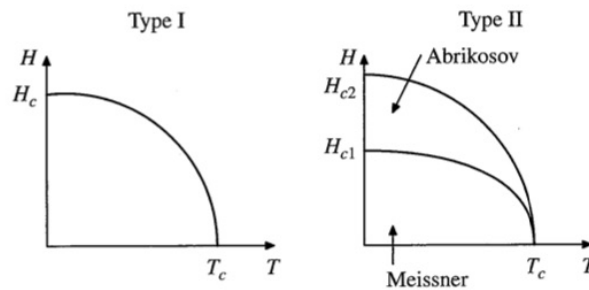


Figura 2.9: Diagrama de fases de um supercondutor

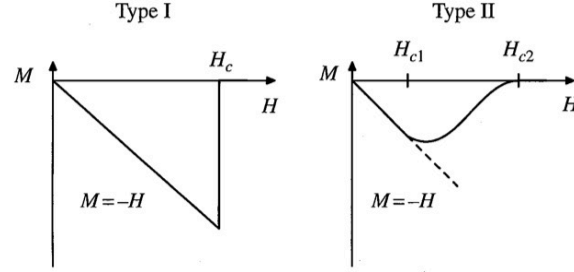


Figura 2.10: Magnetização num material supercondutor Tipo I e Tipo II

de um campo crítico  $H_{c1}$ , ela começa a decrescer de forma contínua, permitindo desta forma que o campo magnético possa penetrar à amostra. Nesse caso, entre a fase supercondutora, ou fase de Meissner, e a fase metálica para  $H > H_{c2}$ , existe outra fase intermediária  $H_{c1} < H < H_{c2}$ , chamada de fase de Abrikosov, onde o campo magnético atravessa o material em forma de vórtices.

Qualquer teoria, seja ela microscópica ou fenomenológica, deve conseguir descrever os diagramas de fases da figura 2.9 assim como o comportamento da magnetização mostrado na figura 2.10. No estado supercondutor é possível estabelecer uma corrente elétrica sem necessidade de aplicar um campo elétrico. Portanto a relação constitutiva (lei de Ohm)  $\vec{J} = \sigma \vec{E}$  deixa de ser válida, já que a condutividade  $\sigma \rightarrow \infty$  forçando consequentemente  $E \rightarrow 0$ . A primeira teoria para descrever o estado supercondutor é devida aos irmãos London em 1914, três anos depois da descoberta da supercondutividade. Segundo a proposta de London, a densidade de elétrons  $n = n_s + n_m$ , pode ser separada em uma densidade de elétrons  $n_s$  que contribui para a supercondutividade e outra  $n_m$  que não contribui. A relação constitutiva que London propôs, foi

$$\vec{J} = -\frac{n_s e^2}{m_e} \vec{A} \quad (2.77)$$

onde  $e$  é a carga,  $n_e$  é a densidade e  $m_e$  é a massa dos elétrons supercondutores. A equação (2.77) é uma das equações mais importantes que descrevem o estado supercondutor. Ela foi derivada anos mais tarde por Landau, e 20 anos depois for deduzida a partir de um modelo microscópico quântico por Bardeen, Cooper e Schrieffer, dando origem à teoria conhecida como BCS. Combinando a equação (2.77) com as equações de Maxwell, é simples chegar à equação para o campo magnético no estado supercondutor. A equação é conhecida como equação de London e é dada por

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = -\frac{1}{\lambda} \vec{B} \quad (2.78)$$

onde a constante

$$\lambda = \sqrt{\frac{m_e}{\mu_0 n_s e^2}} \quad (2.79)$$

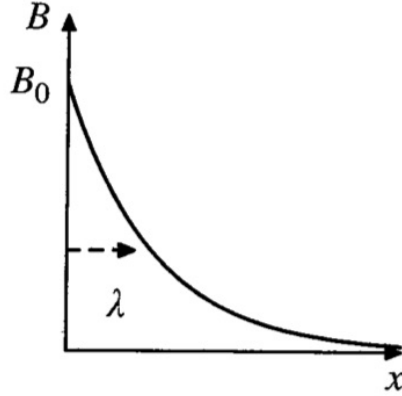


Figura 2.11: Campo magnético na interface de um supercondutor

onde  $\mu_0$  é a permeabilidade do vácuo.  $\lambda$  tem unidades de distância e é chamada de “comprimento de penetração”. Esta é uma das grandezas importantes num material supercondutor e é compeltamente caracterizada por quantidades microscópicas do material. É simples observar o significado físico de  $\lambda$ . Se resolvermos a equação (2.78) para a componente  $B_z$  do campo magnético, num sistema homogêneo infinito onde o sistema é metálico para  $x < 0$  e supercondutor para  $x > 0$ . É simples obter a solução

$$B_z = B_0 e^{-x/\lambda} \quad (2.80)$$

Onde  $B_0$  é o campo constante na fase metálica. A solução é mostrada na figura 2.11. Fica evidente que o campo magnético é exponencialmente suprimido no interior do supercondutor. Isto nada mais é o que efeito Meissner. Portanto, a relação de London dada pela equação (2.77) descreve de forma satisfatória este efeito. Vemos que o comprimento de penetração  $\lambda$ , é a distância à qual o campo magnético pode penetrar no supercondutor a partir de uma interface metal/supercondutor. A equação de London, Eq. (2.78) tem várias aplicações, em particular, ela possui uma solução tipo vórtice, necessária para a descrição dos supercondutores do Tipo II.

Embora a proposta de London fosse inovadora e explicava muitos dos efeitos observados em supercondutores, não ficava claro na época a interpretação da transição metal/supercondutor como uma verdadeira transição de fase. Esta visão foi desenvolvida em profundidade anos depois por Landau e Ginzburg. Para isto, uma observação importante é que a equação (2.77) de London quebra invariância de calibre. Isto é, se fizermos uma transformação  $\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\alpha$  para uma função  $\alpha(x)$  arbitrária, o valor do campo magnético  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  é invariante. Porém, segundo a relação constitutiva de London, a corrente que é um observável é proporcional ao potencial vetor  $\vec{A}$ . Portanto, ela depende do gauge escolhido. Na época, isto colocava em dúvida a proposta de

London. De fato, se considerarmos um campo estático, a conservação da corrente

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (2.81)$$

onde  $\rho$  é a densidade de carga e  $\vec{J}$  a corrente, implica que  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ . Essa relação é conhecida como o calibre de London e, aparentemente, apenas nesse calibre que a corrente de London é conservada.

Seguindo a linha de pensamento de uma teoria de Landau, gostaríamos descrever a transição de fase metal/supercondutor como uma quebra espontânea de simetria. A equação de London induz a pensar que o estado supercondutor quebra a simetria de calibre que, no caso do eletromagnetismo, a simetria é relacionada com o grupo unitário de um parâmetro, chamado na linguagem matemática de grupo  $U(1)$ . Portanto, o parâmetro de ordem supercondutor deveria ser uma representação irredutível do grupo  $U(1)$ . A representação mais simples desse grupo de simetria é uma função complexa  $\psi(x)$ , a qual transforma como  $\psi' = e^{i\alpha}\psi$  perante uma transformação do grupo. Seguindo a mesma linha de raciocínio, o estado simétrico  $\psi = 0$  representa a fase metálica ou desordenada, enquanto  $\psi \neq 0$  representa a fase supercondutora ou fase ordenada, ou ainda, a fase com simetria quebrada.

$$\psi = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \psi(T) \neq 0 & T < T_c \end{cases} \quad (2.82)$$

A energia livre de Landau deveria ser uma funcional  $F[\psi]$ , invariante perante transformações de fase da função  $\psi$ . Considerando que perto de transição de fase  $|\psi| \sim 0$ , podemos escrever a energia livre como

$$F = \int d^d x \left\{ \frac{\hbar}{2m^*} \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} \psi^* + a \psi(x) \psi^*(x) + \frac{b}{2} (\psi(x) \psi^*(x))^2 + \dots \right\} \quad (2.83)$$

onde  $a(T)$  e  $b(T)$  são parâmetros fenomenológicos dependentes da temperatura. A constante arbitrária  $\hbar/2m^*$  mede o custo energético para produzir deformações espaciais de  $\psi(x)$ . A forma particular desse coeficiente ficará clara mais adiante.

O estado do sistema fica determinado pelos mínimos da funcional  $F[\psi]$ ,

$$\frac{\delta F}{\delta \psi(x)} = 0 \quad , \quad \frac{\delta F}{\delta \psi^*(x)} = 0 \quad (2.84)$$

Calculando explicitamente as derivadas funcionais, obtemos a equação

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \nabla^2 \psi + (a + b|\psi|^2) \psi = 0 \quad (2.85)$$

e sua conjugada. Observamos que a estrutura dessa equação é similar a uma equação de Schrödinger (por esse motivo escolhimos a constante  $\hbar/2m^*$ ). Porém, é uma equação não linear, o que faz que a analogia com a mecânica quântica não seja completa. Por

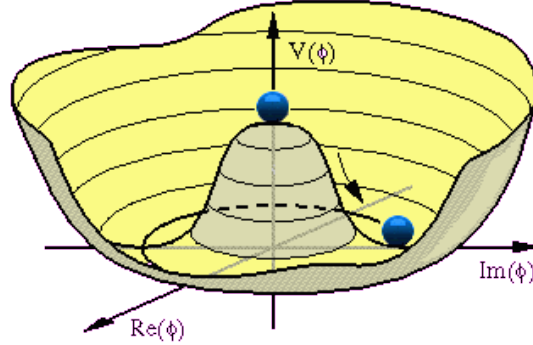


Figura 2.12: Potencial do parâmetro de ordem supercondutor

exemplo, o princípio da superposição não se cumpre nesse caso, e conseqüentemente a normalização da função de onda não pode ser implementada da mesma forma. Mesmo assim, devido a sua semelhança com a equação de Schrödinger, o parâmetro de ordem  $\psi(x)$  muitas vezes é chamado de *função de onda macroscópica*.

De forma similar ao caso do ferromagnetismo, é simples observar que diferentes soluções são obtidas dependendo do sinal de  $a(T)$ , e a transição de fase ocorre para  $a(T_c) = 0$ . Podemos escolher perto da transição

$$a(T) \approx \dot{a}(T - T_c) + \dots \quad (2.86)$$

$$b(T) \approx b + \dots \quad (2.87)$$

Obtemos desta forma a solução homogênea da equação (2.85),

$$|\psi_0| = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ \sqrt{\frac{\dot{a}}{b}} (T_c - T)^{1/2} & T < T_c \end{cases} \quad (2.88)$$

Observamos que esta solução é completamente equivalente à obtida no caso da magnetização de um ferromagneto uniaxial onde a dependência do parâmetro de ordem com a temperatura é caracterizada pelo expoente crítico  $\beta = 1/2$ . Porém, existe uma diferença importante. Como  $\psi$  é complexo, existem infinitos mínimos de  $F[\psi]$  dados por

$$\psi = e^{i\theta} |\psi_0| \quad (2.89)$$

onde  $\theta$  é uma fase constante arbitrária. Isto é consequência de que o grupo de simetria  $U(1)$  é um grupo contínuo enquanto que no caso do ferromagnetismo uniaxial, o grupo de simetria era discreto de dois elementos,  $Z_2$ . Concluímos então, que a transição de fase metal/supercondutor pode ser interpretada como uma quebra espontânea de simetria de calibre global. Na figura 2.12 representamos esquematicamente este processo.

É instrutivo resolver a equação (2.85) num caso não-homogêneo. Podemos considerar, por exemplo, o caso de uma interface metal/supercondutor no plano  $x = 0$ , sendo

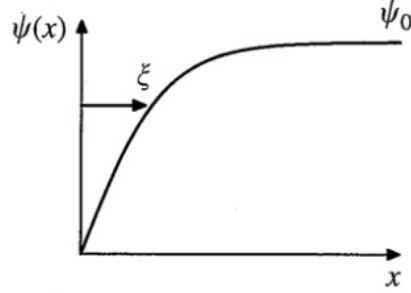


Figura 2.13: Parâmetro de ordem supercondutor perto de uma interface metal/supercondutor

que para  $x < 0$ , o sistema é metálico e para  $x > 0$  o sistema é supercondutor. Nesse caso, a equação (2.85) é essencialmente unidimensional,

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + a\psi(x) + b\psi^3(x) = 0 \quad (2.90)$$

para  $x > 0$  com a condição de borda  $\psi(0) = 0$ . Podemos resolver essa equação, achando a solução,

$$\psi(x) = \psi_0 \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi(T)}\right) \quad (2.91)$$

onde  $\psi_0$  é a solução homogênea e

$$\xi(T) = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*a|T - T_c|}\right)^{1/2} \quad (2.92)$$

Mostramos a solução na figura 2.13. O parâmetro  $\xi(T)$  tem unidades de comprimento e é chamado de comprimento de coerência de Ginzburg-Landau. Ele representa a distância medida desde a borda em que o parâmetro de ordem atinge aproximadamente seu valor normal no interior do material. Fazendo uma analogia com o caso do ferromagneto, vemos que  $\xi(T)$  dada pela equação (2.92) é completamente equivalente ao comprimento de correlação dado pela equação (2.24), caracterizado pelo expoente crítico  $\nu = 1/2$ . Percebemos que na transição de fase, o comprimento de coerência diverge. Tanto o comprimento de coerência  $\xi(T)$  como o comprimento de penetração  $\lambda(T)$  são dois parâmetros fundamentais nos supercondutores.

Como descrevemos no começo da seção, qualquer teoria da supercondutividade deve ser capaz de descrever o efeito Meissner. Para isto é necessário incorporar na teoria o efeito de um campo magnético. Podemos considerar que, dado que o parâmetro de ordem é uma função complexa, ela acopla de forma mínima com o potencial vetor  $\vec{A}$ . Desta forma podemos substituir

$$i\vec{\nabla} \rightarrow i\vec{\nabla} + q\vec{A} \quad (2.93)$$

onde  $q$  é a carga elétrica e o potencial vetor  $\vec{A}$ , satisfaz  $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$ , com  $\vec{B}$  o campo magnético. A carga elétrica  $q$  em princípio é arbitrária, porém, em todos os supercondutores conhecidos, ela é  $q = 2e$  onde  $e$  é a carga do elétron. A teoria de Landau-Ginzburg na presença de um campo magnético toma a forma,

$$F = \int d^d x \left\{ \frac{\hbar}{2m^*} |(\vec{\nabla} + i2e\vec{A})\psi|^2 + a \psi(x)\psi^*(x) + \frac{b}{2} (\psi(x)\psi^*(x))^2 \right\} + \frac{1}{2\mu_0} \int d^d x |\vec{B}|^2 \quad (2.94)$$

Enquanto que a primeira linha dessa equação descreve a interação do parâmetro de ordem com o campo magnético, a segunda linha representa a energia do campo magnético. O estado do sistema fica agora determinado pelos mínimos de  $F[\psi, \vec{A}]$ ,

$$\frac{\delta F}{\delta \psi(x)} = 0 \quad , \quad \frac{\delta F}{\delta \psi^*(x)} = 0 \quad , \quad \frac{\delta F}{\delta \vec{A}(x)} = 0 \quad (2.95)$$

Calculando explicitamente as derivadas funcionais encontramos as equações que descrevem o estado do sistema,

$$-\frac{\hbar}{2m^*} \left( \vec{\nabla} + \frac{2ei}{\hbar} \vec{A} \right)^2 \psi + (a + b|\psi|^2) \psi = 0 \quad (2.96)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \vec{J} \quad (2.97)$$

onde a corrente vem dada por

$$\vec{J} = -\frac{2e\hbar i}{2m^*} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) - \frac{(2e)^2}{m^*} |\psi|^2 \vec{A} \quad (2.98)$$

## Invariância de calibre local

A energia livre  $F[\psi, \vec{A}]$  dada pela equação (2.94) ou as equações de movimento (2.96) e (2.97), possuem uma simetria local. Isto é, se transformarmos o potencial vetor

$$\vec{A}'(x) = \vec{A}(x) + \frac{\hbar}{2e} \vec{\nabla} \alpha(x) \quad (2.99)$$

onde  $\alpha(x)$  é uma função arbitrária. E juntamente com essa transformação mudamos a fase do parâmetro de ordem  $\theta(x)$  como

$$\theta'(x) = \theta(x) + \alpha(x) \quad (2.100)$$

a energia livre é invariante  $F[\psi'(x), \vec{A}'(x)] = F[\psi(x), \vec{A}(x)]$ . Não apenas a energia livre, mas qualquer observável como o campo magnético  $\vec{B}$  ou a corrente  $\vec{J}$  também será invariante. Isto se conhece como simetria de calibre local, já que a fase do parâmetro de ordem pode ser mudada em cada ponto do espaço de forma independente.

Por outro lado, sabemos que o estado fundamental no estado supercondutor tem um parâmetro de ordem constante. Então, a phase  $\theta(x) = cte$ . Deveria existir então uma "rigidez de fase", no sentido que deve ser necessário uma energia positiva para produzir pequenas flutuações locais de fase. Para ver isso, podemos escrever a energia  $F[\psi, \vec{A}]$ , no interior da fase supercondutora, onde  $|\psi| = constante$ . Da equação (2.94) obtemos

$$F = F_s + \rho_s \int d^d x \left( \vec{\nabla} \theta + \frac{2e}{\hbar} \vec{A} \right)^2 \quad (2.101)$$

onde a *rigidez de fase*

$$\rho_s = \frac{\hbar^2}{2m^*} |\psi_0|^2 \quad (2.102)$$

Se fixarmos o calibre, por exemplo escolhermos o calibre de London,  $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ , então existe um custo de energia para deformar a fase dado essencialmente pelo parâmetro  $\rho_s$ , equação (2.102) A equação (2.101), implica que a corrente pode ser escrita como

$$\vec{J} = \frac{\delta F}{\delta \vec{A}} = \frac{2e}{\hbar} \rho_s \left( \vec{\nabla} \theta + \frac{2e}{\hbar} \vec{A} \right) \quad (2.103)$$

Se calculamos a corrente no estado supercondutor onde  $\theta(x)$  é constante obtemos

$$\vec{J} = \frac{(2e)^2}{\hbar^2} \vec{A} \quad (2.104)$$

que é exatamente a proposta original de London, na qual a corrente deveria ser proporcional ao potencial vetor. Comparando as equações (2.104) com (2.77), podemos interpretar  $n_s = 2|\psi|^2$ , e  $m^* = 2m_e$ . Desta forma, o parâmetro de ordem  $|\psi|^2$  representa a densidade de partículas com carga  $2e$  e massa  $2m_e$ . Estes pares de elétrons são os chamados pares de Cooper no contexto da teoria BCS desenvolvida muitos anos depois da teoria de Landau.

## Vórtices e os supercondutores Tipo I e II

As equações (2.96) e (2.97) podem ser resolvidas numa interface metal/supercondutor. Representamos a solução na figura 2.14 O Parâmetro de ordem, começa em zero na interface e alcança seu valor constante no interior do supercondutor. A distância típica que isto ocorre é dado pelo comprimento de coerência  $\xi(T)$ . Por outro lado, onde o parâmetro de ordem supercondutor é zero, o campo magnético atinge um máximo, já que pode atravessar a amostra, sendo suprimido no interior do supercondutor. Isto acontece numa distância típica dada pelo comprimento de penetração  $\lambda(T)$ . É interessante notar que tanto  $\xi(T)$  como  $\lambda(T)$ , divergem na temperatura crítica com o mesmo expoente crítico. Portanto, perto de  $T_c$ , podemos definir a constante adimensional

$$\kappa = \frac{\lambda(T)}{\xi(T)} \quad (2.105)$$

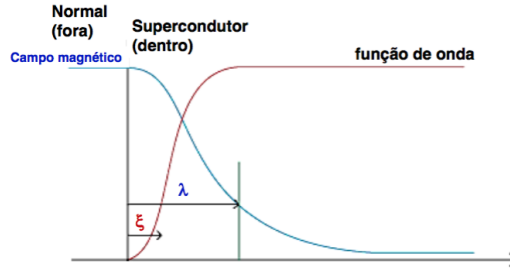


Figura 2.14: Parâmetro de ordem supercondutor perto de uma interface metal/supercondutor

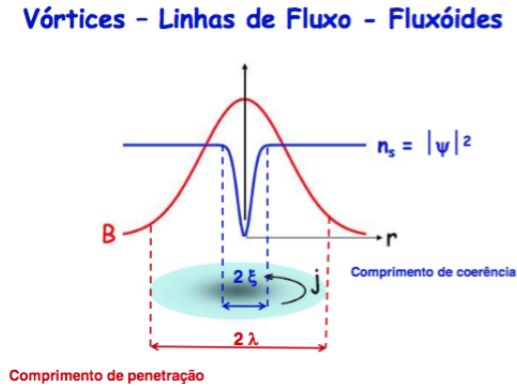


Figura 2.15: Solução de vórtice num supercondutor

chamada de constante de Abrikosov. Esta constante que depende das propriedades microscópicas do material é que vai determinar se o diagrama de fases é do Tipo I e II.

Uma observação importante é que na presença de campos magnéticos, as equações (2.96) e (2.97) tem soluções tipo vórtices. Isto significa que existem regiões do espaço onde o parâmetro de ordem é zero, a através desse núcleo o campo magnético pode penetrar a amostra. Uma solução típica com simetria cilíndrica é mostrada na figura 2.15. É possível mostrar que esse tipo de solução existe se  $\kappa > 1/\sqrt{2}$ . Ou seja que,

$$\kappa \begin{cases} < \frac{1}{\sqrt{2}} & \text{Supercondutor do Tipo I} \\ > \frac{1}{\sqrt{2}} & \text{Supercondutor do Tipo II} \end{cases} \quad (2.106)$$

O caso com  $\kappa = 1/\sqrt{2}$ , embora não seja realista no sentido experimental, é extremamente interessante porque nesse limite as equações tem solução exata devido a que o

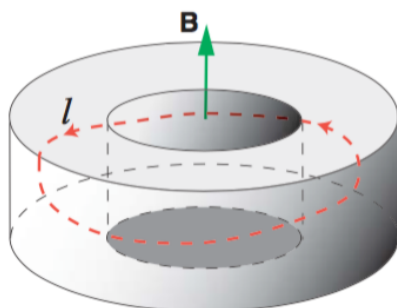


Figura 2.16: Solução de vórtice num supercondutor

sistema originalmente de segunda ordem nas derivadas fica reduzido a um sistema de primeira ordem. Este limite é conhecido como limite de Bogomol'nyi.

### Quantização do fluxo magnético

Uma consequência extremamente interessante da simetria local de calibre é a quantização do fluxo magnético que atravessa o material supercondutor a través de um vórtice. Uma forma simples de ver isso é considerar um anel supercondutor com simetria cilíndrica como mostra a figura 2.16. Considerando um caminho de integração  $C$  ao redor do anel, no limite profundo dentro do supercondutor, o campo magnético é zero devido ao efeito Meissner. Portanto  $\oint_C d\vec{\ell} \cdot \vec{J} = \oint_C d\vec{\ell} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{B} = 0$ . Usando a expressão da corrente dada pela equação (2.103), temos que

$$\frac{2e}{\hbar} \oint_C d\vec{\ell} \cdot \vec{A} = \frac{2e}{\hbar} \int_S d\vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{2e}{\hbar} \Phi = - \oint_C d\vec{\ell} \cdot \vec{\nabla} \theta \quad (2.107)$$

Como o parâmetro de ordem deve ser univalente, a última integral é um múltiplo inteiro de  $2\pi$ . Portanto

$$\Phi = n \left( \frac{h}{2e} \right) \quad (2.108)$$

onde  $n$  é um número inteiro. Portanto, a corrente supercondutora se ajusta de tal forma que o campo magnético só pode atravessar a amostra em um número inteiro de quantos de fluxo magnético  $\Phi_0 = h/2e$ .

## 2.4 A transição isotrópica/nemática

Os cristais líquidos são materiais formados por moléculas alongadas na forma de “barras”. Na fase líquida isotrópica elas estão desordenadas, ou seja, com posição e orientação aleatórias. Quando a temperatura é abaixada pode ocorrer uma tendência

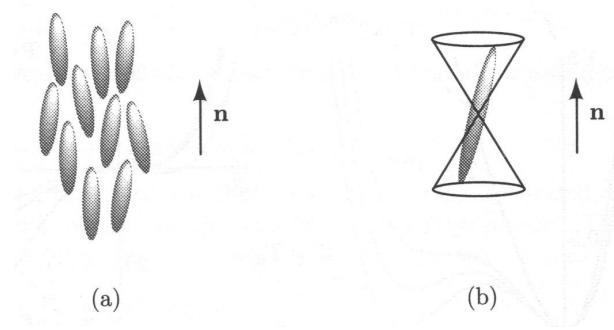


Figura 2.17: molecules

das moléculas a se alinharem. Ou seja, sua posição continua aleatória, porém sua orientação, em média, tende a se alinhar com algum eixo (figura (2.17)). Esta fase é chamada de fase nemática. A fase nemática é caracterizada pela quebra espontânea da simetria de rotação, mas ainda preserva simetria de translação. Para sua descrição, poderíamos escolher como parâmetro de ordem um vetor unitário  $\hat{\nu}$  colocado ao longo do eixo maior de cada molécula  $\alpha$  na posição  $\vec{x}_\alpha$ . Porém, esta escolha não tem as simetrias adequadas do problema. Cada molécula não tem centro de inversão, ou se tivesse, por exemplo se a molécula estiver polarizada, a direção  $\hat{\nu}$  é igualmente provável que a direção  $-\hat{\nu}$ . Dito de outra forma, a fase nemática quebra a simetria de rotação escolhendo uma orientação particular no espaço mas não o sentido. Por este motivo, o parâmetro de ordem deve ser pelo menos quadrático em  $\hat{\nu}$ . Já que um vetor não é suficiente para representar esta simetria podemos tentar com um tensor de segunda ordem proporcional a  $\nu_i^\alpha \nu_j^\alpha$  onde  $i, j = 1, 2, 3$  indicam as coordenadas cartesianas do espaço e  $\alpha$  identifica cada molécula. Por outro lado, para temperaturas altas, onde cada molécula é orientada aleatoriamente, esperamos que parâmetro de ordem seja zero. Então, podemos construir o parâmetro de ordem a partir do tensor simétrico de traço nulo

$$Q_{ij}^\alpha = \nu_i^\alpha \nu_j^\alpha - \frac{1}{3} \delta_{ij}. \quad (2.109)$$

Na fase desordenada,  $\langle \nu_i^\alpha \rangle = 0$ , já que na media a molécula aponta em qualquer direção, e  $\langle (\nu_i^\alpha)^2 \rangle = 1/3$ , já que em média cada uma das três direções é igualmente provável. Isto garante que na fase desordenada o parâmetro de ordem formado pela soma sobre todas as moléculas  $\langle \sum_\alpha Q_{ij}^\alpha \rangle = 0$ . Portanto, vamos considerar como parâmetro de ordem da transição isotrópica nemática

$$Q_{ij}(x) = \left( \frac{N}{V} \right) \sum_\alpha \left( \nu_i^\alpha \nu_j^\alpha - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \delta(\vec{x} - \vec{x}_\alpha) \quad (2.110)$$

O coeficiente  $N/V$  é introduzido para definir o parâmetro de ordem adimensional. Chamamos então de  $\hat{Q}$ , o tensor cujas componentes são  $Q_{ij}$ . A temperatura alta,

$\langle \hat{Q} \rangle = 0$  e a temperaturas baixas  $\langle \hat{Q} \rangle \neq 0$  indicando a fase ordenada. Nesta fase, podemos diagonalizar o tensor já que ele é simétrico escolhendo os eixos ao longo dos eixos principais da molécula. Obtemos desta forma

$$\langle \hat{Q} \rangle = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}S & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3}S + \eta & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}S - \eta \end{pmatrix} \quad (2.111)$$

Se  $\eta \neq 0$ , a fase é biaxial, enquanto que se  $\eta = 0$  a fase se chama nemática uniaxial. Neste último caso, o parâmetro de ordem pode ser escrito como

$$\langle Q_{ij} \rangle = S \left( n_i n_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \right) \quad (2.112)$$

onde  $n_i$  são as componentes do vetor unitário  $\hat{n}$  chamado de diretor de Frank, ou simplesmente diretor. Da simetria da eq. 2.112 vemos que, da mesma forma que um parâmetro vetorial tem a mesma estrutura que um momento dipolar, a estrutura do parâmetro de ordem  $\hat{Q}$  é a mesma que a de um momento quadripolar.

Podemos agora construir a teoria de Landau para a transição de fase nemática-isotrópica. Supomos como sempre que, perto da transição o parâmetro de ordem é pequeno. Então, expandimos a energia livre em potências do parâmetro de ordem de tal forma que cada termo seja invariante perante o grupo de simetrias que, neste caso, é o grupo de rotações em três dimensões  $O(3)$ . O parâmetro de ordem se comporta como um tensor de segunda ordem perante rotações. Portanto, podemos construir invariantes utilizando o traço de produtos destes tensores,  $\text{Tr}\langle \hat{Q}^p \rangle$  com  $p$  um número inteiro. Devido à construção do tensor,  $\text{Tr}\langle \hat{Q} \rangle = 0$ , portanto a expansão começa com o termo quadrático.

$$f(T, \langle \hat{Q} \rangle) = f(T) + \frac{1}{2}r \left( \frac{3}{2} \text{Tr}\langle \hat{Q}^2 \rangle \right) - w \left( \frac{9}{2} \text{Tr}\langle \hat{Q}^3 \rangle \right) + u \left( \frac{3}{2} \text{Tr}\langle \hat{Q}^2 \rangle \right)^2 \quad (2.113)$$

Em geral, teríamos dois termos quárticos diferentes  $\left( \text{Tr}\langle \hat{Q}^2 \rangle \right)^2$  e  $\text{Tr}\langle \hat{Q}^4 \rangle$  porém, no caso de uma matriz simétrica de traço zero, estes dois termos são proporcionais. Substituindo a expressão (2.112) na equação (2.113) e calculando os traços obtemos

$$f(T, S) = f(T) + \frac{1}{2}rS^2 - wS^3 + uS^4 \quad (2.114)$$

Como nos casos anteriores escolhemos  $r = a(T - T^*)$  e  $w$  e  $u$  constantes positivas. Na figura (2.18) mostramos a forma da energia livre (2.114) para diferentes valores da temperatura.

A diferença essencial entre a energia livre da equação (2.114) e a energia livre de um ferromagneto é o termo cúbico  $= wS^3$ . Este termo é uma consequência direta do caráter tensorial do parâmetro de ordem. Observe que, se o parâmetro de ordem fosse

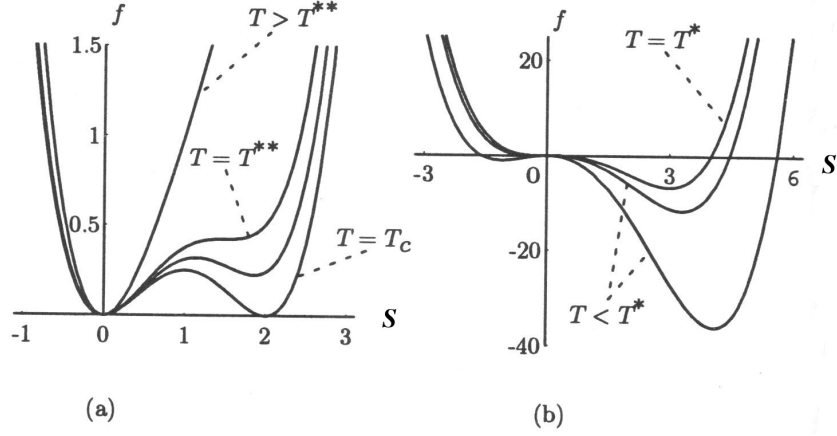


Figura 2.18: Fq

vetorial, não poderia existir um termo cúbico já que quebraria a simetria de rotação. Porém, com uma estrutura tensorial em três dimensões é possível a existência deste termo mantendo todas as simetrias do problema. A presença do termo cúbico leva a uma assimetria da energia livre e a presença de um novo mínimo local como mostra a figura (2.18). A energia livre neste novo mínimo é positiva a temperaturas altas, mas diminui ao baixar a temperatura e alcança o valor zero na temperatura crítica  $T = T_c$  que é maior que a temperatura  $T^*$  onde o mínimo  $S = 0$  muda o sinal da curvatura. Como  $f < 0$  para  $T < T_c$ , existe uma transição de fase com uma descontinuidade em  $S$  na temperatura  $T = T_c$ , portanto é uma transição de primeira ordem. A temperatura  $T^*$  é o limite de metaestabilidade da fase isotrópica  $S = 0$ , já que para  $T^* < T < T_c$  a origem ainda é um mínimo embora não seja o mínimo absoluto. O limite de metaestabilidade da fase nemática é indicado na figura como a temperatura  $T = T^{**}$ . Esta temperatura é o limite para o qual  $S \neq 0$  deixa de ser um mínimo quando o líquido nemático é aquecido.

A temperatura de transição  $T = T_c$  é o valor de  $S$  no mínimo nemático  $S_c$  é calculado exigindo que  $f$  tenha um extremo nessa temperatura e que  $f(S_c) = f(0) = 0$ . Ou seja que, na temperatura crítica  $T_c$  a fase isotrópica  $S = 0$  e a fase nemática  $S = S_c$  podem coexistir. Temos então

$$\frac{\partial f}{\partial S} = (r - 3wS + 4wS^2) S = 0 \quad (2.115)$$

$$f = \left(\frac{1}{2}r - wS + uS^2\right) S^2 = 0 \quad (2.116)$$

Resolvendo para  $S$  e  $r$  obtemos

$$S_c = \frac{w}{2u} \quad r_c = a(T_c - T^*) = \frac{w^2}{2u} \quad (2.117)$$

Como em qualquer transição de fase de primeira ordem deve existir um calor latente para passar da fase ordenada à desordenada na temperatura crítica. Este calor latente é completamente equivalente com mais popular calor latente de fusão do gelo que é o calor necessário entregar a uma certa quantidade de gelo para que ela vire água mantendo a temperatura  $T = 0$ . Neste caso, é possível ver isto do fato que na fase nemática (ordenada) a variação de entropia é negativa. Ou seja, na fase ordenada a entropia é menor que a fase desordenada. A forma de ver isto no presente exemplo é expandindo a energia livre  $f$  em potências de  $r - r_c$  na fase nemática com  $S = S_c$ . Obtemos

$$\Delta f = f(T, S_c) - f(T, 0) = \frac{1}{2} (r - r_c) S_c^2 = \frac{1}{2} (r - r_c) \left( \frac{w}{2u} \right)^2 \quad (2.118)$$

A diferença de entropia pode ser calculada como

$$\Delta s = -\frac{\partial \Delta f}{\partial T} = -\frac{1}{2} a S_c^2 = -\frac{1}{2} a \left( \frac{w}{2u} \right)^2 \quad (2.119)$$

O calor latente absorvido para ir da fase nemática à isotrópica é portanto

$$q = -T_c s = \frac{1}{2} a T_c \left( \frac{w}{2u} \right)^2 \quad (2.120)$$

Geralmente, os líquidos nematicos são diamagnéticos anisotrópicos. Podemos então acoplar o parâmetro de ordem nemático com um campo magnético da seguinte forma

$$H_{\text{int}} = - \int dx^d \chi_a Q_{ij} H_i H_j \quad (2.121)$$

onde  $\chi_a$  é a diferença da suscetibilidade magnética de uma molécula entre as direções correspondentes a seu eixo maior e seu perpendicular. Se escolhermos  $\vec{H}$  na direção de  $\hat{n}$ , a interação fica simplificada

$$H_{\text{int}} = -\frac{3}{2} \int dx^d \chi_a H^2 S \quad (2.122)$$

Portanto o campo  $h = (3/2)\chi_a H^2$  é o campo conjugado do parâmetro de ordem  $S$ . Podemos então definir a suscetibilidade associada com  $S$  como

$$\chi = \frac{\partial S}{\partial h} = \frac{1}{r - 6wS + 12uS^2} \quad (2.123)$$

Vemos que a suscetibilidade diverge na fase isotrópica para  $T = T^*$ . Mas essa divergência não acontece porque a transição de fase acontece antes, ou seja para  $T = T_c > T^*$ . De qualquer forma, vemos que a condição  $\chi^{-1} = 0$  nos fornece a temperatura  $T^*$  que é o limite de metaestabilidade da fase isotrópica. Da mesma forma podemos calcular o limite de metaestabilidade da fase nemática  $T^{**}$  simplesmente exigindo  $\chi^{-1}(S_c) = 0$ , obtendo desta forma

$$r^{**} = a(T^{**} - T^*) = \frac{9w^2}{16u} \quad (2.124)$$

Uma característica comum a qualquer transição de primeira ordem é o fenômeno de histerésis quando realizamos a transição em ciclos, e o fenômeno também relacionado de superaquecimento e superresfriamento. Isto pode ser observado a partir da figura 2.18. Quando resfriamos o sistema a partir da fase isotrópica, a transição deveria ocorrer termodinamicamente à temperatura  $T_c$ . Porém, entre a temperatura  $T_c$  e  $T^*$ , o estado isotrópico continua sendo um mínimo. Isso significa que ele é estável perante pequenas flutuações. So na temperatura  $T^*$  é que ele vira instável. Portanto, a transição real ocorrerá a uma certa temperatura  $T^* < T < T_c$ , dependendo das condições do experimento. O fenômeno de superresfriamento é associado com esta observação. Imagine que resfriamos o sistema a partir de temperatura alta até uma temperatura  $T^* < T < T_c$  de forma “rápida”. Se o experimento for feito com muito cuidado podemos diminuir suficientemente as flutuações. Então, embora o mínimo global seja a fase ordenada  $S = S_c$ , o sistema ficara “preso” na fase desordenada  $S = 0$  que é um mínimo metaestável. Se diz que o sistema está em um estado super-resfriado. Ou seja, ele se encontra na fase desordenada, mas a uma temperatura abaixo da crítica. Nestas circunstâncias, qualquer flutuação que consiga superar a barreira de potencial pode iniciar a transição de fase. Este processo se realiza usualmente pelo mecanismo de nucleação. As características gerais deste comportamento são bem conhecidas pelos bebedores de cerveja no Rio de Janeiro. O garçom tira a cerveja do freezer pegando-la levemente da parte superior e coloca na mesa. Ela esta bem gelada, mas em estado líquido para se consumida. Na hora que o bebedor pega a garrafa com a mão, a cerveja congela quase imediatamente, deixando-la imprópria para seu consumo. Como nem todo bebedor é físico se estabelece o seguinte paradoxo. Como é possível que a cerveja congele quando ela é "aquecida" ao pega-la com a mão!!! Este paradoxo não é tal, e é explicado perfeitamente pelo fenômeno de super-resfriamento. No freezer a cerveja é resfriada muito rapidamente abaixo da sua temperatura de fusão. Porém, como a transição de fase é de primeira ordem, se não existirem flutuações suficientes ela ficara presa no estado líquido mas a temperatura menor que a temperatura de fusão termodinâmica. Ou seja, está em um estado super-resfriado. Na hora em que pegarmos a garrafa com a mão, o calor transmitido ao líquido produz a flutuação suficiente para atravessar a barreira de potencial na energia livre e se produz a transição de fase quase imediatamente.

O mesmo comportamento acontece se começarmos o experimento na fase ordenada de baixas temperaturas e aquecemos o líquido. Termodinamicamente a transição deveria ocorrer em  $T = T_c$  quando as duas fases tem a mesma energia livre. Porém, para temperaturas  $T_c < T < T^{**}$  a fase ordenada continua sendo um mínimo, mesmo que não seja o mínimo global. Então, se o experimento for feito de forma de controlar as flutuações, o sistema permanecera preso na fase ordenada a temperatura maior do que a crítica. Este estado é chamado de super-aquecido. Existe um experimento caseiro muito simples para observar este estado, porém, pouco recomendável pelo perigo que representa. Imagine colocarmos um copo com água num aparelho de microondas, mas sem o prato giratório. Ou seja, o experimento deve ser feito evitando ao máximo qualquer tipo de flutuação. Depois aquecemos a água na máxima potência durante algum

tempo. Se a potência for suficiente e as flutuações forem controladas ocorrerá que a temperatura da água será maior do que  $T = 100^{\circ}\text{C}$ , porém ela ficará em estado líquido, ou seja super-aquecida num estado metaestável. Qualquer flutuação produzirá a transição de fase de líquido a gás. O perigo consiste em que, esta transição de fase aumenta o volume em vários ordens de grandeza a uma velocidade muito grande. Ou seja, se abrirmos a porta do micro-ondas, a vibração poderá induzir flutuações que produzirão uma explosão do copo !!! Este fenômeno de super-aquecimento já ocasionou alguns acidentes na utilização do aparelho de microondas, por este motivo não é recomendado tentar fazer a experiência em casa.

Podemos concluir que a teoria de Landau prediz tanto transições de fase de primeira ordem quando de segunda ordem. Porém, temos que ter cuidado sobre os limites desta afirmação. Podemos dizer que, na presença de termos cúbicos, é provável que tenhamos uma transição de fase de primeira ordem. A certeza absoluta é difícil de afirmar, já que a expansão de Landau apenas é válida quando o parâmetro de ordem é pequeno. Em uma transição de segunda ordem isto sempre ocorre, já que o parâmetro de ordem é zero na fase desordenada e ele cresce continuamente. Em uma transição de primeira ordem isto não é verdade já que o parâmetro de ordem muda de forma descontínua. Podemos observar que tanto o parâmetro de ordem, quanto o calor latente é proporcional ao coeficiente do termo cúbico  $w$ . Portanto, podemos afirmar que quando  $w/u \ll 1$ ,  $S_c \ll 1$ . Neste caso dizemos que a transição de primeira ordem é fraca, ou seja que ela fica muito perto de uma de segunda ordem. Dito de outra forma, a descontinuidade do parâmetro de ordem é pequena. Nestes casos a teoria de Landau pode ser aplicada sem problemas. As vezes acontece também que a descontinuidade é tão pequena que não pode ser observada experimentalmente, o que pode levar a interpretar os resultados como uma transição de segunda ordem.

## Nucleação

Um dos mecanismos para a realização de uma transição de fase de primeira ordem é a nucleação de bolhas da fase ordenada, de mínima energia. Como vimos anteriormente, a transição de fase se dá de forma não homogênea tendo flutuações locais no volume na energia livre. Este mecanismo também pode ser entendido a partir da teoria de Landau. Consideremos por exemplo a energia livre no caso da transição isotrópica nemática,

$$F(T, S) - F(T) = \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} |\vec{\nabla} S|^2 + \frac{1}{2} r S^2 - w S^3 + u S^4 \right\} \quad (2.125)$$

Consideremos o sistema a uma temperatura  $T^* < T < T_c$ . Se esta temperatura foi alcançada a partir de altas temperaturas fazendo um resfriamento rápido, (*quench*), podemos supor que o sistema se encontra em na fase desordenada  $S = 0$ , embora ela seja metaestável. Qualquer flutuação vai tender a diminuir a energia tentando produzir a transição de fase. Esperamos então que uma flutuação produza um domínio cujo interior esteja na fase nemática  $S \neq 0$ , com energia mais baixa que fora dessa região

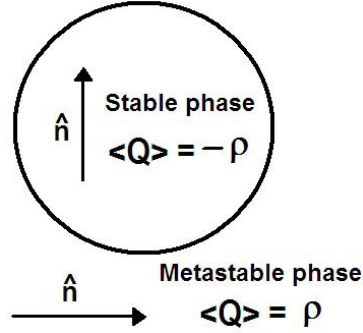


Figura 2.19: nuc

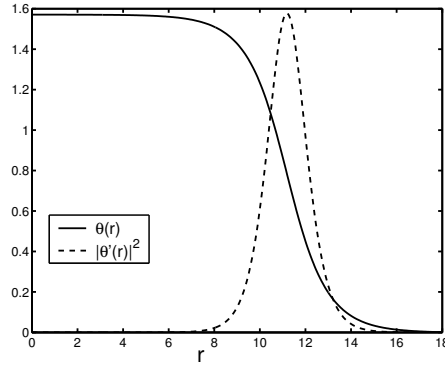


Figura 2.20: bubble.eps

como mostra a figura (2.19). Este domínio é chamado de bolha do estado fundamental no estado metaestável. Vemos que este tipo de configuração pode ser um extremo da energia livre. Se usarmos a eq. (2.125) a equação que extremiza a energia livre  $\delta F = 0$ , pode ser escrita como

$$-\nabla^2 S + \frac{\partial f(S, T)}{\partial S} = 0 \quad (2.126)$$

É claro que as soluções homogêneas  $S = 0$  e  $S \neq 0$  satisfazem esta equação. Porém, existe outra solução não-homogênea que interpola entre estas duas soluções e é a chamada bolha crítica. Se supormos a solução de mínima energia como a mais simétrica, podemos propor uma solução com simetria esférica. Neste caso, a bolha crítica  $S_b(r)$  satisfaz,

$$-\frac{d^2 S_b}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{dS_b}{dr} + rS_b - wS_b^2 + uS_b^3 = 0 \quad (2.127)$$

com a condição de contorno  $\lim_{r \rightarrow \infty} S_b(r) = 0$ . Esta solução, mostrada na figura (2.20) mostra que o parâmetro de ordem tende assintoticamente a seu valor metaestável

( $S = 0$ ) quando  $r \rightarrow \infty$ . Por outro lado, ela cresce até um valor aproximado  $S = S_c$  ao redor de um certo raio  $r = R$ , definido como o raio da bolha. O modulo da derivada desta função, mostrada na figura em linha pontilhada, fornece uma ideia do tamanho da parede da bolha,  $\lambda$ . Tendo esta solução em mãos podemos calcular a energia livre necessária para produzir essa flutuação simplesmente introduzindo a solução da eq. (2.127) na energia livre eq. (2.125),

$$F_b(R) = \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} |\vec{\nabla} S_b(r, R)|^2 + \frac{1}{2} r S_b^2(r, R) - w S_b^3(r, R) + u S_b^4(r, R) \right\} \quad (2.128)$$

Onde fizemos explicito a dependência da energia livre com o raio da bolha  $R$ . Podemos considerar este raio como um parâmetro variacional e calcular como varia a energia para gerar uma bolha de raio arbitrário. Se a largura da parede for muito menor que o raio  $\lambda/R \ll 1$  a energia livre terá essencialmente dois termos, um proporcional ao volume contido na bolha e outro proporcional a sua superfície. A energia pode ser escrita então como,

$$F_b(R) = -\frac{4\pi}{3} \Delta \mathcal{F} R^3 + 4\pi \sigma R^2 + \dots \quad (2.129)$$

onde a energia por unidade de volume  $\Delta \mathcal{F} = |f(0, T) - f(S_c, T)|$ .  $\sigma$  é a tensão superficial da bolha e os pontos indicam termos superiores na aproximação de parede fina  $\lambda/R \ll 1$ . A energia da bolha em função do raio é mostrada na figura (2.21) Vemos

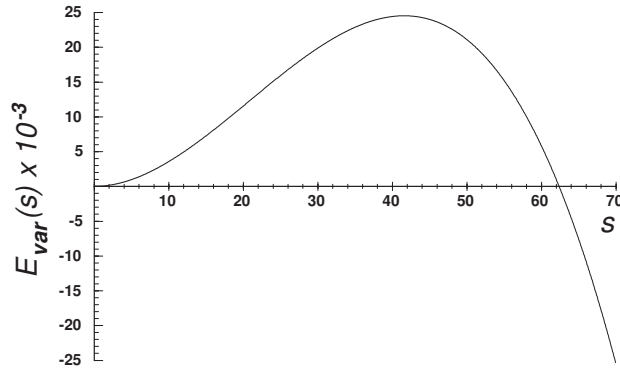


Figura 2.21: energy3d.eps

que, o termo volumétrico fornece uma energia negativa que cresce com a potência cúbica do raio. Isto porque a densidade de energia do volume da bolha ( $f(S_c)$ ) é menor que a densidade de energia fora da bolha ( $f(0)$ ). Portanto, o sistema tendera a diminuir sua energia aumentando o tamanho da bolha. Porém, existe um preço a pagar por isso que é a energia necessária para criar a parede da bolha. Esta energia é positiva que cresce como o quadrado de  $R$ . Por tanto quanto maior a bolha, maior a energia para fornecer a tensão superficial necessária. De esta competição entre densidade de energia

volumétrica e superficial surge o máximo mostrado na figura (2.21) que define o raio crítico  $R = R_c$ .

$$R_c = \frac{2\sigma}{\Delta\mathcal{F}} \quad (2.130)$$

Se uma bolha for criada com seu raio  $R > R_c$  ela tenderá a crescer sem limite produzindo a transição de fase. Se por outro lado a bolha for criada com raio  $R < R_c$ , a energia superficial ganha da volumétrica e a bolha reduz seu tamanho até desaparecer. A energia da bolha crítica é dada por

$$F_c \equiv F_b(R_c) = \frac{4\pi\sigma}{3} R_c^2 = \frac{16\pi\sigma^3}{3(\Delta\mathcal{F})^2}. \quad (2.131)$$

Perto do máximo da energia livre, ela pode ser expandida em termos da distância ao raio crítico,

$$F_b(R) = E_c - \frac{1}{2}\omega^2(R - R_c)^2 + \dots \quad (2.132)$$

onde a frequência

$$-\omega^2 \equiv \left. \frac{d^2 F_b(R)}{dR^2} \right|_{R_c} = -8\pi\sigma \quad (2.133)$$

é independente do raio crítico e de  $\Delta\mathcal{F}$ . Esta frequência é relacionada com a taxa de crescimento de uma bolha supracrítica.

Portanto, a transição real se produz a partir do estado metaestável através de flutuações. Estas flutuações geram aleatoriamente bolhas de diferentes tamanhos. As bolhas subcríticas tendem a desaparecer, enquanto as supracríticas crescem. A transição de fase se completa quando as bolhas percolam todo o volume disponível. A quantidade importante para entender esta transição é a taxa de nucleação de uma bolha crítica que, na teoria de Langer vem dada por

$$\Gamma \sim e^{-F_c/T} \quad (2.134)$$

## 2.5 Pontos multicríticos

As transições de fase descritas até aqui ocorrem quando apenas uma variável termodinâmica é controlada, no caso, a temperatura  $T$ , e o campo conjugado ao parâmetro de ordem é zero. Nestes casos, o diagrama de fase pode ser descrito em termos de uma linha (temperatura) separadas apenas por um ponto separando a fase desordenada de altas temperaturas da fase ordenada a baixa temperatura. Porém, quando existem mais de uma variável termodinâmica externa (que pode ser variada a vontade), o diagrama de fases é multidimensional, e existem pontos críticos que só podem ser alcançados fixando mais de uma variável. Estes pontos são chamados de multicríticos. Vejamos alguns exemplos.

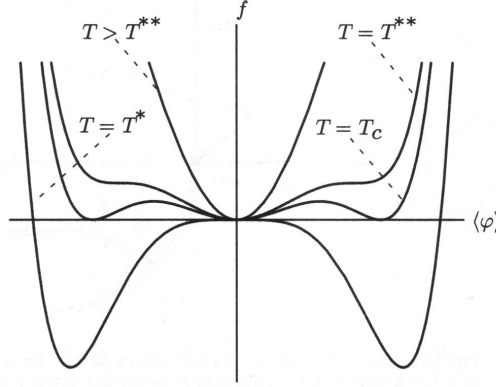


Figura 2.22: FPhi6

### 2.5.1 Pontos tricríticos

Vimos que os termos de ordem cúbico na energia livre levam a transições de fase de primeira ordem. Porém, as transições de primeira ordem também podem ocorrer mesmo na ausência de potências ímpares. Considere por exemplo a densidade de energia livre

$$f = \frac{1}{2}r \phi^2 + u_4 \phi^4 + u_6 \phi^6 \quad (2.135)$$

e como sempre  $r = a(T - T^*)$ . Se  $u_4 > 0$ , então o termo  $\phi^6$  pode ser ignorado. Porém, se  $u_4 < 0$  o termo  $u_6 \phi^6$  com  $u_6 > 0$  deve ser considerado para garantir a estabilidade do sistema. Na figura (2.22) mostramos a energia livre em função do parâmetro de ordem para várias temperaturas quando  $u_4 < 0$ . Vemos que o termo  $u_4$  produz mínimos locais simétricos em relação à transformação  $\phi \rightarrow -\phi$ . Quando o sistema é esfriado estes mínimos metaestáveis têm energia menor e para uma certa temperatura  $T = T_c > T^*$  três mínimos tem energia  $f = 0$ . Neste ponto se produz uma transição de fase de primeira ordem e na temperatura  $T_c$  temos a coexistência de três fases. Estes pontos se chamam pontos tricríticos.

Quando  $u_4 > 0$ , a temperatura de transição é exatamente a mesma que para o modelo  $\phi^4$ , isto ocorre em  $r_c = 0$  ou  $T_c = T^*$ . Quando  $u_4 < 0$ , as condições para a transição de primeira ordem são:

$$f(r_c, \phi) = 0 \quad , \quad \frac{\partial f(r_c, \phi)}{\partial \phi} = 0 \quad (2.136)$$

da mesma forma que para um cristal líquido nemático. Isto leva a

$$r_c = a(T_c - T^*) = \begin{cases} 0 & \text{se } u_4 > 0 \\ \frac{1}{2} \frac{u_4^2}{u_6} & \text{se } u_4 < 0 \end{cases} \quad (2.137)$$

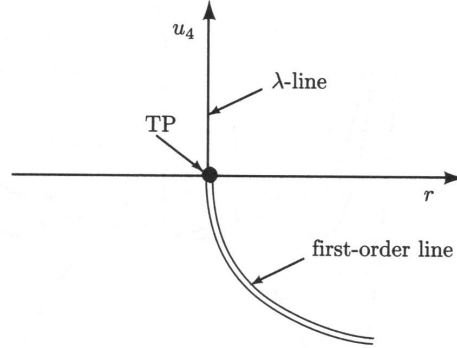


Figura 2.23: PDPhi6

O diagrama de fases no plano  $u_4 - T$  é mostrado na figura (2.23). A linha de segunda ordem  $u_4 > 0$  é chamada de linha lambda. Isto porque ela foi observada pela primeira vez na transição superfluida de hélio líquido. Nesta transição a topologia da curva do calor específico se parece como a letra grega  $\lambda$ , por este motivo esta transição é muitas vezes chamada de transição lambda. Esta linha de segunda ordem, encontra uma linha de primeira ordem para  $u_4 < 0$ . O ponto de encontro  $(r, u_4) = (0, 0)$  é um ponto tricrítico.

O valor do parâmetro de ordem, o calor latente sobre a linha de primeira ordem e o limite de metaestabilidade pode ser calculado como na seção anterior.

$$\phi_c = \pm \sqrt{|u_4|/(2u_6)} \quad (2.138)$$

$$q = -T_c s = \frac{a}{4}|u_4|/u_6 \quad (2.139)$$

$$r^{**} = a(T^{**} - T^*) = 2u_4^2/(3u_6) \quad (2.140)$$

Note que, tanto  $\phi_c$  quanto o calor latente  $q$  são zero no ponto crítico, onde não existe mais transição de primeira ordem. Sobre a linha de primeira ordem, existem três fases coexistindo cujos valores do parâmetro de ordem são  $\phi = 0$  e  $\phi = \pm|\phi_c|$ . No ponto tricrítico a transição é de segunda ordem, porém o expoente crítico é  $\beta = 1/4$  e não  $\beta = 1/2$  como no caso da transição ferromagnética.

$$\phi = \pm[-r/6u_6]^{1/4} \quad (2.141)$$

Da mesma forma, se introduzimos um pequeno campo de quebra de simetria  $h$ , obtemos que no ponto tricrítico

$$\phi = (h/6u_6)^{1/5} \quad (2.142)$$

portante neste caso  $\delta = 5$  e não 3 como no caso ferromagnético.

Existem exemplos importantes de pontos tricríticos, alguns deles são: o sistema magnético  $F_eCl_2$  que tem propriedades metamagnéticas e misturas de líquidos quânticos  $He^3 - He^4$ .

### 2.5.2 Pontos bicríticos e tetracríticos

Sistemas magnéticos com anisotropias, misturas de líquidos assim como outros sistemas podem conduzir a diferentes tipos de pontos críticos descritos por mais de um parâmetro de ordem. Considere por exemplo um sistema formado por dois parâmetros de ordem com simetria  $Z_2$ .

$$f = \frac{1}{2}r(\phi_1^2 + \phi_2^2) - \frac{1}{2}g(\phi_1^2 - \phi_2^2) + u_1\phi_1^4 + u_2\phi_2^4 + 2u_{12}\phi_1^2\phi_2^2 \quad (2.143)$$

Se  $g = 0$  e  $u_1 = u_2 = u_{12}$ , o modelo se reduz ao modelo  $XY$  já que o sistema se reduz a

$$f = \frac{1}{2}r(\phi_1^2 + \phi_2^2) + u(\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 \quad (2.144)$$

e o sistema tem uma simetria  $O(2)$ . Ou seja, rotações no espaço  $\phi_1 - \phi_2$ .

As fases podem ser calculadas a partir dos mínimos da energia livre,

$$\frac{\partial f}{\partial \phi_1} = 0 \quad , \quad \frac{\partial f}{\partial \phi_2} = 0 \quad (2.145)$$

que, calculadas explicitamente fornecem,

$$\phi_1 \{r - g + 4u_1\phi_1^2 + 4u_{12}\phi_2^2\} = 0 \quad (2.146)$$

$$\phi_2 \{r + g + 4u_2\phi_2^2 + 4u_{12}\phi_1^2\} = 0 \quad (2.147)$$

Se  $g > 0$ , o parâmetro  $\phi_1$  ordenará antes que  $\phi_2$ , esperamos portanto uma fase  $\phi_1 \neq 0$ ,  $\phi_2 = 0$ . Se  $g < 0$  ocorrerá o contrário. Os detalhes do diagrama de fases mostrado na figura (2.24) dependem dos detalhes da interação quártica. Se  $u_1u_2 < u_{12}^2$ , temos uma linha de primeira ordem ao longo de  $g = 0$ ,  $r < 0$  que separa as fase  $\phi_1 \neq 0$ ,  $\phi_2 = 0$  da fase  $\phi_2 \neq 0$ ,  $\phi_1 = 0$  como mostra a parte *a*) da figura (2.24). Dois linhas de segunda ordem se encontram no ponto  $r = 0$ ,  $g = 0$ . Este ponto é chamado de bicrítico.

O outro caso descrito na parte *b*) da figura (2.24) é quando  $u_1u_2 > u_{12}^2$ . Neste caso, existe uma fase onde os dois parâmetro de ordem  $\phi_1$  e  $\phi_2$  são diferentes de zero. As fases neste caso estão separadas por linhas de segunda ordem. O ponto crítico  $r = 0$ ,  $g = 0$  é um ponto tetracrítico.

## 2.6 O estado supercondutor nemático

O supercondutor nemático é um exemplo de um cristal líquido quântico. É um estado eletrônico homogêneo que quebra a simetria de calibre, bem como a invariância de rotação. Assim, é necessário lidar com dois parâmetros de ordem, um deles complexo, relacionado à supercondutividade e outro relacionado à ordem orientacional.

O parâmetro de ordem do supercondutor mais simples possível é dado por uma função escalar complexa

$$\psi(\vec{x}) = \rho(\vec{x})e^{i\theta(\vec{x})} . \quad (2.148)$$

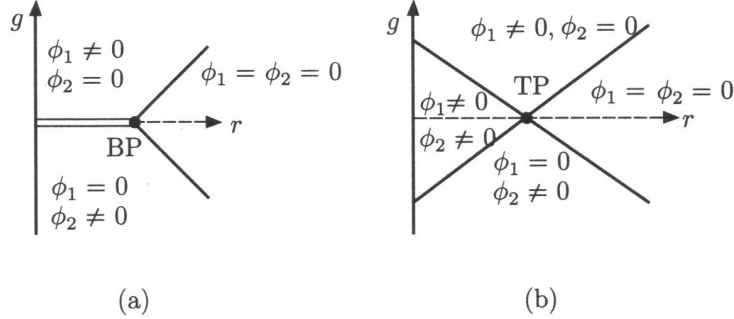


Figura 2.24: BPTP

Além disso, o parâmetro de ordem nemático bidimensional é representado por um tensor segunda ordem, simétrico de traço zero  $bfN$ , cujos componentes são dados por

$$N_{ij} = 2S(\vec{x}) \left\{ n_i(\vec{x})n_j(\vec{x}) - \frac{1}{2}\delta_{ij} \right\}, \quad (2.149)$$

com  $i, j = x, y$ .  $S(\vec{x})$  é o módulo do parâmetro de ordem e o vetor unitário  $\hat{n} = (\cos \alpha, \sin \alpha)$  é o diretor da ordem nemática.  $N_{ij}$  é uma função quadrática do diretor, de tal modo que é invariante sob rotações em  $\pi$ ,  $\hat{n}(\vec{x}) \rightarrow -\hat{n}(\vec{x})$ . Em duas dimensões,  $\mathbf{N}$  tem duas componente independentes,  $N_{xx}$  e  $N_{xy}$  as quais poderiam ser combinadas em uma função complexa  $Q = N_{xx} + iN_{xy}$ . Dessa forma,

$$Q(\vec{x}) = S(\vec{x})e^{i2\alpha(\vec{x})}. \quad (2.150)$$

A representação complexa do parâmetro de ordem nemático é possível apenas em duas dimensões. Em três dimensões, é necessário voltar à representação tensorial, pois, nesse caso, existem mais graus de liberdade e mais possibilidades para a estrutura nemática, como as fases nemáticas uniaxial e biaxial.

Ambos os parâmetros de ordem  $\psi(\text{vecx})$  e  $Q(\text{vecx})$  são formalmente muito semelhantes, no sentido de que ambos são funções complexas. No entanto, suas propriedades de transformação são diferentes:  $\psi(x)$  transforma com o grupo de simetria de calibre interna  $U(1)$  e é um campo escalar sob rotações globais externas, isto é, se girarmos o sistema de coordenadas em um ângulo  $\varphi$ ,  $\vec{x}' = R_\varphi(\vec{x})$ , então  $\psi'(\vec{x}') = \psi(\vec{x})$ . Por outro lado, o parâmetro de ordem nemático não se transforma com o grupo de calibre interno, no entanto,  $Q'(\vec{x}') = e^{i2\varphi}Q(\vec{x})$  sob rotações. O fator 2 na exponencial reforça a simetria nemática ( $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ ). Essas propriedades são muito importantes para construir corretamente a energia livre invariante de calibre e invariante perante rotações.

Para configurações uniformes, a expansão do Landau para os dois parâmetros de ordem pode ser feita como de costume. Supondo que perto da transição  $|\psi|$  seja pequeno e solicitando invariância rotacional e de calibre, com o requisito adicional de

analiticidade, temos o potencial quártico para o parâmetro de ordem do supercondutor

$$V_{SC} = a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 = a\rho^2 + \frac{b}{2}\rho^4, \quad (2.151)$$

onde assumimos  $b > 0$ . A transição de fase metal/supercondutor é controlada pelo sinal de  $a = \tilde{a}(T - T_{SC})$ , onde  $\tilde{a}$  é uma constante e  $T_{SC}$  é a temperatura crítica do supercondutor. Para o parâmetro de ordem nemático temos uma expansão equivalente,

$$\begin{aligned} V_N &= \frac{t}{2}Tr(\mathbf{N}^2) + \frac{u}{4}Tr(\mathbf{N}^4) \\ &= t|Q|^2 + \frac{u}{2}|Q|^4 = tS^2 + \frac{u}{2}S^4. \end{aligned} \quad (2.152)$$

Como  $u > 0$ , a transição isotrópica/nemática é controlada por  $t = \tilde{t}(T - T_N)$ , onde  $\tilde{t}$  é uma constante e  $T_N$  é a temperatura crítica nemática. Assumimos que  $T_N > T_{SC}$ , de tal forma que a fase metálica-nemática existe  $T_{SC} < T < T_N$ . A expressão da equação (2.152) é típica de um parâmetro nemático bidimensional, onde  $Tr(\mathbf{N}^{2n+1}) = 0$ . Em três dimensões  $Tr(\mathbf{N}^3) \neq 0$ , produzindo uma transição de fase de primeira ordem.

A forma mais simples de acoplar  $Q$  e  $\psi$  levando em conta a simetria de fase e invariância perante rotações é a traves do potencial quártico

$$V_{SCN} = \frac{v}{2}|\psi|^2 Tr(\mathbf{N}^2) = v|\psi|^2|Q|^2 = v\rho^2 S^2, \quad (2.153)$$

onde  $v$  é a constante de acoplamento. Para acoplamento fraco,  $|v/ub| \ll 1$ , a energia livre de Landau é minimizada por

$$\rho_m^2 = -\frac{a}{b} + t \left( \frac{v}{ub} \right) + O[(v/ub)^2], \quad (2.154)$$

$$S_m^2 = -\frac{t}{u} + a \left( \frac{v}{ub} \right) + O[(v/ub)^2]. \quad (2.155)$$

Dessa forma, se  $v < 0$ , a presença de uma fase reforça a presença da outra. Porém, para  $v > 0$ , as duas fases competem.

O acoplamento do parâmetro de ordem nemático com configurações supercondutoras não homogêneas é mais sutil. Como o parâmetro de ordem nemática é um segundo tensor de segunda ordem, ele acopla com o gradiente do parâmetro de ordem supercondutor. De fato, o acoplamento mais simples desse tipo é

$$\nabla_i \psi^* N_{i,j} \nabla_j \psi \quad (2.156)$$

que obviamente é invariante e invariante perante rotações e transformações de fase global. Nesse sentido, o parâmetro de ordem nemático se comporta como uma métrica, definindo um espaço curvo. Dessa forma podemos construir a energia livre de Ginsburg-Landau, considerando o parâmetro de ordem supercondutor em um espaço curvo definido pela métrica

$$g_{ij}(\vec{x}) = \delta_{ij} + \frac{\Lambda}{S_m} N_{ij}(\vec{x}), \quad (2.157)$$

onde a constante  $\Lambda$  mede o acoplamento geométrico e  $S_m$  é apenas uma normalização para que a constante de acoplamento seja adimensional. Notamos que  $\Lambda$  poderia ser qualquer número real. Por outro lado, dado que o tensor nemático é invariante perante rotações em  $\pi$ , e muda de sinal quando rotado em  $\pi/2$ , uma mudança de sinal em  $\Lambda$  equivale a rotar o diretor  $\hat{n}(x)$  em  $\pi/2$ .

Consideramos essencialmente três contribuições à energia livre: os termos do potencial, dados pelas equações (2.151), (2.152) and (2.153) que envolvem apenas acoplamentos escalares e homogêneos; os termos com derivadas que são proporcionais à métrica  $g^{ij}\nabla_i\psi^*\nabla_j\psi$ ; e os termos nemáticos não-homogêneos que levam em conta as propriedades "elásticas" dos graus de liberdade nemáticos. Ainda, como é usual, acoplamos de forma mínima o campo eletromagnético de forma tal de garantir invariância local de calibre. Dessa forma, a energia livre tem a forma,

$$F_{LG} = \int d^2x \sqrt{\det g} \left\{ \alpha_s g^{ij} (D_i\psi)^* (D_j\psi) + \alpha_n \vec{\nabla} Q^* \cdot \vec{\nabla} Q \right. \\ \left. + V_{SC} + V_N + V_{NSC} + \frac{1}{8\pi} B^2 \right\}. \quad (2.158)$$

O primeiro termo da eq. (2.158) codifica a interação entre derivadas do parâmetro de ordem SC. Ele contém acoplamentos com graus de liberdade nemáticos através da métrica  $g^{ij}$  dada pela Eq. (2.157). A constante  $\alpha_s$  mede a rigidez supercondutora e está relacionada com o comprimento de coerência. O segundo termo, proporcional a  $\alpha_n$ , é a energia elástica nemática mais simples onde consideramos que todas as constantes de Frank são iguais. A segunda linha da Eq. (2.158) contém os potenciais e a densidade de energia do campo magnético  $B = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ . As derivadas covariantes são dadas por

$$D_i = \nabla_i - ieA_i. \quad (2.159)$$

O valor da carga elétrica das excitações elementares não é determinado em uma teoria Ginzburg-Landau. Nos materiais supercondutores "normais", fixamos esse valor em  $2e$ , uma vez que associamos o módulo do parâmetro ordem à densidade dos pares de Cooper. No caso do supercondutor nemático, não temos uma teoria microscópica (como a BCS) para nos guiar para fixar o valor da carga. Portanto, fixamos este valor em  $4e$ , pois entendemos o supercondutor nemático como proveniente de uma onda de densidade de pares que foi desordenada a traves de dislocações ("melting" de defeitos topológicos). Finalmente, a medida de integração  $d^2x\sqrt{\det g}$ , é a medida usual invariante perante reparametrizações.

Eq. ( ref eq: FLG) é o ponto de partida da análise do estado supercondutor nemático e suas transições de fase. Este modelo possui algumas semelhanças com outros estados de supercondutores descritos por parâmetros de ordem com componentes múltiplas. Por exemplo, supercondutores de duas bandas com diferentes comprimentos de coerência admitem vórtices com fluxo magnético fracionário. A diferença essencial com o nosso modelo é que o parâmetro de ordem nemático  $Q$  não acopla com o potencial vetor  $A_i$  de maneira mínima, mas sim com a métrica. Existe também um acoplamento

geométrico não trivial entre os dois parâmetros de ordem que caracterizam exclusivamente o estado supercondutor nemático. A seguir, analisamos a influência desses acoplamentos nas configurações topológicas que minimizam a energia livre, Eq. (ref eq: FLG).

## Aproximação de London

Algumas características da estrutura topológica pode ser visualizada usando uma aproximação mais simples para a energia livre, em analogia com a aproximação de London nos supercondutores usuais.

O sistema descrito pela equação (2.158) possui três escalas típicas de comprimento. O comprimento de coerência supercondutor

$$\xi_s = \sqrt{\frac{\alpha_s}{|a|}} \quad (2.160)$$

que relaciona o coeficiente da derivada do parâmetro de ordem com a curvatura do potencial supercondutor. Este comprimento define a escala típica das modulações do parâmetro de ordem supercondutor. Existe também um comprimento análogo que define a escala de coerência do parâmetro de ordem nemático

$$\xi_n = \sqrt{\frac{\alpha_n}{|t|}} \quad (2.161)$$

Finalmente, o comprimento de penetração de London  $\lambda_L$  é relacionado com a resposta eletromagnética do sistema. No nosso modelo vem dado por

$$\lambda_L = \sqrt{\frac{1}{138\pi e^2 \alpha_s} \left(\frac{b}{a}\right)} + O(\Lambda). \quad (2.162)$$

O coeficiente numérico é a metade do usual, devido a que a carga elementar é  $4e$  nesse modelo. Ainda, podem ser consideradas pequenas correções devido à anisotropia de ordem  $\Lambda$ . Podemos definir então, dois constantes adimensionais dadas por,

$$\kappa_s = \frac{\lambda_L}{\xi_s} \quad \text{e} \quad \kappa_n = \frac{\lambda_L}{\xi_n}. \quad (2.163)$$

A primeira é o parâmetro de Abrikosov usual, enquanto que a segunda é um parâmetro análogo para a componente nemática. O comprimento de penetração é o mesmo nas duas definições devido a que o campo magnético não acopla de forma mínima com o parâmetro de ordem nemático. Para temperaturas  $T \ll T_{SC} < T_N$ , podemos ignorar flutuações de  $\rho$  and  $S$ . Da Eq. (2.158), e considerando  $S = S_m$  and  $\rho = \rho_m$  dados pelas Eqs. (2.154) e (2.155), achamos a seguinte energia livre para a fase supercondutora  $\theta(x)$  e a orientação do diretor  $\alpha(x)$ ,

$$F_L = \int d^2x \left\{ \rho_s |\vec{\nabla}\theta + 4e\vec{A}|^2 + K |\vec{\nabla}\alpha|^2 + \lambda (\hat{n} \cdot (\vec{\nabla}\theta + 4e\vec{A}))^2 + \frac{1}{8\pi} (\vec{\nabla} \times \vec{A})^2 \right\}, \quad (2.164)$$

onde  $\rho_s = \alpha_s \rho_m^2 (1 - \Lambda)$ ,  $K = 4\alpha_n S_m^2$  and  $\lambda = 2\alpha_s \rho_m^2 \Lambda$ . Esta aproximação é adequada para baixas temperaturas em sistemas com  $\kappa_s \gg 1$  e  $\kappa_n \gg 1$ .

Para campos magnéticos externos fracos, o sistema se encontra na fase Meissner. Possui coerência de fase e o campo magnético é completamente expulso da amostra. No entanto, próximo a um valor crítico  $H_{c1} \sim \phi_0 / \lambda_L^2$ , determinado pelo comprimento de penetração  $\lambda_L$  e pelo quanto de fluxo magnético  $\phi_0$ , o sistema pode reduzir sua energia deixando o fluxo magnético quantizado penetrar na amostra em uma região limitada determinada pelo comprimento de coerência  $\xi_s$ . Uma vez que o campo magnético penetra na amostra, as supercorrentes circulantes suprimem o parâmetro da ordem supercondutor dentro do núcleo. Por outro lado, para grandes distâncias, as correntes produzem uma magnetização que suprime o campo magnético em uma escala de comprimento  $\lambda_L$ . Para distâncias ainda maiores, a densidade de corrente desaparece rapidamente. O parâmetro de ordem nemático pode apresentar defeitos topológicos denominados disclinações. Elas são regiões em que o diretor  $\hat{n}(x)$  tem uma descontinuidade. Em duas dimensões, as disclinações são objetos pontuais, de forma que  $\oint_C d\vec{\ell} \cdot \hat{n} = 2\pi$ , desde que a descontinuidade esteja dentro do caminho fechado  $C$ . Esses defeitos são compostos por um núcleo em que o sistema é essencialmente isotrópico. Em temperaturas muito baixas, muito menores que a transição isotrópica-nemática, esperamos apenas poucas disclinações, já que o principal mecanismo para produzi-las são as flutuações térmicas. No entanto, devido ao acoplamento geométrico com o parâmetro de ordem supercondutor, a presença de vórtices sempre induz disclinações. Assim, em nosso modelo, as disclinações são indiretamente produzidas pelo campo magnético.

Na ausência do acoplamento geométrico ( $\lambda = 0$ ), a equação (2.164) se reduz a dois modelos XY desacoplados. Nesse contexto, pela elevação da temperatura, esperamos duas transições independentes de Kosterlitz-Thouless; uma delas é produzida pela proliferação de vórtices dando lugar a uma fase nemática metálica e a outra por proliferação de disclinações, atingindo uma fase metálica completamente isotrópica. Esse cenário muda na presença do acoplamento geométrico, pois força o diretor a apontar perpendicularmente ou paralelamente à supercorrente, dependendo do sinal de  $\lambda$ . Este efeito é facilmente compreendido ao observar que o último termo da Eq. (2.164) é proporcional a  $\lambda(\hat{n} \cdot \vec{J}_{sc})^2$  com a corrente  $\vec{J}_{sc} \sim \vec{\nabla}\theta + 4e\vec{A}$ . Para minimizar esse termo,  $\hat{n} \perp J_{sc}$  para  $\lambda > 0$ . Por outro lado, se  $\lambda < 0$ , a energia é minimizada considerando  $\hat{n} \parallel J_{sc}$ . Assim, em ambos os casos, as correntes induzem nematicidade. Em particular, a presença de um vórtice induz uma configuração de disclinação, conforme mostrado na Fig. (2.25) para o caso  $\lambda > 0$ .

Para mostrar esse comportamento, minimizamos a energia livre calculando

$$\frac{\delta F}{\delta \theta} = 0 \quad , \quad \frac{\delta F}{\delta \alpha} = 0 \quad (2.165)$$

Obtemos assim as seguintes equações diferenciais (por simplicidade, colocamos  $\vec{A} = 0$ ),

$$\nabla^2 \theta + \frac{\lambda}{\rho_s} \left( \nabla_n^2 \theta + \nabla_n \theta \nabla_{n\perp} \alpha \right) = 0 \quad , \quad (2.166)$$

$$\nabla^2 \alpha - \frac{\lambda}{K} \nabla_n \theta \nabla_{n_\perp} \theta = 0, \quad (2.167)$$

onde definimos os seguinte operadores diferenciais escalares

$$\nabla_n = \hat{n} \cdot \vec{\nabla}, \quad (2.168)$$

$$\nabla_{n_\perp} = \hat{n} \times \vec{\nabla}. \quad (2.169)$$

$\nabla_n$  and  $\nabla_{n_\perp}$  são derivadas direcionais paralela e perpendicular ao diretor  $\hat{n}(x)$ , respectivamente.

Achamos três tipos de configurações que são solução das equações (2.166) e (2.167):

- A solução trivial é  $\theta(x) = \theta_0$ ,  $\alpha(x) = \alpha_0$  onde  $\theta_0$  e  $\alpha_0$  são dois constantes arbitrárias. Esta solução representa um estado supercondutor anisotrópico com fase global  $\theta_0$  e o diretor alinhado com a direção  $\hat{n}_0 = (\cos \alpha_0, \sin \alpha_0)$ .
- Disclinações isoladas com  $\theta(x) = \theta_0$ , e por exemplo,  $n_i(x) = x_i/r$  for  $r \neq 0$ . Esta solução tem corrente zero  $\vec{\nabla} \theta = 0$ , e o diretor se encontra em uma configuração topológica radial.
- Um vórtice acoplado a uma disclinação de tal forma que o diretor é perpendicular à corrente em todos os pontos. Uma configuração típica é  $\nabla_i \theta = \epsilon_{ij} x_j / r^2$  e  $n_i(x) = x_i/r$  para  $r \neq 0$ .  $\epsilon_{ij}$  é o tensor anisimetrico de Levi-Civita tensor, então,  $\hat{n}(x) \cdot \vec{\nabla} \theta(x) = 0$ . Mostramos esta solução na figura (2.25).

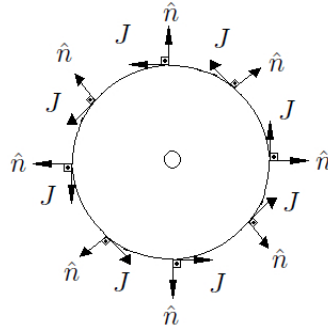


Figura 2.25: Isolated vortex attached to a disclination. The radial director  $\vec{n}(\vec{x})$  is locally perpendicular to the vortex current  $\vec{J}_{sc}(\vec{x})$ . Inside the core, the system is an isotropic metal.

É interessante notar que um vórtice isolado não é solução das equações Eqs. (2.166) e (2.167), devido a que o acoplamento geométrico força o diretor a apontar na direção perpendicular (ou paralela) as linhas de corrente, produzindo assim uma disclinação

Portanto, na aproximação de London, a proliferação de defeitos topológicos no estado nemático-supercondutor podese dar de duas formas possíveis: as disclinações

isoladas poderiam proliferar restaurando a isotropia, mas sem afetar a supercondutividade, ou, a proliferação de vórtices fortemente ligados as disclinações, produzindo uma fase metálica isotrópica.

Na aproximação de London, é simples calcular a energia associada a uma configuração de vórtice acoplada com uma disclinação. Para  $\Lambda > 0$ ,  $J_{sc} \perp \hat{n}$  e a energia possui essencialmente duas contribuições independentes  $F_{vd} = F_v + F_d$ . A energia do vórtice é aproximadamente  $F_v \sim (\phi_0^2/\lambda_L^2) \ln(\kappa_s)$ . Como a disclinação não acopla com o campo eletromagnético,  $E_d = 2\pi K \ln(L/xi_n)$ , em que  $L$  é o tamanho linear da amostra. Essa divergência infravermelha pode ser regulada com a distância entre disclinações no regime diluído. Para entender mais profundamente a interação entre vórtices e disclinações, calculemos a energia necessária para criar um par vórtice-disclinação, separado por uma distância  $R$ . Considere, por exemplo, a configuração representada na Fig (ref fig: VDR). O vórtice é centrado na origem, enquanto que a disclinação é centrada

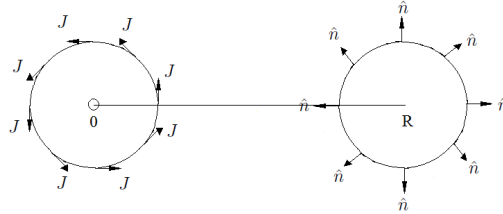


Figura 2.26: Vortex and Disclination shifted by a distance  $R$  in the  $x$  direction

a uma distância  $R$  sobre o eixo  $x$ .

$$\nabla_i \theta = \epsilon_{ij} \frac{x_j}{x^2 + y^2}, \quad (2.170)$$

$$n_i = \frac{x_i - R_i}{\sqrt{(x - R)^2 + y^2}}, \quad (2.171)$$

com  $R_x = R$  and  $R_y = 0$ . A diferença de energia podemos calcula-la como  $\Delta F(R) = F_{vd}(R) - F_{vd}(0)$  usando a equação (2.164),

$$\Delta F(R) = \lambda \int d^2x (\mathbf{n}(x) \cdot \nabla \theta(x, R))^2. \quad (2.172)$$

Substituindo as equações (2.170) e (2.171) na equação (2.172), e realizando explicitamente as integrais, achamos

$$\Delta F(R) = \pi |\lambda| \ln \left( \frac{R}{a} \right), \quad (2.173)$$

onde  $a$  é o núcleo do vórtice e  $R \gg a$ . Descobrimos então que, para longas distâncias, vórtices e disclinações tem uma interação atrativa logarítmica, cujo sinal independe do sinal da carga topológica.

## 2.7 Leis de escala, criticalidade e universalidade

Resumimos este capítulo destacando alguns resultados de caráter geral que observamos nos exemplos anteriores.

### 2.7.1 Comprimento de correlação

Neste capítulo, na eq. (2.33), interpretamos a suscetibilidade magnética como uma função de correlação. Desta forma, foi possível interpretar a grandeza  $\xi(T)$  (eq. (2.26)) como um comprimento de correlação.

Podemos interpretar fisicamente o comprimento  $\xi(T)$  da seguinte forma. Imagine-mos que temos um sistema termodinâmico qualquer. O estado do sistema fica definido pelo valor de suas variáveis "externas", como temperatura  $T$ , pressão  $P$ , campo magnético  $H$ , etc. As propriedades físicas são definidas como derivadas da energia livre, como a magnetização  $M$ , o calor específico  $C_v$ , a compressibilidade  $\kappa$ , etc. No caso de uma fase homogênea podemos definir densidades das variáveis extensivas como a densidade de energia livre  $f$ , entropia  $s$ , etc. Imaginemos agora que, de alguma, forma dividimos o sistema em duas partes. Cada parte continuará a ter exatamente as mesmas propriedades, ou seja, não observaremos nenhuma mudança nas grandezas intensivas nem nas densidades das grandezas extensivas. Imaginemos ainda que continuamos dividindo o sistema de forma recursiva. É claro que, se continuarmos fazendo divisões, em algum momento as propriedades termodinâmicas começarão a mudar. Isto é óbvio porque, no pior dos casos, chegaremos à escala atômica onde as leis da termodinâmica macroscópica já não funcionam. A pergunta é, para que escala começaremos a perceber que já não estamos em presença de um sistema termodinâmico ou, dito de outra forma, para que escala de comprimentos os graus de liberdade microscópicos começam a ser relevantes? A resposta é justamente o "comprimento de correlação"  $\xi$ . Na figura 2.27, ilustramos o que acontece tipicamente dentro de uma fase desordenada. O sistema é

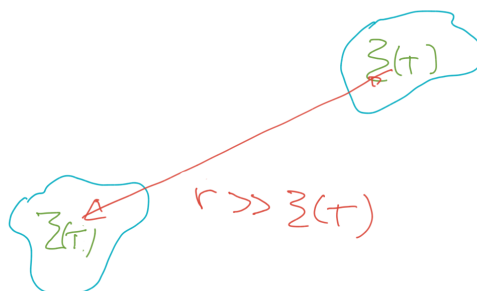


Figura 2.27: Domínios de raio  $\xi(T)$  separados por uma distância  $r \gg \xi$ .

composto por domínios de largura  $\xi$ . A função de correlação para distâncias  $r \gg \xi$

será zero. Ou seja, os graus de liberdade microscópicos não estão correlacionados (são independentes) a distâncias maiores que o comprimento de correlação. Isto é a base para o estudo de modelos microscópicos simples e, conseqüentemente, a utilização da teoria de perturbações em mecânica estatística. Imaginemos por um momento que  $\xi \sim a$ , onde  $a$  é a distância interatômica. Isto significa que podemos pensar cada domínio composto de uns poucos átomos. Qualquer interação, além desse domínio, se torna irrelevante. Portanto se pudermos resolver o problema de poucos corpos, dentro do domínio, o problema se reduz a um sistema fracamente interagente desses domínios.

Um fenômeno interessante acontece però de uma transição de fase contínua. Como vimos  $\lim_{T \rightarrow T_c} \xi(T) = \infty$ . Desta forma, percebemos a dificuldade de entender teoricamente as vizinhanças de um ponto crítico. Numa transição de segunda ordem, as variáveis microscópicas estão correlacionadas em *todas as escalas*, não podendo definir domínios fracamente interagentes, como é feito nas fases não críticas. Isto faz que num ponto crítico, a matéria se encontra em um estado completamente diferente as conhecidas fases ordenada e desordenada. Em particular, não é possível descrever um sistema crítico usando teoria de perturbações. Esta dificuldade é o que o faz a criticalidade extremamente interessante e desafiadora.

Embora um sistema crítico seja extremamente complexo do ponto de vista microscópico, ele tem simplificações notáveis, justamente devido ao fato que suas propriedades não dependem fortemente dos detalhes microscópicos da teoria. Ou seja, podemos achar leis físicas que de alguma forma são insensíveis aos detalhes da teoria. Elas apenas dependem das simetrias e da dimensionalidade do sistema. Este fenômeno é chamado de *universalidade*. O estudo da universalidade é um dos objetivos deste texto.

### 2.7.2 Leis de potência

Outra das observações deste capítulo é a existência de leis de potência para as grandezas termodinâmicas perto de um ponto crítico. As leis de potências, podem ser deduzidas a partir de leis de escalas e não são novas na física. Por exemplo considere o antigo problema do movimento planetário de Keppler. Se aceitamos que o potencial gravitacional é  $V(r) \sim 1/r$ . É fácil deduzir apenas *contando unidades*, que o período da órbita fechada de qualquer planeta é

$$T \sim r^{3/2} \tag{2.174}$$

A dedução dessa equação pode ser feita "contando unidades". Por exemplo, a partir do potencial, sabemos que a aceleração da gravidade é proporcional a  $1/r^2$ . Por outro lado, essa aceleração tem que ser proporcional à força centrípeta que é  $\omega^2 r \sim r/T^2$ , onde  $\omega$  é a frequência angular e  $T$  o período. Dessas considerações, a equação (2.174) é deduzida de imediato. Para deduzir esta lei de potências se faz uma suposição básica; assumimos que não existem outras escalas importantes no problema. Por exemplo se aplicarmos o problema à órbita terrestre, estamos supondo que o raio da terra é desprezível se comparado com a distância típica terra-sol. A suposição é mais forte,

estamos dizendo que a escala terrestre não tem importância nenhuma na lei do período da órbita.

Poderíamos utilizar o mesmo tipo de raciocínio para descrever uma transição de fase. Por exemplo, vimos que na transição de fase ferromagnética a função de correlação quando  $r \ll \xi$  tem a forma

$$G(r) \sim \frac{1}{r} \quad (2.175)$$

(igual que o potencial gravitacional!). Num sistema termodinâmico temos basicamente duas escalas, a escala microscópica  $a$ , e o comprimento de correlação  $\xi$ . Porém, perto de um ponto crítico  $\xi \gg a$ , então poderíamos desprezar esta escala microscópica da mesma forma que desprezamos o raio da terra no problema de Kepler. Sendo assim, a função de correlação poderia ser escrita como

$$G(r) \sim \frac{1}{r} f(r/\xi) \quad (2.176)$$

onde  $f$  é a chamada função de escala e obviamente  $r/\xi$  é adimensional. A partir desta expressão podemos calcular então a suscetibilidade magnética

$$\begin{aligned} \chi &\sim \int d^3r \frac{1}{r} f(r/\xi) \\ &\sim \xi^2 \int d^3r' \frac{1}{r'} f(r') \end{aligned} \quad (2.177)$$

onde  $r'$  é uma variável de integração adimensional. Portanto deduzimos que

$$\chi \sim \xi^2 \quad (2.178)$$

Vemos que, apenas de uma análise dimensional clássico, é possível deduzir uma lei de potências da susceptibilidade em função da temperatura ou do comprimento de correlação. Porém, experimentos e cálculos numéricos mostram que este resultado é incorreto. Ou seja, existe uma lei de potências da susceptibilidade com o comprimento de correlação, porém, seu valor numérico não é o correto. O que estamos deixando de lado? O problema é que em uma transição de fase continua todas as escalas contribuem da mesma forma. Mesmo que  $\xi \gg a$ , não é possível ignorar a escala microscópica  $a$ . Sendo assim, a função de correlação teria a forma

$$G(r) \sim \frac{1}{r} f(r/\xi, a/\xi) \quad (2.179)$$

Neste caso, não é possível fazer uma análise dimensional para calcular  $\chi$ . No máximo, podemos supor que para  $a/\xi \ll 1$  que é a região de interesse, a função de escala tenha um comportamento do tipo

$$f(a/\xi) \sim \left(\frac{a}{\xi}\right)^\eta \quad (2.180)$$

onde  $\eta \ll 1$  é um expoente desconhecido. Podemos agora calcular  $\chi$  fazendo análise dimensional sobre a integral obtendo

$$\chi \sim a^\eta \xi^{2-\eta} \quad (2.181)$$

A suscetibilidade continua sendo uma lei de potências do comprimento de correlação, mas o expoente não pode ser calculado apenas com análise dimensional. Por este motivo  $\eta$  é chamada de *dimensão anômala*. A explicação natural destes expoentes, incluída a dimensão anômala, são dados pelo grupo de renormalização que estudaremos nos próximos capítulos.

### 2.7.3 Expoentes críticos e universalidade

Os resultados obtidos da teoria de Landau para a transição de fase ferromagnética podem ser resumidos da seguinte forma. Como o objetivo é estudar o sistema perto do ponto crítico, definimos duas variáveis adimensionais que medem precisamente a distância ao ponto crítico, estas são a temperatura reduzida e o campo magnético adimensional

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad , \quad h = \frac{H}{k_B T_c} \quad (2.182)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzman. O ponto crítico é definido então como  $(t, h) = (0, 0)$  e queremos estudar o sistema no regime  $t \ll 1$  e  $h \ll 1$ . Os resultados obtidos a partir da teoria de Landau são resumidos na tabela (2.1). Vemos que as diferentes propriedades termodinâmicas satisfazem leis de potência com certos expoentes chamados de expoentes críticos. No caso da transição para/ferromagnética achamos  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\delta = 3$ ,  $\nu = 1/2$ , e  $\eta = 0$ . O expoente  $z$  indicado na tabela tem um caráter diferente e não foi calculado neste exemplo.  $z$  é um expoente dinâmico. Até agora consideramos propriedades de equilíbrio. Porém, se tiramos o sistema crítico levemente do equilíbrio, aplicando por exemplo um pequeno campo magnético dependente do tempo, podemos perguntar qual o tempo característico de relaxação no qual o sistema volta ao equilíbrio. Veremos que isto também é uma lei de potências e o tempo de relaxação diverge no ponto crítico com o expoente dinâmico  $z$ . Porém, vamos postergar por enquanto o estudo de sistemas fora do equilíbrio termodinâmico.

O outro exemplo que estudamos foi um fluido simples perto da transição líquido/gas. Neste caso, a distância ao ponto crítico é definida pelas variáveis,

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad , \quad \tilde{p} = \frac{p - p_c}{p_c} \quad (2.183)$$

com  $n = n_c$ . Os resultados obtidos se encontram resumidos na tabela (2.2). Pode ser observado a similitude de resultados identificando os parâmetros de ordem

$$M \leftrightarrow (n_l - n_g) \quad (2.184)$$

Expoente crítico	lei de potência	variável termodinâmica
$\alpha$	$C \sim  t ^{-\alpha}$	Calor específico
$\beta$	$M \sim (-t)^{-\beta}$	Magnetização
$\gamma$	$\chi = \partial M / \partial H \sim  t ^{-\gamma}$	suscetibilidade
$\delta$	$M _{T_c} \sim  h ^{1/\delta}$	Magnetização no ponto crítico
$\nu$	$\xi \sim  t ^{-\nu}$	Comprimento de correlação
$\eta$	$G(r) _{T_c} \sim 1/ r ^{d-2+\eta}$	Função de correlação magnética
$z$	$\tau \sim \xi^z$	Tempo de relaxação

Tabela 2.1: Tabla magnetismo

Expoente crítico	lei de potência	variável termodinâmica
$\alpha$	$C_V _{n_c} \sim  t ^{-\alpha}$	Calor específico
$\beta$	$n_\ell - n_g \sim (-t)^{-\beta}$	Diferença de densidades líquido/gás
$\gamma$	$\kappa_T \sim  t ^{-\gamma}$	Compressibilidade
$\delta$	$n_\ell - n_g _{T_c} \sim  \tilde{p} ^{1/\delta}$	Pressão no ponto crítico
$\nu$	$\xi \sim  t ^{-\nu}$	Comprimento de correlação
$\eta$	$G(r) _{T_c} \sim 1/ r ^{d-2+\eta}$	Função de correlação de densidade
$z$	$\tau \sim \xi^z$	Tempo de relaxação

Tabela 2.2: Tabla fluido simples

e as variáveis externas  $h \leftrightarrow \tilde{p}$ . Mas, o mais impressionante deste resultado é que os valores numéricos obtidos para os expoentes são exatamente os mesmos !!! Este fato é um exemplo de *universalidade*. Ou seja dois sistemas completamente diferentes do ponto de vista microscópico se comportam de forma idêntica perto de um ponto crítico.

Nos próximos capítulos vamos aprofundar mais em esta ideia tentando entender os motivos pelo qual este fenômeno ocorre. Para fazer isto temos que recorrer a um tratamento mais microscópico, dado pela mecânica estatística onde veremos com mais clareza as limitações da teoria de Landau.

## Exercícios

1. Considere a densidade energia livre de Landau dada por

$$f = \frac{1}{2}r_1 \phi_1^2 + \frac{1}{2}r_2 \phi_2^2 + u_1 \phi_1^4 + u_2 \phi_2^4 + u_{12} \phi_1^2 \phi_2^2$$

com  $r_1 = a(T - T_1) = r - g$ ,  $r_2 = a(T - T_2) = r + g$  e  $u_1$ ,  $u_2$  e  $u_{12}$  quantidades positivas. Mostrar que

a) para  $u_1 u_2 < u_{12}$  existem apenas três fases onde uma linha de primeira ordem encontra duas de segunda ordem num ponto bicrítico (figura a)).

b) para  $u_1 u_2 > u_{12}$  existem quatro fases no diagrama de fases, separadas por transições de segunda ordem que se encontram em um ponto tetracrítico como mostrado na parte b) da figura 2.28.

Um tratamento completo deveria verificar que cada fase tem a menor energia livre localmente estável.

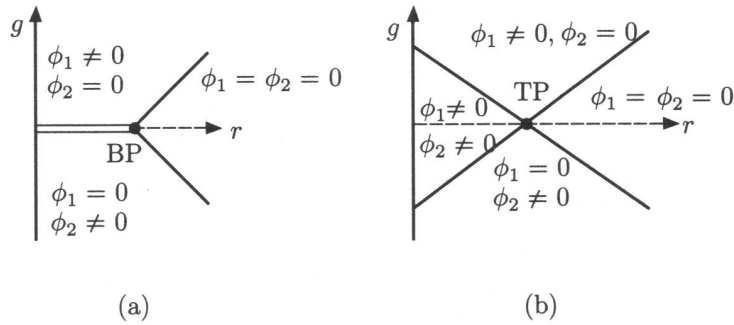


Figura 2.28: a)  $u_1 u_2 < u_{12}$ , a linha dupla indica uma transição de primeira ordem enquanto que as linhas contínuas são de segunda ordem. b)  $u_1 u_2 > u_{12}$ , todas as transições são de segunda ordem.

2. Considere um antiferromagneto, cujo parâmetro de ordem é a “magnetização alternada” (*staggered magnetization*),  $m_s$ . O campo magnético externo não acopla com o parâmetro de ordem mas com a magnetização  $m$ . Considere que o acoplamento entre  $m$  e  $m_s$  é dado por

$$f = \frac{1}{2}r m_s^2 + u m_s^4 + \frac{1}{2}r_m m^2 - h m + \frac{1}{2}w m_s^2 m^2$$

onde  $r = a(T - T^*)$ ,  $w > 0$  e  $r_m > 0$  independem da temperatura.

Mostrar que este modelo tem um ponto tricrítico à temperatura  $T_t$  e campo magnético  $h_t$  dados por

$$T_t = T^* - \frac{2ur_m}{aw}$$

$$h_t^2 = \frac{2ur_m^3}{w^2}$$

Mostrar que o diagrama de fases é similar ao da figura 2, onde a transição de segunda ordem para  $h < h_t$  é

$$T_c = T_t - \frac{wh^2}{ar_m^2}\eta$$

e a transição de primeira ordem para  $h > h_t$  para  $|h - h_t|$  pequeno é

$$T_c = T_t - \frac{wh^2}{ar_m^2}\left(\eta - \frac{1}{4}\eta^2\right)$$

onde  $\eta = 1 - (h_t^2/h^2)$ .

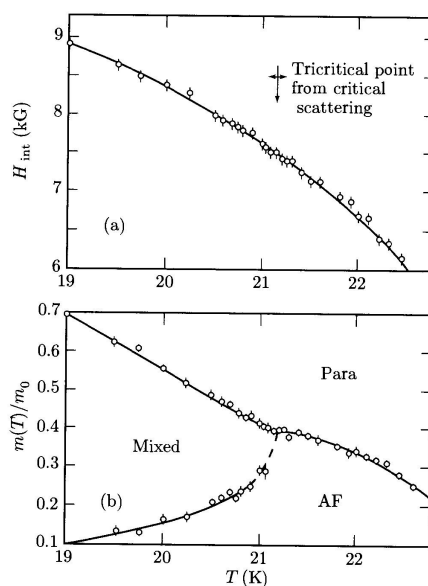


Fig. 4.6.4. Phase diagrams for the metamagnet  $\text{FeCl}_2$  in (a) the internal field-temperature plane and (b) the magnetization-temperature plane. The lines in these curves are guides to the eye. [R.J. Birgeneau, G. Shirane, M. Blume, and W.C. Koehler, *Phys. Rev. Lett.* 33, 1100 (1974).]

Figura 2.29:

3. a) Considere o parâmetro de ordem nemático em **duas dimensões**

$$Q_{ij} = S \left( n_i n_j - \frac{1}{2} \delta_{ij} \right)$$

onde  $n_i$  são as componentes do vetor unitário  $\hat{n}$  (chamado diretor).

Construa a energia livre de Landau para esse parâmetro de ordem e demonstre que a transição de fase isotrópica-nemática em duas dimensões é de segunda ordem (e não de primeira como em três dimensões).

- b) Mostre que, neste caso, é possível reescrever o parâmetro de ordem como um número complexo, sendo

$$Q = S e^{i2\theta}$$

Mostrar que o parâmetro de ordem é invariante perante uma rotação de ângulo  $\pi$ . Faça-lo na representação tensorial e a representação complexa. Construa a energia livre (com a representação complexa) e mostre que é a mesma que usando o parâmetro de ordem tensorial.

4. Considere a transição de fase isotrópica-nemática (em três dimensões) perto do ponto especial onde o coeficiente da potência cúbica é zero (ponto de Landau).

Considere a possibilidade de ter uma fase nemática biaxial e uniaxial usando o parâmetro de ordem

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3}S & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3}S + \eta & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{3}S - \eta \end{pmatrix}$$

Mostre que duas linhas de primeira ordem e duas de segunda ordem se encontram no ponto de Landau. De um lado do ponto de Landau existe uma transição de primeira ordem de um líquido isotrópico para uma fase com  $S > 0$ . Do outro lado acontece a mesma coisa mas a transição é para um estado com  $S < 0$ . As duas linhas de segunda ordem encerram uma fase biaxial onde tanto  $S$  quanto  $\eta$  são diferentes de zero.

5. Considere o modelo vetorial  $O(n)$ . O parâmetro de ordem é um vetor  $\vec{\phi}$  num espaço  $n$ -dimensional  $R^n$ . Escreva a energia livre de Landau impondo que ela deve ser invariante perante rotações.

Mostre que a transição de fase é do mesmo tipo que o modelo de Ising onde  $n = 1$ . Estude a suscetibilidade na fase ordenada  $\vec{\phi} = (1, 0, 0, \dots, 0)$ . Mostre que, mesmo sendo uma fase ordenada, a suscetibilidade nem sempre é uma lei exponencial (dependendo da direção do campo externo aplicado). Existem direções nas quais

a correlação é uma lei de potências. Em outras palavras, o comprimento de correlação é anisotrópico, sendo infinito para algumas direções e finito para outras. Este comportamento é típico de uma quebra espontânea de simetria contínua. Os modos cujo comprimento de correlação é infinito na fase ordenada (longe do ponto crítico) são chamados de “modos de Glodstone”. Represente estes modos num diagrama de energia para o caso  $O(2)$ . Este modelo é popularmente conhecido como modelo  $XY$ .

# Capítulo 3

## Abordagem microscópica

O marco teórico para o estudo de sistemas termodinâmicos do ponto de vista microscópico é a mecânica estatística. A ferramenta básica desta teoria é a função de partição

$$Z = \text{Tr} \left( e^{-\beta H} \right) \quad (3.1)$$

onde  $\beta = 1/(k_B T)$ , e  $H$  é o hamiltoniano do sistema. O  $\text{Tr}$  significa somar sobre todos os estados acessíveis do sistema.

A partir desta função a energia livre pode ser calculada como

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (3.2)$$

O problema de esta abordagem é que para qualquer hamiltoniano  $H$  razoavelmente realista é impossível fazer o cálculo da função de partição  $Z$ . Por este motivo recorreremos a modelos simples que tentem capturar a os graus de liberdade básicos que descrevem o sistema. Mesmo assim, a função de partição não pode ser calculada exatamente para a maioria dos modelos simples.

Então, qual a chance de descrever um material real, a partir de modelos simples via o cálculo da função de partição? No estudo dos fenômenos críticos somos auxiliados pelo conceito de *universalidade*, o que permitiria a descrição de sistemas *reais* em termo de modelos muito simples. Esta conexão é a ideia essencial do grupo de renormalização.

### 3.1 Modelos simples

Nesta seção descreveremos alguns modelos muito simples que aspiram a descrever sistemas reais.

#### 3.1.1 O modelo de Ising

O comportamento magnético em um sólido é extremamente complicado se quisermos fazer uma descrição microscópica. O magnetismo se origina nos átomos cujo momento

magnético é, principalmente, uma combinação dos momentos magnéticos orbitais e de spin dos elétrons. Considere que queremos descrever um material ferromagnético como por exemplo Fe ou Ni. Um modelo simplificado para descrever esses materiais é pensar que cada átomo tem um momento magnético localizado ao que usualmente chamamos de “spin”. Do ponto de vista teórico poderíamos considerar então operadores de spin quânticos  $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$  (onde  $\vec{\sigma}$  são as matrizes de Pauli), localizados numa certa rede. Note que isto já é uma simplificação enorme. Em princípio estamos focando em spin 1/2, por esse motivo a escolha das matrizes de Pauli. Por outro lado, estamos simplificando a complexidade de um átomo em apenas seu spin resultante, supondo que esse spin não é modificado pela interação entre átomos.

Em termo desses graus de liberdade podemos escrever um hamiltoniano para representar a energia do sistema. Cada spin acopla com um campo magnético externo de forma linear,  $\vec{B} \cdot \vec{S}$ . Além disso, podemos supor que cada spin interage com seus vizinhos. Podemos escrever um hamiltoniano quadrático como,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{8} \sum_{r,r'} J(r,r') \vec{\sigma}(r) \cdot \vec{\sigma}(r') - \frac{\hbar\mu}{2} \vec{B} \cdot \sum_r \vec{\sigma}(r) \quad (3.3)$$

onde  $J(r,r')$  é a energia de interação entre dois spins situados nas posições  $r$  e  $r'$  de uma rede. Se  $J > 0$ , o acoplamento é ferromagnético já que dois spins alinhados tendem a baixar a energia. Se por sua vez,  $J < 0$ , o acoplamento é antiferromagnético já que a energia é minimizada por uma configuração de spins antialinhados. Este modelo é o chamado modelo de Heisenberg quântico. Uma propriedade importante desse modelo é sua simetria. Ele é invariante se rotarmos todos os spins um certo ângulo. Como o spin é um operador vetorial, o produto escalar garante que o hamiltoniano será também um escalar. Desta forma, o hamiltoniano de Heisenberg é invariante perante transformações do grupo  $O(3)$  (grupo ortogonal de de três parâmetros).

Se a temperatura crítica deste modelo  $T_c$  não for muito baixa, as flutuações quânticas perto do ponto crítico são muito menores que as flutuações térmicas. Neste caso, o sistema pode ser descrito por um hamiltoniano muito mais simples

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{r,r'} J(r,r') \vec{S}(r) \cdot \vec{S}(r') - \mu \vec{B} \cdot \sum_r \vec{S}(r) \quad (3.4)$$

onde  $\vec{S}$ , é um vetor clássico em  $R^3$ . Este é o modelo de Heisenberg clássico. Por uma questão de costume chamaremos à variável  $\vec{S}$  de *spin*, porém, deve ser lembrado que isto é um abuso da linguagem já que não existem “spines” clássicos. Note que este hamiltoniano clássico é muito mais simples que o quântico, já que o espaço de configurações é descrito apenas por vetores de modulo constante em 3 dimensões, e não por operadores em um espaço de Hilbert. Porém, a simetria do modelo clássico é exatamente a mesma que o modelo quântico. Ele é invariante perante o grupo  $O(3)$ .

Tem materiais que pelas sua estrutura tem alguma anisotropia. Dessa forma existem direções preferenciais para o alinhamento do momento magnético. Nesse caso,

poderíamos fazer mais uma aproximação. Consideremos por exemplo uma anisotropia muito grande (a rigor infinito). Nesse caso os spins vão se alinhar com o eixo de anisotropia. Chamando esse eixo de  $z$ , temos que os spins poderão tomar valores  $S_z = \pm 1$ . Ou seja, alinhado ou anti-alinhado com o eixo da anisotropia. Neste caso o hamiltoniano fica escrito como

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{r,r'} J(r,r') S(r)S(r') - \mu B \sum_r S(r) \quad (3.5)$$

Este modelo é muito mais simples que o modelo de Heisember e, de fato, tem uma física completamente diferente. O motivo é que sua simetria mudou dramaticamente. O hamiltoniano (3.5) tem simetria discreta  $Z_2$ , ou seja, em ausência de campo magnético externo, ele é invariante perante a transformação  $S(r) \rightarrow -S(r)$ . Esse modelo é chamado de modelo de Ising.

### 3.1.2 Fluidos simples

Vamos modelar um fluido simples como um conjunto de  $N$  partículas localizadas nas posições  $r_1, \dots, r_N$ , submetidas a um potencial de interação  $V(r_1, \dots, r_n)$  o qual será considerado de dois corpos. O potencial é atrativo no longo alcance e repulsivo no curto alcance. A função de partição grande canônica é dada por

$$Z = \sum_N \frac{\eta^N}{N!} \int dr_1 \dots dr_N e^{-\beta \sum_{i<j} V(r_i-r_j)} \quad (3.6)$$

onde  $\eta$  é a fugacidade e controla o valor medio do número de partículas.

Consideremos agora o modelo em uma rede. Ou seja, supomos que cada partícula pode ocupar um vértice de uma rede arbitraria. Este modelo é chamado de modelo de “gás na rede”. Uma variavel conveniente para descrever a densidade do gás é o número de ocupação  $n(r)$ , definido como

$$n(r) = \begin{cases} 0 & \text{se não existe nenhuma partícula na posição } r \\ n & \text{se existem } n \text{ partículas na posição } r \end{cases} \quad (3.7)$$

A aproximação forte é a seguinte, se considerarmos que o potencial repulsivo de curto alcance é muito forte, podemos impor que em cada sitio da rede pode haver apenas uma partícula. Neste caso o número de ocupação pode ter apenas dois valores,

$$n(r) = \begin{cases} 0 & \text{se não existe nenhuma partícula na posição } r \\ 1 & \text{se tiver uma partículas na posição } r \end{cases} \quad (3.8)$$

Em função do número de ocupação, a função de partição (3.6) toma a forma

$$Z = \sum_{n=0,1} \eta^{\sum_r n(r)} e^{2\beta \sum_{r,r'} J(r,r') n(r)n(r')} \quad (3.9)$$

Onde  $J(r, r')$  é a parte do potencial atrativo de longo alcance.

Finalmente podemos escrever a função de partição de uma forma mais familiar, introduzindo a variável  $S(r) = 2n(r) - 1$ . Quando  $n(r) = 0, 1$  a variável  $S$  toma valores  $S = -1, 1$ . Quer dizer,  $S(r) = 1$  significa que tem uma partícula na posição  $r$  e  $S = -1$  significa que o sitio  $r$  está vazio. Substituindo esta variável em (3.9) obtemos

$$Z = Tr e^{\frac{\beta}{2} \sum_{r,r'} J(r,r') S(r)S(r') - B \sum_r S(r)} \quad (3.10)$$

onde

$$B = \frac{1}{2} k_b T \ln \eta + \sum_{r'} J(r, r') \quad (3.11)$$

Este modelo é completamente equivalente ao modelo de Ising na presença de um campo magnético externo  $B$ , dado pela eq. (3.11). Vemos que em geral, o fluido não possui a simetria  $S \rightarrow -S$ . Porém, a simetria  $Z_2$  emerge na criticalidade ( $B = 0$ ).

## 3.2 O modelo de Ising em uma dimensão: solução exata

O modelo de Ising é um dos modelos mais simples a ser considerados que permitem descrever uma transição de fase. Mesmo com sua simplicidade ele não pode ser resolvido para dimensão  $d = 3$  ou maior. As únicas soluções exatas conhecidas são para o modelo unidimensional  $d = 1$  e o modelo bidimensional  $d = 2$  com campo magnético externo zero  $B = 0$ . Vamos mostrar o resultado da energia livre para o modelo unidimensional.

O hamiltoniano de Ising em uma dimensão e com acoplamento a primeiros vizinhos, na ausência de campo externo pode ser escrito como

$$H = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} \quad (3.12)$$

O índice  $i$  indica o sitio da rede unidimensional. Em cada sitio temos uma variável binária que pode tomar valores  $\pm 1$ .  $J > 0$  é a constante de acoplamento ferromagnética entre primeiros vizinhos. A função de partição pode ser escrita como

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{\frac{J}{k_b T} \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1}} = \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^{N-1} e^{K S_i S_{i+1}} \quad (3.13)$$

onde definimos a constante  $K = J/(k_b T)$  e

$$\sum_{\{S_i\}} = \sum_{s_1=-1,1} \sum_{s_2=-1,1} \dots \sum_{s_N=-1,1} \quad (3.14)$$

Observando que  $S_i S_{i+1}$  apenas pode tomar os valores  $\pm 1$ , podemos rescrever as funções  $\{e^K, e^{-K}\}$  em uma base de funções hiperbólicas  $\{\sinh K, \cosh K\}$ . É simples verificar,

$$e^{K S_i S_{i+1}} = \cosh K (1 + S_i S_{i+1} \tanh K) \quad (3.15)$$

com esta substituição a função de partição fica

$$Z = (\cosh K)^{N-1} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^{N-1} (1 + S_i S_{i+1} \tanh K) \quad (3.16)$$

A vantagem dessa equação é que as variáveis dinâmicas  $S_i$  são escritas de forma polinomial e não mais num expoente. O produtório pode ser reescrita em termos com potências da  $\tanh K$ . Esquemáticamente

$$\begin{aligned} & \prod_{i=1}^{N-1} (1 + S_i S_{i+1} \tanh K) = 1 + \tanh K \sum_i S_i S_{i+1} \\ & + (\tanh K)^2 \sum (SSSS) + (\tanh K)^3 \sum (SSSSSS) \\ & + \dots \end{aligned} \quad (3.17)$$

onde as somas  $\sum (SSSS)$  indicam a soma do produto de todos os pares consecutivos possíveis. A equação (3.17) é uma expansão em altas temperaturas, já que para  $k_B T \gg J$ ,  $K \ll 1$  e portanto  $\tanh K \sim K \ll 1$ .

Para fazer o cálculo explicitamente, podemos representar a expansão de forma gráfica, representado com um "elo" cada par de spins consecutivos. A ideia é que em cada termo da expansão, somamos sobre todas as configurações com um número fixo de elos possíveis. Consideremos, por exemplo, o termo com potência seis. Um dos termos da soma poderia ser

$$(\tanh K)^6 (S_2 S_3) (S_4 S_5) (S_5 S_6) \quad (3.18)$$

como indicado no diagrama da figura 3.1 Cada elo é representado pela linha obscura

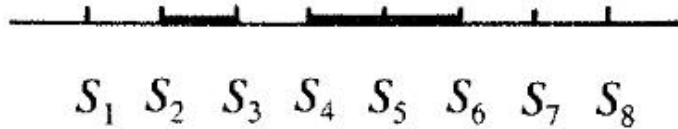


Figura 3.1: Termo de três pares que contribui à expansão da função de partição em potências de  $\tanh K$

que une dois spins consecutivos. Estes termos têm que ser somados sobre todas as configurações possíveis dos spins. Se focarmos apenas em um par, vemos que

$$\sum_{S_2} \sum_{S_3} (S_2 S_3) = (1)(1) + (-1)(-1) + (1)(-1) + (-1)(1) = 0. \quad (3.19)$$

Observamos que isto vai acontecer sempre que somemos sobre um spin conectado com apenas um elo. A única forma que a soma seja diferente de zero é que cada spin

esteja conectado com um número par de elos, 0 ou 2 no presente caso unidimensional. Portanto, a soma sobre configurações de cada termo da expansão em potências é zero. Isto significa que o único termo que contribui na expansão da função de partição é constante (potência zero  $(\tanh K)^0$ ).

O resultado da função de partição é

$$Z = 2^N (\cosh K)^{N-1} \quad (3.20)$$

Este resultado é notável. É um dos poucos casos em que a função de partição pode ser somada de forma exata. Por outro lado, o resultado é muito simples. A partir dessa expressão, a energia livre é

$$F(T, N) = -k_B T \ln \left( 2^N [\cosh K]^{N-1} \right) \quad (3.21)$$

Podemos observar que esta função é uma função analítica da temperatura. Esse resultado é esperado já que num sistema físico finito, isto é, com um número finito de graus de liberdade, não existem transições de fase. Se quisermos estudar possíveis transições, temos que calcular a densidade de energia livre por spin, para depois fazer o limite termodinâmico

$$f(T) = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{k_B T}{N} \ln Z \quad (3.22)$$

obtendo

$$f(T) = -k_B T \ln \left( 2 \cosh \left[ \frac{J}{k_B T} \right] \right) \quad (3.23)$$

Novamente, é importante notar que conseguimos calcular de forma exata a energia livre de um modelo microscópico particular no limite termodinâmico. Observamos que  $f(T)$  dada pela equação (3.23) é uma função analítica da temperatura  $T$ , exceto em  $T = 0$ . Isto indica que o modelo de Ising unidimensional não tem transição de fase. Em outras palavras, o sistema apenas se ordena de forma ferromagnética a temperatura zero. Qualquer flutuação térmica, mesmo infinitesimal desordena o sistema.

Por um lado, conseguimos formular um modelo simples de magnetismo que pode ser resolvido de forma exata. Por outro lado, o sistema não apresenta transições de fase. Nesse sentido, o resultado é decepcionante, já que este modelo não possui a física que nos propusemos estudar que é a transição de fase ferromagnética/paramagnética. A não existência de transições no modelo de Ising unidimensional é um caso especial de um teorema mais geral devido a Pierls, que estabelece que nenhum sistema unidimensional com interações de alcance finita pode sofrer quebra espontânea de simetria.

Para entender melhor a natureza da fase descrita por este modelo, podemos calcular a função de correlação

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} S_i S_j e^{\frac{J}{k_B T} \sum_{\ell=1}^{N-1} S_\ell S_{\ell+1}} \quad (3.24)$$

A técnica de cálculo é completamente análoga à usada para calcular a função de partição. Expandindo o exponencial em termos de funções hiperbólicas,

$$\langle S_i S_j \rangle = (\cosh K)^{N-1} \sum_{\{S_\ell\}} S_i S_j \prod_{\ell=1}^{N-1} (1 + S_\ell S_{\ell+1} \tanh K) \quad (3.25)$$

Vemos, da mesma forma que no cálculo da função de partição, os únicos termos não nulos são aqueles que tem um número par de elos saindo de cada spin. Neste caso, apenas temos que associar um elo fixo ao par externo  $S_i S_j$ . Não é difícil perceber que os únicos termos que contribuem são aqueles com potência  $|i - j|$ , ou seja a distância na rede entre os spins  $S_i$  e  $S_j$  para os quais estamos calculando a função de correlação. Obtemos desta forma,

$$\langle S_i S_j \rangle = (\tanh K)^{|i-j|} = e^{-|i-j| \ln \tanh K} \quad (3.26)$$

Reestabelecendo as unidades, considerando o distância mais próxima entre spins como sendo  $a$  (parâmetro de rede), obtemos

$$\langle S_i S_j \rangle = e^{-\frac{|r_i - r_j|}{\xi}} \quad (3.27)$$

onde identificamos o comprimento de correlação

$$\xi(T) = \frac{a}{\left| \ln \tanh \frac{J}{k_B T} \right|} \quad (3.28)$$

Vemos que o comprimento de correlação é finito para  $T \neq 0$ , o que indica que a fase é desordenada para qualquer temperatura finita. Apenas para o estado fundamental  $T = 0$ ,  $\xi \rightarrow \infty$ , indicando um estado ordenado.

### 3.3 Aproximação de campo médio

O cálculo do traço na função de partição muito poucas vezes pode ser feito. Na seção anterior vimos um exemplo onde isso ocorre. Também conhecemos a solução exata, devida a Onsager, do modelo de Ising em duas dimensões sem campo magnético externo. Porém, para qualquer número de dimensões não existe solução exata mesmo nesse modelo tão simples. Precisamos então algum tipo de técnica para aproximar a função de partição tentando obter a física relevante do sistema. Nesta seção apresentamos uma dessas técnicas chamada *aproximação de campo médio*. Por motivos didáticos usaremos o exemplo do modelo de Ising para descrever a técnica, porém, ela é completamente geral e pode ser usada para qualquer modelo.

Começamos considerando a função de partição do modelo de Ising

$$Z = \text{Tr} e^{\frac{1}{2}\beta \sum_{r,r'} J(r,r') S(r)S(r') + \beta B \sum_r S(r)} \quad (3.29)$$

onde como sempre  $\beta = 1/(k_B T)$ ,  $B$  é o campo magnético externo e  $J(r - r')$  é uma interação de curto alcance entre sítios de uma rede  $r$  e  $r'$ . A variável discreta  $S(r)$  pode tomar apenas os valores  $\pm 1$ .

O problema para o cálculo do traço reside no termo quadrático  $JSS$ . A ideia é linearizar este termo para poder calcular o traço de forma direta tentando capturar a física essencial (que é a presença ou não de uma transição de fase).

A magnetização local do sistema vem dada por  $M(r) = \langle S(r) \rangle$  e se o sistema se ordena ferromagneticamente podemos supor que esta magnetização independe da posição  $M = \langle S(r) \rangle$ . A magnetização total será então  $MN$  onde  $N$  é o número de sítios da rede.

Escrevemos a identidade

$$S(r) = M + S(r) - M = M + \delta S(r) \quad (3.30)$$

onde definimos a flutuação  $\delta S(r) = S(r) - M$ . Em outras palavras,  $\delta S$  mede quanto se afasta o valor da variável  $S(r)$  do seu valor médio  $M = \langle S(r) \rangle$ . A ideia da aproximação é substituir esta identidade no termo quadrático e reter apenas termos lineares em  $\delta S$ , ou seja, desprezar flutuações de ordem  $(\delta S(r))^2$ . A acurácia dessa aproximação será analisada a posteriori. Desta forma, escrevemos

$$\begin{aligned} S(r)S(r') &= [M + \delta S(r)][M + \delta S(r')] \\ &\sim M^2 + M\delta S(r) + M\delta S(r') + O((\delta S)^2) \end{aligned} \quad (3.31)$$

Substituindo esta expressão no hamiltoniano  $\mathcal{H}$  obtemos

$$\begin{aligned} \beta\mathcal{H} &\sim \frac{1}{2}\beta \sum_{r,r'} J(r-r') (M[S(r) + S(r')] - M^2) + \beta B \sum_r S(r) \\ &\sim -\frac{1}{2}N\beta JM^2 + \beta (JM + B) \sum_r S(r) \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde definimos a constante de acoplamento  $J = \sum_{r,r'} J(r-r')$  e  $N$  é o número total de sítios da rede. Vemos que o primeiro termo é uma constante e o segundo é linear em  $S(r)$ . Substituindo na função de partição obtemos

$$Z = e^{-\frac{1}{2}N\beta JM^2} \sum_{\{S(r)\}} e^{\beta(JM+B)\sum_r S(r)} \quad (3.33)$$

Como o expoente é linear, agora fica facilmente fatorizável como

$$Z = e^{-\frac{1}{2}N\beta JM^2} \sum_{\{S(r)\}} \prod_r e^{\beta(JM+B)S(r)} \quad (3.34)$$

e como a variável  $S(r)$  apenas pode tomar os valores  $\pm 1$ , a soma sobre configurações pode ser feita de forma direta, obtendo,

$$Z \sim e^{-\frac{1}{2}N\beta JM^2} [2 \cosh (JM + B)]^N \quad (3.35)$$

A partir deste resultado é simples calcular a energia livre por spin na aproximação de campo médio

$$f_{\text{CM}}(T, M, B) = \frac{1}{2}JM^2 - \frac{1}{\beta} \ln \cosh \beta (JM + B) \quad (3.36)$$

É importante fazer algumas observações sobre essa energia livre. Primeiro, ela não depende do número de dimensões do espaço. Isto é comum a qualquer aproximação de campo médio. Uma observação importante é que, a princípio, não fizemos nenhuma aproximação na temperatura nem no campo magnético, portanto ela poderia descrever todo o diagrama de fases e não apenas a vizinhança do ponto crítico como a teoria de Landau. Também, observamos da equação (3.36) que a energia encontrada é função de três variáveis,  $T, M, B$ . Porém, como sabemos, a energia livre não pode depender do campo magnético e a magnetização simultaneamente, pois elas são variáveis conjugadas. Na verdade, a magnetização foi introduzida pela definição  $M = \langle S \rangle$  o que implica que ela não deve ser considerada uma variável independente, mas como uma função do campo magnético e a temperatura,  $M \equiv M(T, B)$ . Para obter a magnetização devemos usar a equação de estado

$$M(T, B) = \left. \frac{\partial f_{\text{CM}}}{\partial B} \right|_T \quad (3.37)$$

Desta forma obtemos a equação de campo médio

$$M = \tanh \beta (JM + B) \quad (3.38)$$

Outra forma alternativa de obter a mesma equação, é considerar que  $M$  é um campo médio auxiliar que foi introduzido na aproximação e deve ser escolhido com o valor que minimiza a energia livre considerando  $B$  e  $T$  constantes;  $\partial f_{\text{CM}} / \partial M = 0$ . Essa condição leva à mesma equação de campo médio (3.38).

A equação de campo médio é uma equação transcendental que dever ser resolvida, em princípio, numericamente. É possível ganhar intuição sobre esta equação se invertemos ela da seguinte forma

$$\beta JM + \beta B = \text{arctanh}(M) \quad (3.39)$$

Podemos tentar resolver esta equação de forma gráfica. As soluções para  $M$  serão os pontos de interseção das curvas

$$y_1(M) = \beta B + \beta JM \quad (3.40)$$

$$y_2(M) = \text{arctanh}(M) \quad (3.41)$$

A função  $y_2$  não tem parâmetros, então pode ser desenhada de forma unívoca, enquanto que a função  $y_1$  é uma reta. O campo magnético externo determina o termo independente da reta; ou seja, onde a reta corta o eixo  $y$ . O parâmetro  $\beta J$  controla a inclinação da reta. Variando convenientemente os parâmetros  $B, \beta$  podemos construir o diagrama de fases de campo médio que coincide com o diagrama da figura (1.3).

Consideremos por exemplo o caso de  $B > 0$ . Para temperaturas altas  $J\beta < 1$  e a inclinação da reta é menor que  $\pi/4$ . Nesse caso, o ponto de interseção entre  $y_1(M) = y_2(M)$  é único. Temos uma magnetização positiva induzida pelo campo magnético  $B$ , sendo a fase paramagnética. Reduzindo o campo magnético mantendo a temperatura constante, a reta é abaixada com inclinação constante e é fácil verificar

que a interseção continua sendo única, e muda de sinal quando o campo  $B$  muda de sinal. Ou seja, não tem diferença de fases nesta região. Estas soluções estão indicadas na figura 3.2

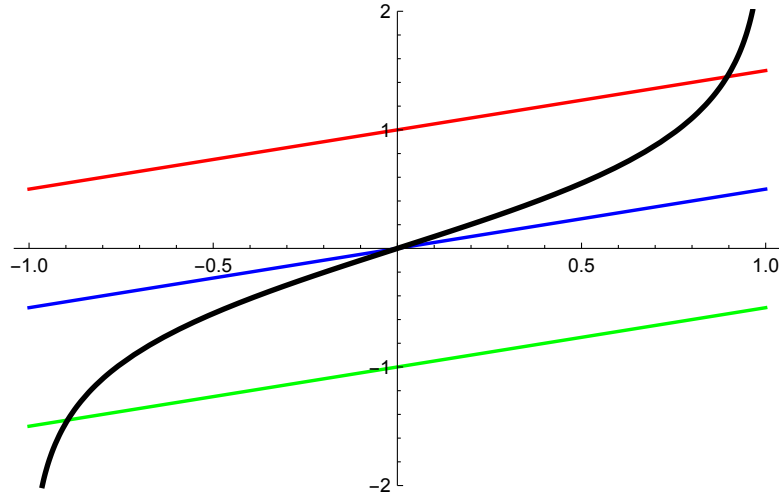


Figura 3.2: Solução gráfica da equação 3.39, na fase de alta temperatura. Os parâmetros foram fixados  $\beta J = 0.5$

Consideremos agora o caso de temperatura baixa  $\beta J > 1$ . Neste caso, para um campo magnético suficientemente alto, a interseção das curvas fornece apenas uma solução para  $M > 0$ . Conforme abaixamos o campo magnético aparece um valor para o campo  $B^*$  onde a função  $y_1$  interseca à  $y_2$  em dois pontos,  $M_1 > 0$  e  $M_2 < 0$ , de tal forma que  $|M_2| < |M_1|$ . É simples comprovar que  $f_{CM}(M_2) > f_{CM}(M_1)$ , ou seja  $M_1$  é o mínimo global (a verdadeira magnetização) enquanto que  $M_2$  é um mínimo local, ou seja um estado meta-estável. Diminuindo o campo magnético a situação se mantém igual até o campo atingir o valor zero. Neste momento temos três soluções,  $M_1, 0, -M_1$  todas com a mesma energia, sendo  $M_1, -M_1$  mínimos degenerados e  $M = 0$  um máximo. Diminuindo ainda mais o campo magnético para valores negativos, voltamos a ter dois interseções, porém, o mínimo absoluto passa do valor positivo ao negativo. Isto caracteriza a linha de primeira ordem descrita no diagrama de fases da figura (1.3). Analisamos a estrutura dessas soluções na figura 3.3.

É instrutivo também analisar o gráfico da figura 3.4 para  $B = 0$  em função da temperatura. Para  $\beta J < 1$  o único ponto de interseção é  $M = 0$  indicando a fase desordenada (paramagnética) do sistema. Conforme abaixamos a temperatura a valores  $\beta J > 1$  começamos a observar a aparição de duas soluções simétricas. Essas soluções aparecem de forma contínua no ponto crítico  $\beta_c J = 1$  dado que  $y_2'(0) = 1$ . Portanto, temos uma transição de fase contínua em  $k_B T_c = J$  e  $B = 0$  ((1.3)).

Dessa forma, a equação de campo médio (3.38) descreve corretamente a topologia do diagrama de fases descrito na figura 1.3 e ainda nos fornece um valor para a temperatura

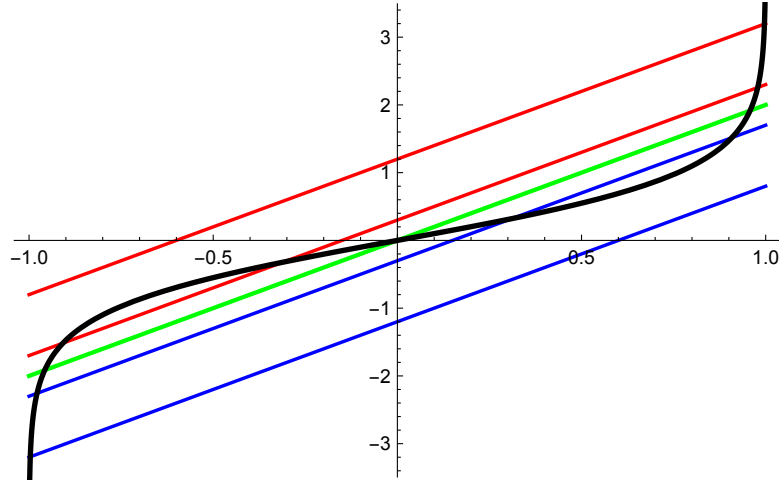


Figura 3.3: Solução gráfica da equação 3.39, na fase de baixa temperatura. Os parâmetros foram fixados  $\beta J = 1.5$

crítica  $T_c = J/k_B$ . Notamos que na aproximação de campo médio, a energia térmica no ponto crítico,  $k_B T_c$  coincide com a energia de interação entre spins  $J$ , que é o único parâmetro do hamiltoniano com unidades de energia.

Para calcular a dependência da magnetização com a temperatura perto do ponto crítico observamos que perto desse ponto  $M \ll 1$ . Expandindo a função  $\text{arctgh}$  em série de Taylor

$$\text{arctanh}(M) \sim M + \frac{1}{3}M^3 + O(M^5) \quad (3.42)$$

obtemos uma aproximação da equação de campo médio perto do ponto crítico

$$M \sim (1+t)\left(M + \frac{1}{3}M^3\right) \quad (3.43)$$

onde definimos a temperatura reduzida  $t = (T - T_c)/T_c$ . Resolvendo, achamos

$$M \sim t^{1/2} \quad (3.44)$$

Ou seja, obtemos  $\beta = 1/2$ , o mesmo expoente crítico que a teoria de Landau.

O mesmo tipo de aproximação pode ser realizado na energia livre  $f_{\text{CM}}$  da equação (3.36). Expandindo a função  $\ln \cosh$  obtemos

$$f_{\text{CM}} \sim a + btM^2 + cM^4 + dHM. \quad (3.45)$$

onde  $a, b, c, d$  são constantes que não dependem de  $T$ . Vemos que a energia livre de campo médio perto do ponto crítico tem exatamente a mesma estrutura que a teoria de Landau. Portanto os expoentes críticos são os mesmos,  $\beta = 1/2, \gamma = 1, \delta = 3$ .

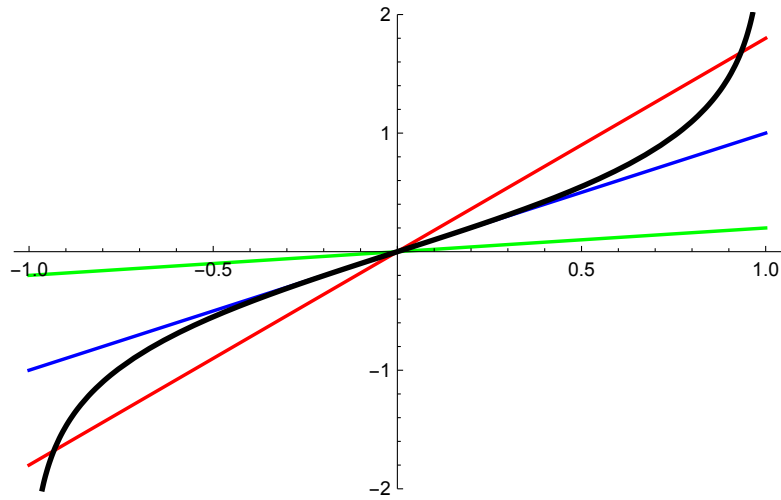


Figura 3.4: Solução gráfica da equação 3.39, na fase de baixa temperatura. Os parâmetros foram fixados,  $B = 0$ ,  $\beta J = 1.5$

Desses resultados observamos o seguinte: a aproximação de campo médio descreve bem a topologia do diagrama de fases. Ou seja, a aproximação pode ser usada para calcular observáveis em qualquer região, não apenas perto do ponto crítico. Perto do ponto crítico ela reproduz os mesmos expoentes críticos que a teoria de Landau. Por este motivo os expoentes críticos na aproximação de campo médio são chamados de expoentes de Landau. Esta aproximação também permitiu fazer uma estimativa da temperatura crítica em termos de propriedades microscópicas do sistema  $k_B T_c = J$ . Essa informação não é fornecida pela teoria de Landau onde a temperatura crítica entra como um parâmetro fenomenológico. Deve ser observado que a temperatura crítica não é um valor universal, ela depende do modelo específico e portanto, esperamos que tenha importantes correções ao valor de campo médio, quando a aproximação for melhorada.

Existem problemas sérios na aproximação de campo médio, o primeiro é que ela não depende da dimensionalidade do sistema. Por outro lado, já demonstramos que o modelo de Ising unidimensional não apresenta transição de fase e isso é um resultado exato. A aproximação de campo médio prediz uma transição mesmo em uma dimensão. Isto é uma contradição muito forte que nos indica que devem existir limites claros para sua aplicação. Por outro lado, o valor numérico dos expoentes críticos são conhecidos seja porque existem resultados exatos, seja por simulações numéricas. Na tabela (3.1) resumimos alguns resultados conhecidos do modelo de Ising. Vemos que o valor numérico da aproximação de campo médio é muito distante dos resultados exatos ou numéricos. Outra observação é que conforme a dimensionalidade aumenta os valores ficam mais perto dos de campo médio. Isto nos leva a pensar que quanto maior a dimensionalidade menor as flutuações ao redor do campo médio. Podemos formalizar essa intuição fazendo uma estimativa comparativa do valor das flutuações. Isto leva ao

	CM	$D = 2$	$D = 3$
$\alpha$	0	$\ln(T - T_c)$	0.110
$\beta$	1/2	0.125	0.312
$\gamma$	1	1.75	1.238
$\delta$	3	15	5

Tabela 3.1: expoentes Ising

conhecido critério de Ginzburg que descrevermos a continuação.

### 3.4 O critério de Ginzburg e a dimensão crítica superior

Para determinarmos até onde a aproximação de campo médio pode ser aplicada é necessário fazer o cálculo da função de correlação na aproximação de campo médio. Isto é, precisamos calcular

$$\langle S(r)S(0) \rangle = \frac{\text{Tr} \left( S(r)S(0) e^{\frac{1}{2}\beta \sum_{r,r'} J(r,r') S(r)S(r')} \right)}{\text{Tr} e^{\frac{1}{2}\beta \sum_{r,r'} J(r,r') S(r)S(r')}} \quad (3.46)$$

Inserindo a identidade  $1 = \delta_{S(0),+1} + \delta_{S(0),-1}$  no numerador e fazendo uso da simetria  $S(r) \rightarrow -S(r)$  para todo  $r$ , obtemos a seguinte expressão para a função de correlação.

$$\langle S(r)S(0) \rangle = \frac{\text{Tr}' \left( S(r) e^{\frac{1}{2}\beta \sum_{r,r'} J(r,r') S(r)S(r')} \right)}{\text{Tr}' e^{\frac{1}{2}\beta \sum_{r,r'} J(r,r') S(r)S(r')}} \quad (3.47)$$

onde  $\text{Tr}'$  significa a soma sobre todas as configurações possíveis, mantendo  $S(0) = 1$ . Isto permite interpretar a função de correlação como uma função resposta. Ou seja, podemos pensar que aplicamos um campo magnético local, a fim de alinhar o spin na origem na direção positiva, e queremos calcular qual é a resposta na magnetização a uma distância  $r$  da origem. Fazendo os mesmos cálculos que anteriormente, apenas levando em conta que agora que o sistema não é invariante perante translações, já que fixamos a origem, obtemos a equação de campo médio

$$M(r) = \tanh \beta \left( \sum_{r'} J(r - r') M(r') \right) \quad (3.48)$$

Na fase paramagnética, esperamos que a magnetização seja zero para distâncias superiores ao comprimento de correlação. Podemos então simplificar essa equação expandindo a  $\tanh$

$$M(r) = \beta \sum_{r'} J(r - r') M(r') + \text{correções para } r \ll \xi \quad (3.49)$$

Os termos locais com  $r \ll \xi$  podem ser aproximados por  $C\delta(r)$ . Desta forma, podemos resolver a equação (3.49) mediante o uso da transformada de Fourier

$$\tilde{M}(k) = \beta \tilde{J}(k) \tilde{M}(k) + C \quad (3.50)$$

Onde  $\tilde{M}$  e  $\tilde{J}$  são as transformadas de Fourier de  $M(r)$  e  $J(r)$  respectivamente.

Obtemos para a magnetização em espaço de momentos,

$$\tilde{M}(k) = \frac{C}{1 - \beta \tilde{J}(k)} \quad (3.51)$$

Como  $J(r)$  é de curto alcance, e estamos interessado no comportamento a grandes distâncias (pequenos momentos), podemos expandir a função  $\tilde{J}(k)$  em potências de  $k$ ,

$$\tilde{J}(k) = \tilde{J}(0) + \frac{1}{2!} \tilde{J}''(0) k^2 + \dots \quad (3.52)$$

onde o termo linear não existe para manter invariância perante rotações. Podemos escrever as constantes da expansão em termos de  $J(r)$  como

$$\tilde{J}(0) = \sum_r J(r) = J \quad (3.53)$$

e

$$\frac{1}{2!} \tilde{J}''(0) = - \sum_r r^2 J(r) . \quad (3.54)$$

Definindo o alcance meio da interação  $R$  como

$$R^2 = \frac{\sum_r r^2 J(r)}{\sum_r J(r)} , \quad (3.55)$$

a expansão de  $\tilde{J}$  fica

$$\tilde{J}(k) = J (1 - R^2 k^2) + \dots \quad (3.56)$$

Obtemos finalmente a magnetização escrita em termo de parâmetros mais intuitivos como a energia de interação entes spines  $J$  e o alcance da interação  $R$ ,

$$\tilde{M}(k) = \frac{C}{1 - \beta J (1 - R^2 k^2)} \quad (3.57)$$

Vamos usar a notação  $\tilde{G}(k)$  em vez de  $\tilde{M}(k)$ , para lembrar que é uma função resposta, ou seja é a magnetização no ponto  $r$  como consequência da aplicação de um campo na origem. Definindo a constante  $\xi = Rt^{-1/2}$ , sendo  $t$  a temperatura reduzida, obtemos uma forma mais familiar da função resposta

$$\tilde{G}(k) = \frac{CR^{-2}}{k^2 + \xi^{-2}} . \quad (3.58)$$

Realizando a antitransformada de Fourier, obtemos a função resposta no espaço de configuração,

$$G(r) = \frac{e^{-r/\xi}}{r^{\frac{d-1}{2}}} \quad (3.59)$$

onde  $d$  é a dimensão do espaço. Isto permite identificar  $\xi$  com comprimento de correlação obtendo desta forma os expoentes críticos  $\nu = 1/2$  e  $\eta = 0$ . Esses expoentes têm o mesmo valor numérico que os calculados na teoria de Landau.

Agora estamos em condições de estabelecer sob que circunstâncias a aproximação de campo médio é uma boa aproximação. No cálculo da função de partição ou a energia livre de campo médio  $f_{\text{CM}}$  temos desprezado termos de ordem quadrático na flutuações, supondo implicitamente que eram pequenos. Vamos tentar agora quantificar essa afirmação. O termo que desprezamos tem a forma

$$C^{(2)} = \sum_{r'} J(r-r') \langle \delta S(r) \delta S(r') \rangle \sim JG(0) \quad (3.60)$$

onde no último termo fizemos a aproximação que  $J$  é razoavelmente local e substituímos  $J(r) \sim J\delta(r)$ . Usando a equação (3.58) achamos que

$$C^{(2)} \sim \frac{C J}{R^2} \int \frac{d^d k}{k^2 + \xi^{-2}} \quad (3.61)$$

O interesse é achar a dependência de  $C^{(2)}$  com o comprimento de correlação. Isto pode ser feito via análise dimensional da integral. Porém tem que ser muito cuidadoso já que essa integral é divergente no regime ultravioleta. É necessário então regulariza-la, por exemplo, introduzindo um *cutoff*  $a$  da seguinte forma

$$\int_{|k|<a^{-1}} \frac{d^d k}{k^2 + \xi^{-2}} = \int_{|k|<a^{-1}} \frac{d^d k}{k^2} - \xi^{-2} \int_{|k|<a^{-1}} \frac{d^d k}{k^2(k^2 + \xi^{-2})} \quad (3.62)$$

A primeira integral é divergente, mas é uma constante, no sentido que não depende de  $\xi$  e pode ser desconsiderada. A segunda integral converge para  $d < 4$ , portanto podemos fazer nesse caso o limite  $a \rightarrow 0$ . Depois deste limite, a análise dimensional é válida já que não existe outra escala e

$$\xi^{-2} \int \frac{d^d k}{k^2(k^2 + \xi^{-2})} \sim \xi^{2-d} \int \frac{d^d z}{z^2(z^2 + 1)} \quad (3.63)$$

onde  $z$  é adimensional. Portanto

$$C^{(2)} \sim \frac{J \xi^{2-d}}{R^2}. \quad (3.64)$$

Por outro lado, o hamiltoniano de campo médio é da ordem  $\langle \mathcal{H}_{\text{CM}} \rangle \sim JM^2 \sim J t$  e lembrando que  $\xi = Rt^{-1/2}$

$$\langle \mathcal{H}_{\text{CM}} \rangle \sim \frac{JR^2}{\xi^2} \quad (3.65)$$

Para poder desprezar as flutuações quadráticas deveria acontecer que

$$C^{(2)} \ll \langle \mathcal{H}_{\text{CM}} \rangle \quad (3.66)$$

o que leva à condição (usando as equações (3.64) e (3.65))

$$\xi^{4-d} \ll R^4 \quad (3.67)$$

Esta relação estabelece uma diferença muito clara entre as dimensões  $d < 4$  e  $d > 4$ . Se  $d < 4$ , as flutuações do campo médio podem ser desprezadas se o comprimento de correlação é muito menor que o alcance típico das interações. Isto significa que a aproximação de campo médio é inaplicável perto de um ponto crítico, já que nesse caso  $\xi \rightarrow \infty$ . Para  $d > 4$ , a condição muda, já que o expoente é negativo fazendo que as flutuações sejam desprezíveis conforme nos aproximamos do ponto crítico. Portanto para  $d > 4$ , as flutuações podem ser ignoradas completamente e os expoentes críticos de Landau são exatos. Isto mostra que  $d = 4$  é uma dimensão especial no que diz respeito da aplicação da aproximação de campo médio. Essa dimensão é chamada de *dimensão crítica superior*. Para o caso do modelo de Ising ela é  $d_c = 4$ . Significa que para dimensões maiores à dimensão crítica superior, o campo médio pode ser aplicado sem problemas, obtendo bons resultados. Para dimensão inferior, o campo médio pode ser aplicado ao estudo das fases, mas não podemos nos aproximar do ponto crítico, pois nessa região as flutuações são tão grandes que fazem a aproximação inaplicável. A relação (3.67) é conhecida como o critério de Ginzburg para a aplicabilidade da aproximação de campo médio. Ela estabelece a dimensão crítica superior e, para dimensões inferiores, estabelece o regime de temperaturas onde a aproximação já não pode ser aplicada.

## 3.5 O modelo de Ising e a teoria de campos $\phi^4$

Nesta seção mostramos diferentes formas de representar a função de partição do modelo de Ising. A forma de apresentar o modelo em termos de variáveis discretas  $S_i = \pm 1$  não é única. De fato, vamos mostrar que, o mesmo modelo pode ser representado por variáveis reais  $-\infty < \phi_i < \infty$  e, na aproximação de longas distâncias, por um campo escalar real  $\phi(x)$ . Um resultado importante dessa seção é que as propriedades críticas do modelo de Ising são exatamente as mesmas que as propriedades críticas do modelo  $\lambda\phi^4(x)$  para um campo escalar real.

### 3.5.1 Integrais gaussianas e a transformação de Hubbard-Stratonovich

Antes de tratar a representação contínua do modelo de Ising, é útil lembrar algumas propriedades matemáticas básicas sobre integrais gaussianas.

O ponto de partida para entender integrais gaussianas multidimensionais é a integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}Cx^2} = \left(\frac{2\pi}{C}\right)^{1/2}. \quad (3.68)$$

com  $C > 0$ .

Consideremos agora a integral multimimensional

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_i d\phi_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i A_{ij} \phi_j} \quad (3.69)$$

$A$  é uma matriz simétrica definida positiva. Então pode ser diagonalizada com autovalores positivos.

$$Av_n = \lambda_n v_n \quad (3.70)$$

onde  $v_n$  e  $\lambda_n$  são os autovetores e autovalores de  $A$  respectivamente. Os autovetores são ortogonais e normalizados  $v_n \cdot v_m = \delta_{mn}$ . Expandindo o vetor  $\phi$  em autovetores de  $A$ ,

$$\phi = \sum_n c_n v_n, \quad (3.71)$$

a integral pode ser escrita em termos dos coeficientes da expansão como

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_i dc_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_n \lambda_n c_n^2} = \prod_n \int_{-\infty}^{\infty} dc_n e^{-\frac{1}{2} \lambda_n c_n^2} \quad (3.72)$$

e usando a equação (3.68) obtemos

$$I = \prod_n \left( \frac{2\pi}{\lambda_n} \right)^{1/2} \quad (3.73)$$

Lembrando que o produto dos autovalores de uma matriz é seu determinante  $\det A = \prod_i \lambda_i$  obtemos finalmente a fórmula

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^n d\phi_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i A_{ij} \phi_j} = (2\pi)^{n/2} \det(A)^{-1/2} \quad (3.74)$$

onde  $n$  é a ordem da matriz que, no nosso caso, é igual ao posto da matriz.

Consideremos agora a integral gaussiana multidimensional com um termo linear,

$$I_\ell = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_{i=1}^n d\phi_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i A_{ij} \phi_j + \sum_i H_i \phi_i} \quad (3.75)$$

onde as componentes do vetor  $H_i$  são números reais.

A ideia é “completar quadrados” a fim de eliminar o termo linear. Para isto introduzimos um vetor auxiliar  $C_i$  e uma constante  $B$  de tal forma que

$$-\frac{1}{2} \phi_i A_{ij} \phi_j + H_i \phi_i = -\frac{1}{2} (\phi_i - C_i) A_{ij} (\phi_j - C_j) + B. \quad (3.76)$$

comparando termo a termo obtemos

$$C_i = A_{ij}^{-1} H_j \quad B = \frac{1}{2} H_i A_{ij}^{-1} H_j \quad (3.77)$$

substituindo as equações (3.77) na equação (3.75) obtemos

$$I_\ell = e^{\frac{1}{2}H_i A_{ij}^{-1} H_j} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_i d\phi_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} (\phi_i - C_i) A_{ij} (\phi_j - C_j)} \quad (3.78)$$

fazendo a mudança de variáveis de integração  $\phi \rightarrow \phi + C$  e usando a equação (3.74)

$$I_\ell = (2\pi)^{n/2} \det(A)^{-1/2} e^{\frac{1}{2}H_i A_{ij}^{-1} H_j} = (2\pi)^{n/2} e^{-\frac{1}{2} \text{Tr} \ln A} e^{\frac{1}{2}H_i A_{ij}^{-1} H_j} \quad (3.79)$$

onde na última igualdade usamos a propriedade  $\ln \det A = \text{Tr} \ln A$ .

Usando a definição de  $I_\ell$ , podemos escrever a chamada transformação de Hubbard-Stratonovich

$$e^{\frac{1}{2}H_i A_{ij}^{-1} H_j} = \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{n/2} e^{\frac{1}{2} \text{Tr} \ln A} \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_i d\phi_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i A_{ij} \phi_j + \sum_i H_i \phi_i} \quad (3.80)$$

Esta igualdade é usada muitas vezes para “linearizar” termos quadráticos mediante o recurso de introduzir variáveis auxiliares no sistema.

### 3.5.2 Modelo contínuo

Procuramos nesta seção mostrar uma representação do modelo de Ising em termos de integrais sobre variáveis contínuas. Para isto vamos considerar as variáveis de spin  $S_i$  como variáveis contínuas podendo tomar valores reais no intervalo  $(-\infty, \infty)$  e introduzimos o vínculo  $\delta(S_i^2 - 1)$  para forçar os valores discretos. Dessa forma podemos escrever a soma sobre estados na função de partição como uma integral multidimensional,

$$\sum_{\{S_i\}} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \prod_i dS_i \delta(S_i^2 - 1) \quad (3.81)$$

Usando este truque a função de partição do modelo de Ising fica escrita em termos de variáveis reais  $-\infty < S_i < \infty$ ,

$$Z = \int \prod_i dS_i \delta(S_i^2 - 1) e^{\sum_{ij} S_i V_{i,j} S_j + \beta \sum_i B_i S_i} \quad (3.82)$$

onde  $V_{i,j}$  é a interação entre spins  $S_i$  e  $S_j$  e  $B_i$  é um campo magnético. Usamos agora a transformação de Hubbard-Stratonovich, equação (3.80), para linearizar o termo quadrático nas variáveis  $S_i$ , para isto introduzimos as variáveis auxiliares  $-\infty < \phi_i < \infty$ , obtendo

$$Z = \int \prod_i dS_i \delta(S_i^2 - 1) \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_i d\phi_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i V_{ij}^{-1} \phi_j + \sum_i S_i (\phi_i + \beta B_i)} \quad (3.83)$$

O fator  $(\det V)^{1/2}$  foi absorvido na constante de normalização global, já que é uma constante.

Agora que a variável  $S$  aparece de forma linear, pode ser integrada. Ao integrar as  $\delta(S_i^2 - 1)$  voltamos a representação discreta para  $S_i = \pm 1$ ,

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_i d\phi_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i V_{ij}^{-1} \phi_j} \sum_{\{S_i\}} e^{\sum_i S_i (\phi_i + \beta B_i)} \quad (3.84)$$

A última soma pode ser feita facilmente, obtendo

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \prod_i d\phi_i \right) e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_i V_{ij}^{-1} \phi_j + \sum_i \ln \cosh(\phi_i + \beta B_i)} \quad (3.85)$$

A função de partição fica representada então através de n-integrais sobre variáveis contínuas  $\phi_i$ . É interessante notar alguns aspectos da representação (3.85). Essa representação é exata, ou seja, não fizemos nenhum tipo de aproximação para deduzi-la. Portanto, a física descrita por meio de variáveis discretas e contínuas é exatamente o mesmo. Porém, a interpretação das variáveis “microscópicas” é bem diferente. Por exemplo, usando a representação discreta, equação (3.82), vemos que a magnetização a campo magnético zero é dada por

$$M = \sum_i \langle S_i \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_i \left. \frac{\partial Z}{\partial B_i} \right|_{B_i=0} \quad (3.86)$$

Usando no último termo a representação da função de partição (3.85) obtemos

$$M = \frac{1}{\beta} \sum_i \left. \frac{\partial Z}{\partial B_i} \right|_{B_i=0} = \sum_i \langle \tanh[\phi_i] \rangle \quad (3.87)$$

Comparando as equações (3.86) e (3.87)

$$\langle S_i \rangle = \langle \tanh[\phi_i] \rangle \quad (3.88)$$

Portanto, a interpretação física de  $S_i$  como um momento magnético elementar não se traslada de forma automática para a variável  $\phi_i$ . Perto da transição de fase, a magnetização é muito pequena. Nesse caso podemos aproximar

$$\langle S_i \rangle = \langle \phi_i \rangle \quad (3.89)$$

e interpretar  $\phi_i$  como um momento magnético. Porém, essa interpretação só é válida perto do ponto crítico e para o momento de ordem um. Para funções de correlação, a identificação não é automática já que no geral  $\langle S_i S_j \rangle \neq \langle \phi_i \phi_j \rangle$ , mesmo perto do ponto crítico.

Se o interesse é o estudo de propriedades de longas distâncias do sistema, isto é  $r \gg a$ , onde  $r$  é a distância típica entre duas variáveis e  $a$  o parâmetro de rede, é possível fazer o limite contínuo dessa teoria. Para isto, é necessário fazer o limite

quando a constante de rede vai a zero, o número de sítios da rede vai a infinito, mas o volume do sistema permanece constante,

$$a \rightarrow 0 \quad N \rightarrow \infty \quad a^d N \rightarrow V \quad (3.90)$$

onde  $a$  é o parâmetro de rede e  $d$  a dimensionalidade da rede. Com esse limite o conjunto de  $n$  variáveis contínuas  $\phi_i$  passam a ser um campo  $\phi(x)$ , onde o parâmetro contínuo  $\vec{x}$  substitui o discreto  $i$ . A medida de integração na função de partição tem a forma,

$$\mathcal{D}\phi[x] = \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ N \rightarrow \infty \\ a^d N = V}} \left( \prod_{n=1}^N d\phi_n \right) \quad (3.91)$$

Portanto a função de partição passa a ser escrita como uma *integral funcional* sobre o campo escalar  $\phi(x)$ .

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \phi(x) V^{-1}(x-x') \phi(x') + \int d^d x \ln \cosh(\phi(x) + \beta B(x))} \quad (3.92)$$

O núcleo da parte quadrática  $V^{-1}(x-x')$  em geral é uma função complicada. Porém, se a interação for de curto alcance, pode tomar uma forma simples quando a aproximação de longas distâncias é realizada. Vejamos um exemplo. Considere a interação de primeiros vizinhos

$$V_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } j = i \pm 1 \\ 0 & \text{se } j \neq i \pm 1 \end{cases} \quad (3.93)$$

Para calcular a inversa é mais simples fazer o cálculo no espaço de Fourier. A transformada de Fourier da interação é

$$\tilde{V}(q) = C \{ \cos(q_x a) + \cos(q_y a) \} \quad (3.94)$$

onde consideramos o problema bidimensional na rede quadrada. A aproximação de longas distâncias é equivalente ao limite  $\vec{a} \cdot \vec{q} \rightarrow 0$ . Nesse limite, podemos fazer uma expansão em série de Taylor da função cos obtendo

$$\tilde{V}(q) \sim C \left( 1 - \frac{a^2}{2} |\vec{q}|^2 \right) \quad (3.95)$$

onde  $C$  é uma constante. Note que  $V(\vec{q})$  depende apenas do módulo do momento  $|\vec{q}|$ , o que significa que o potencial é invariante perante rotações. Essa simetria é produto do limite de longas distâncias. Se calcularmos, por exemplo, a próxima correção, vamos encontrar termos proporcionais à  $q_x^4 + q_y^4$  que não são invariantes perante rotações contínuas; eles são invariantes apenas perante rotações em  $\pi/2$ , que é a simetria quadrangular original da rede.

A inversa da equação (3.95), com o mesmo grau de aproximação é

$$\tilde{V}^{-1}(q) \sim C^{-1} \left( 1 + \frac{a^2}{2} |\vec{q}|^2 \right) \quad (3.96)$$

Calculando agora a antitransformada de Fourier achamos a inversa do potencial em espaço de configuração,

$$V(r - r') \sim (\tilde{r} - c\nabla^2)\delta(r - r') \quad (3.97)$$

onde introduzimos as constantes  $\tilde{r} = C^{-1}$  e  $c = a^2/C$ . Substituindo essa expressão em (3.92), obtemos

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2} \int d^d x \{ \phi(x)(\tilde{r} - c\nabla^2)\phi(x) - 2 \ln \cosh[\phi(x) + \beta B(x)] \}} \quad (3.98)$$

Ainda, perto do ponto crítico, podemos expandir o a função  $\ln\{\cosh[\phi(x) + \beta B(x)]\}$

$$\ln\{\cosh[\phi + \beta B]\} = \frac{1}{2}\phi^2 - \frac{1}{12}\phi^4 + \beta B\phi + O(\phi^6, B^2\phi^2, B\phi^3). \quad (3.99)$$

Substituindo essa expansão na equação (3.98) e renomeando as constantes, chegamos ao resultado

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\mathcal{H} + \int d^d x B\phi} \quad (3.100)$$

onde

$$\mathcal{H} = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} |\vec{\nabla}\phi|^2 + \frac{1}{2} r\phi^2 + \frac{1}{4} u\phi^4 \right\} \quad (3.101)$$

Portanto, vemos que as propriedades críticas do modelo de Ising são as mesmas que um modelo de campo escalar com interação quártica. O funcional  $\mathcal{H}[\phi]$  é chamado de "hamiltoniano de Ginzburg-Landau". Algumas considerações tem que ser destacadas. O hamiltoniano da equação (3.101) tem a simetria  $\phi(x) \rightarrow -\phi(x)$ , ou seja, ele é invariante perante o grupo  $Z_2$ , a mesma simetria que o modelo de Ising. Por outro lado, esse hamiltoniano não descreve a mesma física que o modelo de Ising, apenas tem as mesmas propriedades perto do ponto crítico. Em particular, os expoentes críticos serão os mesmos. Outra observação importante é que o hamiltoniano da equação (3.101), embora se chame hamiltoniano de Ginzburg-Landau, não tem que ser confundido com a energia livre de Ginzburg-Landau. Esta última é escrita em termos do parâmetro de ordem, no caso a magnetização  $M$ , enquanto que o hamiltoniano é escrito em termos de variáveis dinâmicas  $\phi(x)$  que devem ser integradas funcionalmente para obter a função de partição e portanto a energia livre. Na próxima seção analisamos esse ponto em mais detalhe.

### 3.6 O hamiltoniano de Ginzburg-Landau e a aproximação de Landau

Devido ao termo quártico de hamiltoniano de Landau a integral funcional da equação (3.100) não pode ser realizada de forma exata. Por esse motivo devemos apelar a aproximações para o cálculo da energia livre. Nesta seção analisamos a aproximação

de Landau para o cálculo da energia livre correspondente à função de partição (3.100) com o hamiltoniano (3.101).

A ideia da aproximação de Landau consiste em considerar que, de todas as configurações de campo que contribuem para a integral funcional, a mais relevante é aquela que maximiza o integrando. A aproximação corresponde então a substituir a integral sobre  $\phi(x)$ , pelo valor máximo do integrando. O exponencial será máximo quando o expoente tiver um mínimo. Portanto, o primeiro passo para a aproximação de Landau é minimizar o expoente da eq. (3.100), temos então

$$\left. \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi(x)} \right|_{\phi=\phi_0} = B(x). \quad (3.102)$$

A solução dessa equação nos fornece uma configuração de campo que depende do campo magnético,  $\phi_0(x)[B]$ . Significa que a solução  $\phi_0(x)$  é uma funcional de  $B(x)$ . Usando o hamiltoniano (3.101) obtemos essa equação explicitamente como

$$-\nabla^2 \phi + r\phi + u\phi^3 = B \quad (3.103)$$

A função de partição na aproximação de Landau será então,

$$Z = \mathcal{N} e^{-\mathcal{H}(\phi_0) + \int d^d x B \phi_0} \quad (3.104)$$

A partir daqui, a energia livre é simplesmente

$$W(T, B) = \mathcal{H}(\phi_0) - \int d^d x B \phi_0 \quad (3.105)$$

onde como já dizemos  $\phi_0$  é uma funcional de  $B$  dado pela solução da equação (3.103). Se quisermos calcular a energia livre de Helmholtz  $F(T, M)$  que é função do parâmetro de ordem  $M$ , podemos fazer uma transformação de Legendre

$$F(M, T) = W(T, B) + \int d^d x B M \quad (3.106)$$

onde  $B[M]$  é uma funcional de  $M$ , obtido a partir de inverter a equação de estado,

$$M = -\frac{\delta W(T, B)}{\delta B} \quad (3.107)$$

Esta derivada funcional pode ser realizada com ajuda da equação (3.105)

$$M(x) = -\frac{\delta W}{\delta B} = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi_0} \frac{\delta \phi_0}{\delta B} + \phi_0 + B \frac{\delta \phi_0}{\delta B} \quad (3.108)$$

Usando a equação (3.102) vemos que o primeiro e o último termo cancelam, obtendo o resultado simples

$$M(x) = \phi_0(x) \quad (3.109)$$

Portanto, na aproximação de Landau, a solução da equação (3.105) é a própria magnetização. Por este motivo, usando as equações (3.106), (3.105) e (3.109) obtemos

$$F(M, T) = \mathcal{H}(M) = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} |\vec{\nabla} M|^2 + \frac{1}{2} r M^2 + \frac{1}{4} u M^4 \right\} \quad (3.110)$$

Este resultado é exatamente a teoria de Landau-Ginsburg que construímos no capítulo anterior. Vemos que esta teoria é apenas uma aproximação do problema, completamente equivalente à aproximação de campo médio. A eq. (3.110) muitas vezes leva a confundir a energia livre com o hamiltoniano mas, deve ser levado em conta que essa igualdade é apenas uma consequência da aproximação de Landau, e não deve subsistir quando a aproximação for melhorada. Na literatura de teoria quântica de campos, a energia livre  $F(M)$  da eq. (3.110) é chamada de *ação efetiva*.

## 3.7 Correções à aproximação de Landau

Na seção anterior descobrimos que a teoria de Ginzburg-Landau para a transição de fase ferromagnética/paramagnética uniaxial é apenas uma aproximação da energia livre de Helmholtz calculada com uma teoria de campos escalar com acoplamento quártico. Podemos então avançar, calculando correções a essa aproximação, o que permitiria melhorar a teoria de Ginzburg-Landau.

### 3.7.1 Caso de uma variável real

Consideremos um sistema descrito por apenas uma variável real para entender a essência de como melhorar a aproximação de Landau sem complicações de cálculo desnecessárias. Depois, abordaremos o problema do campo escalar real. Considere a função de partição

$$Z = \int d\varphi e^{-\frac{1}{\hbar}[\mathcal{H} - B\varphi]} \quad (3.111)$$

onde  $\varphi$  é uma variável real e  $\mathcal{H}(\varphi)$  um hamiltoniano. Introduzimos a constante auxiliar  $\hbar$ , apenas para ordenar o cálculo perturbativo, no final colocaremos  $\hbar = 1$ . O mínimo do expoente é alcançado quando

$$B = \mathcal{H}'(\varphi_0) \quad (3.112)$$

onde  $\mathcal{H}' = d\mathcal{H}/d\varphi$ . Agora expandimos o expoente  $\mathcal{H} - B\varphi$  perto da solução  $\varphi = \varphi_0$ . Para isto fazemos

$$\varphi = \varphi_0 + \delta\varphi \quad (3.113)$$

com  $|\delta\varphi| \ll 1$ . Obtemos a seguinte expansão,

$$\mathcal{H} - B\varphi = \mathcal{H}(\varphi_0) - B\varphi_0 + \frac{1}{2} D(\varphi_0) (\delta\varphi)^2 + \frac{1}{3!} (\delta\varphi)^3 + \frac{1}{4!} (\delta\varphi)^4 \quad (3.114)$$

onde definimos

$$D(\varphi_0) = \mathcal{H}''(\varphi_0) = \frac{\partial B}{\partial \varphi_0} = r_0 + \frac{1}{2} u \varphi_0^2 \quad (3.115)$$

Observe que não existem termos lineares, devido a que  $\varphi_0$  é um mínimo do expoente. Substituindo a expansão na equação (3.111), obtemos

$$Z = e^{-\frac{1}{\hbar}[\mathcal{H}(\varphi_0) - B\varphi_0]} \int d(\delta\varphi) e^{-\frac{1}{2\hbar}D(\varphi_0)\delta\varphi^2 - \frac{1}{3! \hbar}u_0\varphi_0\delta\varphi^3 - \frac{1}{4! \hbar}u_0\delta\varphi^4} \quad (3.116)$$

onde substituímos  $d\varphi = d(\delta\varphi)$ . Fazendo a mudança de variáveis  $\delta\varphi \rightarrow \delta\varphi\sqrt{\hbar}$  obtemos

$$Z = e^{-\frac{1}{\hbar}[\mathcal{H}(\varphi_0) - B\varphi_0]} \int d(\delta\varphi) e^{-\frac{1}{2}D(\varphi_0)\delta\varphi^2} e^{-\frac{\hbar^{1/2}}{3!}u_0\varphi_0\delta\varphi^3 - \frac{\hbar}{4!}u_0\delta\varphi^4} \quad (3.117)$$

onde o jacobiano constante foi absorvido na constante global de normalização da função de partição. Quando  $\hbar \rightarrow 0$ , o segundo exponencial pode ser expandido em serie de Taylor e, nesse caso, todas as integrais são gaussianas. A primeira ordem dessa expansão é

$$Z = D^{-1/2}(\varphi_0) e^{-\frac{1}{\hbar}[\mathcal{H}(\varphi_0) - B\varphi_0]} \quad (3.118)$$

onde absorvemos fatores constantes na normalização da função de partição. Definindo a energia livre como

$$Z = e^{-\frac{1}{\hbar}W(T,B)} \quad (3.119)$$

obtemos,

$$W[B] = -\hbar \ln Z = \mathcal{H}(\varphi_0) - B\varphi_0 + \frac{\hbar}{2} \ln D(\varphi_0) + O(\hbar^2) \quad (3.120)$$

onde  $\varphi_0$  é um função de  $B$ . Esta equação deve ser comparada com a equação (3.105). Vemos que as flutuações corrigem a aproximação de Landau para a energia livre com um termo proporcional ao logaritmo da derivada segunda do hamiltoniano.

Fazemos agora uma transformada de Legendre para obter a energia livre de Helmholtz em função do parâmetro de ordem  $M$

$$F(T, M) = W(T, B) + MB \quad (3.121)$$

onde  $B(M)$  é obtida invertendo a equação

$$M = -\frac{\partial W}{\partial B} \quad (3.122)$$

A partir da equação (3.120) para  $W(T, B)$  podemos calcular a magnetização. Obtemos,

$$\begin{aligned} M &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varphi_0} \frac{\partial \varphi_0}{\partial B} + \varphi_0 + B \frac{\partial \varphi_0}{\partial B} + \frac{\hbar}{2} \frac{D'(\varphi_0)}{D(\varphi_0)} \frac{\partial \varphi_0}{\partial B} \\ &= \varphi_0 + \frac{\hbar}{2} \frac{D'(\varphi_0)}{D^2(\varphi_0)} \end{aligned} \quad (3.123)$$

O primeiro e o terceiro termo da primeira linha cancelam devido à equação (3.112). O último termo da segunda linha foi obtido usando a relação  $\partial \varphi_0 / \partial B = 1/D(\varphi_0)$ , obtida invertendo a equação (3.115). A equação (3.123) nos diz que, a diferença da aproximação de Landau,  $M \neq \varphi_0$ . A relação é bastante mais complicada. Podemos

inverter essa equação perturbativamente em potências de  $\hbar$ . Para  $\hbar = 0$ , temos a solução trivial  $\varphi_0 = M$ . Usando essa solução de forma iterativa achamos

$$\varphi_0 = M - \frac{\hbar}{2} \frac{D'(M)}{D^2(M)} + O(\hbar^2) \quad (3.124)$$

Substituindo a equação (3.124) na equação (3.120), usando a (3.121) e expandindo em potências de  $\hbar$ , obtemos

$$F(T, M) = \mathcal{H}(M) + \frac{\hbar}{2} \ln D(M) + O(\hbar^2) \quad (3.125)$$

Vemos desta forma que, a energia livre não é apenas a energia livre de Ginzburg-Landau, ou seja o hamiltoniano calculado na magnetização, mas temos uma primeira correção de caráter logarítmico. É possível calcular correções de potências mais altas em  $\hbar$ . Porém, esse exemplo de uma variável é apenas um exercício simples para agora poder atacar com mais familiaridade o problema do campo escalar real.

### 3.7.2 Caso de um campo escalar real

Generalizamos agora o raciocínio anterior para o caso geral de um campo escalar real  $\varphi(x)$ . A equação que define o mínimo  $\phi_0(x)$  tem a forma

$$B(x) = \left. \frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi(x)} \right|_{\phi=\phi_0} \quad (3.126)$$

Nesse caso a expansão em flutuações do expoente  $\mathcal{H}_1$  da função de partição é

$$\mathcal{H}_1 \sim \mathcal{H}(\phi_0) - \int d^d x B(x) \phi_0(x) + \frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \delta \phi(x) D(x-x') \delta \phi(x') \quad (3.127)$$

onde  $\delta \phi(x) = \phi(x) - \phi_0(x)$  e

$$D(x-x') = \left. \frac{\delta^2 \mathcal{H}}{\delta \phi(x) \delta \phi(x')} \right|_{\phi=\phi_0} \quad (3.128)$$

A integral sobre  $\delta \phi(x)$  é Gaussiana,

$$\int \mathcal{D} \delta \phi e^{-\frac{1}{2} \int d^d x d^d x' \delta \phi(x) D(x-x') \delta \phi(x')} \sim (\text{Det} D)^{-1/2} = e^{-\frac{1}{2} \text{Tr} \ln D} \quad (3.129)$$

Apenas falta calcular explicitamente o traço do operador  $\ln D(x-x')$ . Da equação (3.128) obtemos

$$D(x-x') = \left( -\nabla^2 + r_0(T) + \frac{1}{2} u_0 \phi_0^2 \right) \delta(x-x') \quad (3.130)$$

Para calcular o traço, é melhor usar uma representação diagonal do operador. Para um sistema homogêneo, esperamos que  $\phi_0$  não dependa de  $x$ . Nesse caso, podemos representar o operador no espaço de Fourier

$$\tilde{D}(q) = q^2 + r_0(T) + \frac{1}{2}u_0\phi_0^2 \quad (3.131)$$

e conseqüentemente

$$\text{Tr} \ln D = V \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln \left( q^2 + r_0(T) + \frac{1}{2}u_0\phi_0^2 \right) \quad (3.132)$$

Agora, apenas falta fazer a transformada de Legendre para calcular a energia livre em função da magnetização. Como no caso anterior de uma variável, podemos considerar  $M \sim \phi_0 + O(\hbar)$ . Temos então,

$$F = \int d^d x \left[ \mathcal{H}(M) + \frac{\hbar}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln \left( q^2 + r_0(T) + \frac{1}{2}u_0 M^2 \right) + O(\hbar^2) \right] \quad (3.133)$$

O primeiro termo é a aproximação de Landau ou de campo médio, enquanto que o segundo representa flutuações gaussianas ao redor do campo médio. Na literatura de teoria de campos, a energia livre dada pela equação (3.133) é chamada de *ação efetiva a um laço*.

### 3.7.3 O critério de Ginzburg *reloaded*

Usando a energia livre corrigida a um laço, podemos agora escrever explicitamente a equação para o campo magnético,  $B(x) = \delta F / \delta M(x)$ . Considerando um sistema homogêneo obtemos

$$B = r_0 M + \frac{u_0}{6} M^3 + \frac{1}{2} u_0 M \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r_0(T) + \frac{1}{2} u_0 M^2} \quad (3.134)$$

A inversa da suscetibilidade para  $B \rightarrow 0$  é obtida como

$$\chi^{-1} = \left. \frac{\partial B}{\partial M} \right|_{B=0} = r_0 + \frac{u_0}{2} M^2 + \frac{u_0}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r_0(T) + \frac{1}{2} u_0 M^2} + \dots \quad (3.135)$$

onde desprezamos potências superiores de  $M$  que vão a zero para  $T > T_c$ . A notação usual para a suscetibilidade é  $\chi^{-1} = r$ , onde na aproximação de Landau é

$$\chi_0^{-1} = r_0 = a(T - T_0) \quad (3.136)$$

Na fase de altas temperaturas,  $M = 0$ , e a equação para a suscetibilidade é

$$r = r_0 + \frac{u_0}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r_0} \quad (3.137)$$

Essa equação nos diz que  $r \sim r_0 + O(u_0)$ . Podemos então substituir no denominador da integral  $r_0 \rightarrow r$ , obtendo a equação autoconsistente,

$$r = r_0 + \frac{u_0}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r} + O(u_0^2) \quad (3.138)$$

A temperatura crítica é definida como a temperatura onde a suscetibilidade diverge, ou  $r = 0$ . Temos então,

$$0 = a(T_c - T_0) + \frac{u_0}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2} \quad (3.139)$$

Subtraindo a equação (3.139) da equação (3.138) obtemos a suscetibilidade como função da temperatura crítica

$$r = a(T - T_c) - \frac{u_0}{2} r \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2(q^2 + r)} \quad (3.140)$$

Para  $d > 4$ , a integral é convergente no infravermelho ( $r \rightarrow 0$ ), obtemos então,

$$r = a(T - T_c) - Cr \quad (3.141)$$

onde  $C$  é uma constante. Portanto,

$$r = \frac{a(T - T_c)}{1 + C} \quad (3.142)$$

Ou seja, para  $d > 4$ , as correções de ordem  $\hbar$ , não alteram o valor dos expoentes críticos. Isto é verdade para toda ordem de aproximação em potências de  $\hbar^n$ .

Para  $d < 4$  a integral da eq. (3.140) no ponto crítico  $r = 0$ , diverge quando  $q \rightarrow 0$ ; é uma integral divergente infravermelha. De fato, mudando para a variável adimensional  $z = q/\sqrt{r}$

$$I = \int \frac{d^d z}{(2\pi)^d} \frac{\sqrt{r}^{d-4}}{r^2 z^2 (z^2 + 1)} = (\sqrt{r})^{d-4} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int_0^\infty \frac{z^{d-1} dk}{z^2 (z^2 + 1)} \quad (3.143)$$

A suscetibilidade para  $d < 4$  pode ser escrita como

$$r = a(T - T_c) - u_0 C r r^{(d-4)/2} \quad (3.144)$$

onde a constante

$$C = \frac{\Omega_d}{2(2\pi)^d} \int_0^\infty \frac{z^{d-1} dk}{z^2 (z^2 + 1)} \quad (3.145)$$

A equação (3.144) é incompatível com  $r \sim (T - T_c)$ , portanto, para  $d < 4$ , as flutuações mudam os expoentes críticos da aproximação de Landau. Da mesma equação, é possível observar que o verdadeiro parâmetro de expansão não é  $u_0$ , mas  $u_0 C r^{(4-d)/2}$  o qual

diverge perto do ponto crítico. Podemos nos perguntar em que situação a aproximação de Landau é válida em  $d < 4$ . Obviamente temos que exigir que

$$u_0 C r^{(d-4)/2} \ll 1 \quad (3.146)$$

isto impõe um limite na temperatura dado por

$$u_0 C [a(T - T_c)]^{(d-4)/2} \ll 1 \quad (3.147)$$

Lembrando que o comprimento de correlação é  $\xi \sim (T - T_c)^{-1/2}$ , temos que a aproximação de Landau ou o camo médio é válido se

$$u_0 C \xi^{4-d} \ll 1 \quad (3.148)$$

que é o critério de Ginzburg deduzido na seção anterior. A vantagem é que agora temos uma forma explícita de calcular as constantes envolvidas. Também, a diferença da teoria de Ginzburg-Landau, temos um procedimento sistemático para melhorar a aproximação, em principio, até qualquer ordem, desde que estejamos longe do ponto crítico. Neste ponto, as flutuações divergem para qualquer dimensão menor que a crítica, tendo que desenvolver algum outro procedimento para tratar a criticalidade consistentemente.

# Capítulo 4

## Grupo de Renormalização

### 4.1 A ideia do grupo de renormalização

A ideia essencial do grupo de renormalização (GR) é o estudo de propriedades estatísticas de sistemas a “longas distâncias”. Na descrição de uma fase com comprimento de correlação  $\xi$  em  $d$  dimensões, deveríamos considerar tipicamente um número de graus de liberdade proporcional a  $\xi^d$ . Porém, perto de um ponto crítico  $\xi \rightarrow \infty$  e, nessas condições, se faz impossível qualquer tratamento perturbativo já que eles estão desenhados para tratar poucos graus de liberdade. A ideia do GR é reduzir este número, “integrando” de alguma forma os graus de liberdade de comprimento de onda “pequena”, obtendo uma teoria efetiva para os graus de liberdade de grandes comprimentos de onda.

O comprimento de onda mínimo num sistema discreto é o espaçamento da rede, ou a distância interatômica  $a$ . A ideia é integrar flutuações com comprimento de onda  $a \leq \lambda \leq ba$  onde  $b > 1$  é o chamado fator de dilatação. Esta “integração” é chamada de “transformação do grupo de renormalização” (TGR). Ela não modifica os graus de liberdade com comprimento de onda  $\lambda > ba$ . Dessa forma, as propriedades de longas distâncias  $r > ba$  permanecem inalteradas no sistema transformado.

Poderíamos realizar novamente uma TGR integrando agora comprimentos de onda  $ba \leq \lambda \leq b^2a$ . A ideia é iterar esta TGR produzindo um “fluxo” de sistemas que tem em comum as propriedades de longas distâncias  $r \gg a$ .

Para concretizar essa ideia, analisamos uma TGR particular, aplicada a um sistema simples como o modelo de Ising em duas dimensões na rede quadrada. Na figura 4.1 é mostrado o procedimento. Começamos com um sistema definido por um hamiltoniano  $H(s)$ , onde as variáveis  $s = \pm 1$ . As propriedades estatísticas vem dadas pela função de partição

$$Z = \text{Tr}_s e^{-H(s)} \quad (4.1)$$

onde absorvemos o inverso da temperatura  $\beta$  nas constantes do hamiltoniano.

Suponhamos que escolhemos blocos de spins formando quadrados de três spins de lado, que dizer, blocos de nove spins. A seguir, calculamos a magnetização de cada

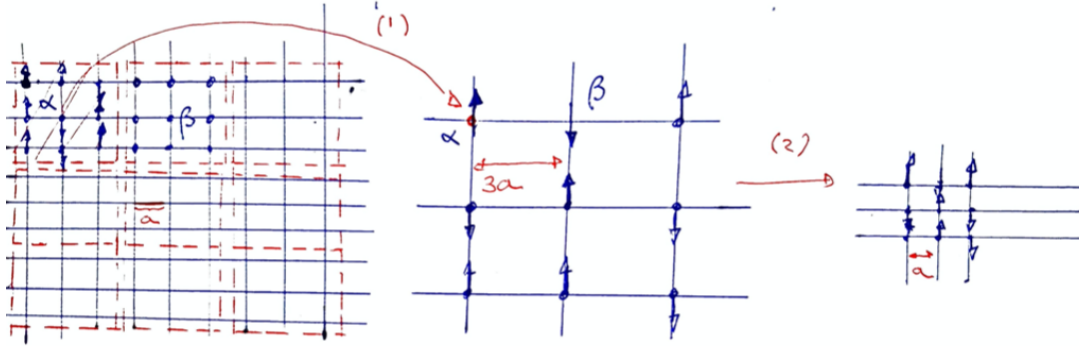


Figura 4.1: Transformação do Grupo de Renormalização, em blocos de 9 spins, no modelo de Ising numa rede quadrada

bloco. Dado que é um número ímpar, esta magnetização sempre será positiva ou negativa, não podendo ser zero. Construímos a continuação um novo sistema, uma nova rede, onde associamos um “novo spin”,  $s'$  em cada sitio com a seguinte regra: se a magnetização do bloco é positiva, atribuímos o valor  $s' = 1$ , se for negativa atribuímos  $s' = -1$ . Dessa forma, se fizermos isso para toda a rede original, obtemos uma nova rede onde cada variável de spin  $s'$  contém informação da média da magnetização de cada bloco de nove spins originais. Podemos representar essa transformação explicitamente da seguinte forma:

$$T(s'_\alpha, s_1, \dots, s_9) = \begin{cases} 1 & \text{no caso de } s'_\alpha \sum_{i=1}^9 s_i > 0 \\ 0 & \text{em qualquer outra situação} \end{cases} \quad (4.2)$$

O índice  $\alpha$  indica o número de bloco, enquanto que o índice  $i$  indica o sitio da rede original. Fazendo essa transformação, obtemos um novo sistema nas variáveis  $s'_\alpha$  com um novo hamiltoniano  $H'(s')$ . Esse novo hamiltoniano é definido da seguinte forma

$$e^{-H'(s')} = \text{Tr}_s \left[ \left( \prod_\alpha T(s'_\alpha, s_i) \right) e^{-H(s)} \right] \quad (4.3)$$

Apresentamos em forma gráfica esse processo na figura 4.1. Tem que ser destacado que a transformação escolhida é arbitrária. Isto significa que, o tamanho dos blocos de spin e, a regra para atribuir a nova variável  $s'$  (no caso a magnetização do bloco), é completamente arbitrária. Os resultados do grupo de renormalização não dependem da escolha dessa transformação. Aqui apresentamos uma transformação em particular que é bastante intuitiva fisicamente porém, nem sempre é a mais conveniente para realizar cálculos específicos. A propriedade importante de uma TGR qualquer, é que ela deve deixar invariante a função de partição, já que estamos representando o “mesmo”

sistema com variáveis diferentes. Não é difícil demonstrar essa propriedade para a transformação escolhida.

$$Z' = \text{Tr}_{s'} e^{-H'(s')} = \text{Tr}_{s'} \text{Tr}_s \left[ \left( \prod_{\alpha} T(s'_{\alpha}, s_i) \right) e^{-H(s)} \right] \quad (4.4)$$

onde usamos a definição de  $H'(s')$  dada pela eq. (4.3). Invertendo a ordem dos traços nas variáveis  $s$  e  $s'$ , obtemos

$$Z' = \text{Tr}_s \left[ \left( \prod_{\alpha} \sum_{\{s'_{\alpha}\}} T(s'_{\alpha}, s_i) \right) e^{-H(s)} \right] \quad (4.5)$$

Para uma configuração fixa das variáveis  $s_i$ , cumpre-se que

$$\sum_{\{s'_{\alpha}\}} T(s'_{\alpha}, s_i) = 1 \quad (4.6)$$

portanto

$$Z' = \text{Tr}_s e^{-H(s)} = Z \quad (4.7)$$

Se repetirmos iterativamente a TGR indicada obtemos uma sucessão de hamiltonianos

$$H(s) \rightarrow H'(s') \rightarrow H''(s'') \rightarrow \dots \rightarrow H^{(n)}(s^{(n)}) \quad (4.8)$$

cuja propriedade principal é deixar invariante a função de partição

$$Z = Z' = Z'' = \dots = Z^{(n)} \quad (4.9)$$

O conjunto de hamiltonianos (4.8) compartilham as propriedades de longas distâncias do sistema. Porém, existe ainda um problema a ser observado, antes de poder comparar os sistemas entre eles. Com a transformação definida, o espaçamento de rede é mudado. Veja por exemplo a figura 4.1. Se o espaçamento de rede inicial é  $a$ , o novo sistema descrito pelo hamiltoniano  $H'(s')$  descreve uma rede com espaçamento  $3a$ . Em geral, o novo espaçamento é dilatado com o coeficiente de dilatação  $b$ . Depois de iterar  $n$  vezes a TGR o sistema obtido tem uma constante de rede  $b^n a$ . Por esse motivo, para comparar os resultados dos diferentes hamiltonianos, temos que renormalizar as unidades para que todos eles tenham o mesmo espaçamento de rede. Isto se faz mudando a escala de todas as variáveis com um fator de compressão  $b^{-1}$  em cada uma das iterações. Com este procedimento, todos os sistemas medem as distâncias nas mesmas unidades e desta forma é possível compará-los. Indicamos esta transformação por (2) na figura 4.1.

A transformação completa do grupo de renormalização fica então definida pelos seguintes passos. Primeiro se define o “tamanho”( $b$ ) dos blocos de spin a ser considerados. Num segundo passo se constrói uma regra para identificar cada bloco com uma nova variável. Dessa forma, depois de calcular o traço parcial sobre os spins de cada bloco, obtemos um novo sistema dado pelo hamiltoniano  $H'(s')$ , que descreve as variáveis  $s'$ , localizadas numa rede com constante de rede  $ba$ . Finalmente, reescalamos

as distâncias com um fator  $b^{-1}$ , para ter os dois sistemas representados na mesma rede. Este processo todo é conhecido como uma *transformação do grupo de renormalização* (TGR).

É interessante observar algumas propriedades dos sistemas transformados. Já que a função de partição não muda, propriedades físicas como o comprimento de correlação também não mudarão, desde que medidos em unidades absolutas (metro, nm, Amstrong, etc). Porém é interessante observar como muda o comprimento de correlação quando medido nas unidades naturais de cada sistema. No sistema original, o comprimento de correlação vem dado por  $\xi = \bar{\xi}a$ , onde  $\bar{\xi}$  é adimensional. Já no novo sistema, o novo comprimento de correlação será  $\xi' = \bar{\xi}'ba$ . Mas, como  $\xi = \xi'$ , deve se cumprir que  $\bar{\xi}' = \bar{\xi}/b$ . Iterando  $n$  vezes a TRG, obtemos que

$$\bar{\xi}' = \frac{\bar{\xi}}{b^n} \quad (4.10)$$

Observamos que, uma TGR diminui o comprimento de correlação num fator  $b^{-1}$  cada vez que ela é aplicada. Na figura 4.2 mostramos algumas configurações tomadas de uma simulação de Monte Carlo do modelo de Ising. Consideremos, por exemplo, que começamos o procedimento considerando uma temperatura um pouco acima da temperatura crítica. Mostramos esse caso no painel (a) da figura. Nesse caso, o comprimento de correlação é grande, porém finito.  $\xi$  representa essencialmente o tamanho dos domínios ferromagnéticos dos sistema e, pode ser observado que existem domínios de todos os tamanhos por estar muito perto da  $T_c$ . Se aplicarmos uma TGR, o tamanho dos domínios diminui um fator  $b^{-1}$ , como pode ser observado no painel (b) na mesma figura. Se aplicarmos repetidas vezes a transformação chegaremos a um ponto em que o tamanho dos domínios é do mesmo tamanho que o espaçamento de rede  $b\bar{\xi} = 1$ , como mostrado no painel (c). Nesse caso, o sistema se encontra completamente desordenado e é compatível com um outro sistema a temperatura infinita. Ou seja que, um sistema acima da temperatura crítica tem as mesmas propriedades de longas distâncias que um sistema a temperatura infinita. Por outro lado, se começarmos o procedimento exatamente à temperatura crítica  $\bar{\xi} = \infty$ , a TGR não produz mudança nenhuma. Quer dizer, o ponto crítico é um ponto fixo das TGR. Podemos observar esse efeito na figura 4.3. Note que, no painel (a), existem domínios de todos os tamanhos possíveis, desde o tamanho microscópico da rede até domínios que percolam a amostra toda. Uma transformação do grupo de renormalização não muda essa característica de invariância de escala como mostrado no painel (b) da mesma figura.

Este comportamento não é particular do modelo de Ising, nem da TGR escolhida. É um comportamento geral que pode ser descrito com a teoria geral do GR que discutiremos mais adiante.

### 4.1.1 O espaço de constantes de acoplamento

Uma forma simples e alternativa de descrever uma TGR é considerar um espaço vetorial formado por todas as constantes de acoplamento compatíveis com uma determinada

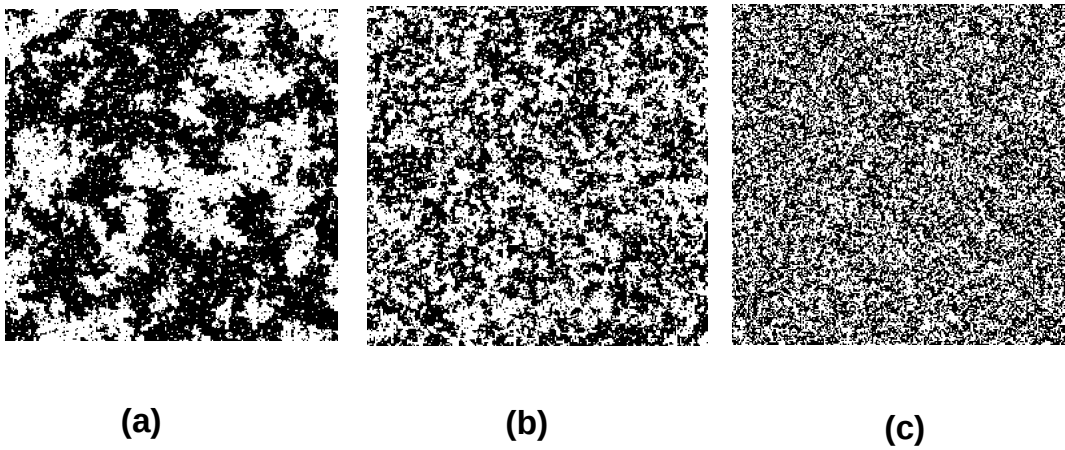


Figura 4.2: Configurações de spin do modelo de Ising, geradas com o método de Monte Carlo. No painel (a), o sistema está termalizado a uma temperatura levemente acima da crítica  $T > T_c$ . Em (b) observamos a diminuição do tamanho dos domínios depois de uma TGR. Já o painel (c) mostra uma configuração depois de um grande número de iterações da TGR. A configuração é compatível com  $T = \infty$ , onde os domínios são do tamanho do espaçamento de rede.

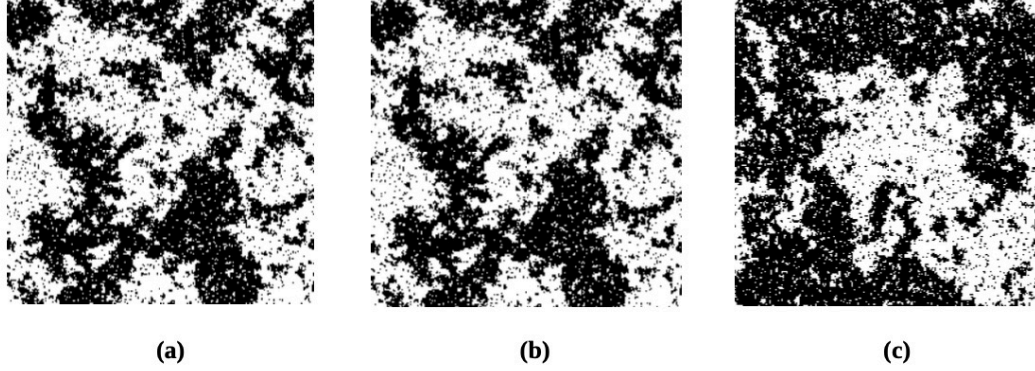


Figura 4.3: Configurações de spin do modelo de Ising, geradas com o método de Monte Carlo. No painel (a), o sistema está termalizado à temperatura crítica  $T = T_c$ . Em (b) observamos uma configuração equivalente depois de varias interações de uma TGR.

simetria. Considere por exemplo um sistema magnético com a simetria de Ising ( $Z_2$ ). O único vínculo que essa simetria impõe ao hamiltoniano é que ele seja invariante quando mudamos o sinal de todas as variáveis de spin simultaneamente. Portanto, podemos escrever um hamiltoniano geral da forma

$$H = K_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j + K_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} S_i S_j + K_3 \sum_{\langle ijkl \rangle} S_i S_j S_k S_l + \dots \quad (4.11)$$

onde  $\langle \rangle$  significa soma a primeiros vizinhos,  $\langle\langle \rangle\rangle$  soma a segundos vizinhos e assim por diante. O último termo é uma soma sobre quatro spins que formam uma plaqueta. Deste modo, a ideia é escrever *todos* os termos de interação possíveis com alcance finito que preservam a simetria  $Z_2$ . Ao aplicarmos uma TGR, o hamiltoniano terá a mesma forma, já que todos os termos compatíveis com a simetria foram escritos. Portanto, o novo hamiltoniano será

$$H = K'_1 \sum_{\langle ij \rangle} S'_i S'_j + K'_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} S'_i S'_j + K'_3 \sum_{\langle ijkl \rangle} S'_i S'_j S'_k S'_l + \dots \quad (4.12)$$

Se definirmos um vetor num espaço vetorial linear dado por

$$\mu = \{K_1, K_2, K_3, \dots\} , \quad (4.13)$$

esse ponto no espaço das constantes de acoplamento define de forma unívoca um hamiltoniano. Depois de uma TGR, obtemos outro ponto dado por

$$\mu' = \{K'_1, K'_2, K'_3, \dots\} \quad (4.14)$$

Desta forma, podemos representar uma TGR como uma aplicação no espaço vetorial de todas as constantes de acoplamento

$$\mu' = \mathcal{R}(\mu) \quad (4.15)$$

onde  $\mathcal{R}$  representa a TGR como um fluxo neste espaço chamado de *fluxo do grupo de renormalização*.

Se começarmos por exemplo com o modelo de Ising a primeiros vizinhos, o ponto inicial será

$$\mu = \{K, 0, 0, \dots\} \quad (4.16)$$

Aplicações sucessivas do GR, produzem um fluxo nesse espaço, gerando hamiltonianos com diferentes acoplamentos que não se encontravam necessariamente no hamiltoniano inicial.

O estudo do GR se reduz ao estudo dos fluxos do GR. As propriedades físicas de um determinado sistema podem ser estudados a partir desse fluxo. Cada ponto do fluxo representa um hamiltoniano com as *mesmas* propriedades de longa distância. Dado um hamiltoniano específico, poderíamos usar as TGR para produzir um fluxo que conduza este sistema a um hamiltoniano muito mais simples. Se isto for possível, poderíamos estudar sistemas muito complexos em termos de hamiltonianos muito simples. Essa ideia é a base do conceito de *classe de universalidade*.

O fluxo do grupo de renormalização pode ser entendido como um sistema dinâmico e como tal existirá uma descrição em termos de equações diferenciais. Para calcular o fluxo, em principio, é necessário calcular o traço da eq. (4.3). Este procedimento é o que chamamos de “integrar” sobre graus de liberdade de comprimento de onda curto. De fato, esse cálculo é impossível de ser realizado exatamente para a maioria dos modelos. Por este motivo temos que desenvolver técnicas aproximadas para seu tratamento.

## 4.2 O modelo de Ising unidimensional

Com o intuito de ilustrar os conceitos anteriores, aplicamos a técnica do grupo de renormalização a um problema que conhecemos sua solução exata, o modelo de Ising uni-dimensional. Consideramos o hamiltoniano

$$H = -K \sum_i S_i S_{i+1} \quad (4.17)$$

onde absorvemos em  $K$  a dependência com a temperatura e levamos em conta apenas interações entre primeiros vizinhos.

Para construir a transformação do grupo de renormalização (TCR) escolhemos blocos de três elementos como mostra a figura (4.4) Consideremos agora três blocos consecutivos de acordo com a figura (4.5). Definimos uma TGR dada por

$$T(S'; S_1, S_2, S_3) = \delta_{S', S_2} \quad (4.18)$$

Em vez de calcular a magnetização em cada bloco como fizemos na introdução do GR, podemos levar em conta apenas o valor do elemento central. Isto é, se o spin  $S_2$  for positivo, então atribuímos à nova variável  $S' = +1$ . Pelo contrario, se  $S_2$  for negativo, então  $S' = -1$ . Essa regra simplifica os cálculos e os resultados finais não



Figura 4.4: bloks1d.eps

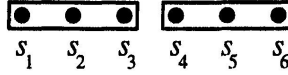


Figura 4.5: S1S6blocks.eps

dependem da escolha específica da transformação, desde que seja razoável. Vemos que essa transformação faz sentido a temperaturas baixas já que nessas temperaturas esperamos um alto grau de ordenamento e a probabilidade de encontrar os spins laterais com a mesma polarização que o central é muito alta.

Dada a TRG temos que achar o hamiltoniano transformado  $H'$ , calculando o traço parcial dado na equação (4.3). Para isto temos que calcular somas do tipo

$$I_{12} = \sum_{S_3, S_4 = \pm 1} e^{KS'_1 S_3} e^{KS_3 S_4} e^{KS_4 S'_2} \quad (4.19)$$

Lembrando que o produto de spin pode tomar apenas os valores  $\pm 1$ , é fácil deduzir

$$e^{KS_3 S_4} = \cosh K + S_3 S_4 \sinh K \quad (4.20)$$

Chamando  $x = \tanh K$  podemos escrever

$$e^{KS_3 S_4} = \cosh K (1 + x S_3 S_4) \quad (4.21)$$

obtemos dessa forma

$$I_{12} = \sum_{S_3, S_4 = \pm 1} (\cosh K)^3 (1 + x S'_1 S_3) (1 + x S_3 S_4) (1 + x S_4 S'_2) \quad (4.22)$$

É simples ver que apenas os termos com um número par de variáveis contribuem para o somatório, então

$$I_{12} = 2^2 (\cosh K)^3 (1 + x^3 S'_1 S'_2) \sim e^{K' S'_1 S'_2} \quad (4.23)$$

onde definimos

$$K' = \tanh^{-1} [(\tanh K)^3] \quad (4.24)$$

Repetindo o procedimento para todos os blocos do sistema, obtemos o hamiltoniano transformado

$$H'(S') = g(K) - K' \sum_i S'_i S'_{i+1} \quad (4.25)$$

Vemos que, exceto pelo termo  $g(K)$  que não contem as variáveis dinâmicas  $S'$ , o hamiltoniano tem a mesma forma que o original com a única diferença que a constante de acoplamento foi renormalizada  $K \rightarrow K'$  segundo a equação (4.24).

Podemos observar que, começando com um hamiltoniano com interações a primeiros vizinhos, acabamos com outro hamiltoniano com interações também a primeiros vizinhos. Ou seja, a transformação do grupo de renormalização não produz novas constantes de acoplamento. Portanto, o espaço de constantes de acoplamento é unidimensional. Este é apenas um caso muito especial, devido a que o modelo de Ising foi formulado numa rede unidimensional. Veremos que, no caso da rede bi-dimensional, esta simplificação não se mantém. É bom enfatizar que não tem que ser confundida a dimensionalidade do espaço de configuração, ou a dimensão da rede, com a dimensão das constantes de acoplamento.

A equação (4.24) é a transformação do grupo de renormalização no espaço de parâmetros (espaço das constantes de acoplamento)

$$K' = R(K) \quad (4.26)$$

para o modelo de Ising unidimensional. Usando a notação  $x = \tanh K$  esta transformação se escreve simplesmente como

$$x' = x^3 \quad (4.27)$$

Se aplicarmos  $n$  vezes a TGR de forma iterativa vemos que a forma do hamiltoniano não muda e a constante de acoplamento se renormaliza segundo a equação

$$x'^{(n)} = x^{3^n} \quad (4.28)$$

O número 3 aparece porque escolhemos blocos de 3 spins, mas em geral é um número arbitrário. Poderíamos escrever então

$$x'^{(n)} = x^{b^n} \quad (4.29)$$

onde  $b > 1$  é o coeficiente de dilatação da transformação.

A partir da equação (4.29) podemos estudar o fluxo do grupo de renormalização. A primeira observação é que a recorrência (4.29) tem dois pontos fixos,  $x = 0$  e  $x = 1$ , isto se corresponde com os valores de  $K = 0$ ,  $K = \infty$  ou  $T = \infty$ ,  $T = 0$  respectivamente. Esses pontos podem ser observados na figura (4.6). A outra observação é que a transformação é analítica. Isto é, não existe nenhum ponto singular entre os pontos fixos. Isto dá lugar ao fluxo descrito na figura (4.6). Qualquer ponto  $x$  no intervalo  $(0, 1)$  flui ao ponto fixo  $x = 0$ . Por esse motivo o ponto fixo  $x = 0$  ( $K = 0$ ,  $T = \infty$ ) é chamado ponto fixo atrativo, enquanto o ponto  $x = 1$  ( $K = \infty$ ,  $T = 0$ ) é um ponto fixo repulsivo. Isto significa que para qualquer temperatura  $T \neq 0$ , o sistema flui ao ponto fixo  $T = \infty$ . As propriedades de longas distâncias de todos os pontos do fluxo do GR estão determinados pelo ponto fixo  $T = \infty$ , ou seja o sistema é desordenado ou paramagnético. A situação apenas muda para  $T = 0$ , que representa o estado fundamental,

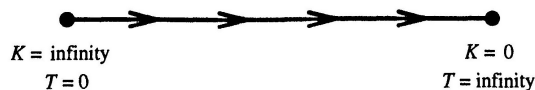


Figura 4.6: 1dflow.eps

obviamente ordenado. Significa que em uma dimensão o modelo de Ising não apresenta transição de fase para nenhuma temperatura finita diferente de zero. Este resultado á era conhecido por nos, já que tínhamos resolvido exatamente o problema. Porém, também tínhamos observado que a aproximação de campo médio não captura essa física. Vemos agora que, o grupo de renormalização descreve corretamente o diagrama de fases dos sistema.

Outra informação importante que pode ser obtida da TGR é o comprimento de correlação. Sabemos que após uma TGR o comprimento de correlação muda como

$$\xi(x') = \frac{\xi(x)}{b} \quad (4.30)$$

e usando a equação (4.29) para  $n = 1$  obtemos

$$\xi(x^b) = \frac{\xi(x)}{b}. \quad (4.31)$$

A solução desta equação é  $\xi(x) = cte / \ln x$  ou, nas variáveis originais do sistema

$$\xi = \frac{cte}{\ln \tanh(J/K_B T)} \quad (4.32)$$

que coincide com o resultado exato encontrado na equação (3.28)

A tendência ao desordem em baixa dimensionalidade é uma característica geral dos sistemas. Existe uma dimensão crítica  $d_\ell$  chamada de *dimensão crítica inferior*, abaixo da qual o sistema não pode mais apresentar fase ordenada de longo alcance para  $T > 0$ . Para o modelo de Ising, ou de forma mais geral, para qualquer modelo com simetria discreta a dimensão crítica inferior é  $d_\ell = 1$ . Já para sistemas com interações de alcance finita e simetrias contínuas, a dimensão crítica inferior é  $d_\ell = 2$ . Este fato é conhecido como o teorema de Mermin-Wagner.

### 4.3 O modelo de Ising em dimensão superior

O grupo de renormalização em espaço real, também chamado de “decimação”, não é tão eficiente em dimensão superior como em uma dimensão. De qualquer forma, é simples entender o comportamento do sistema de forma qualitativa.

Para temperatura baixa  $T \rightarrow 0$  ( $K \rightarrow \infty$ ) a TGR em uma dimensão é  $K' \sim K$ , como pode ser facilmente demonstrado linearizando a equação (4.24). A interpretação

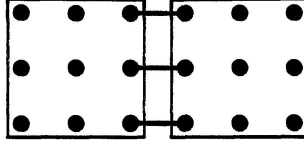


Figura 4.7: 2dbloks.eps

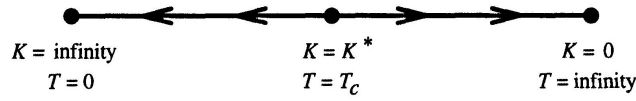


Figura 4.8: 2dflow.eps

física desse resultado é clara. A interação efetiva é produzida pela soma sobre os spins extremos que unem dois blocos e pode ser aproximada como

$$K' \sim K \langle S_3 \rangle_{S'_1=1} \langle S_4 \rangle_{S'_2=1} \quad (4.33)$$

A média indicada sobre os spins  $S_3$  e  $S_4$  condicionada a que  $S'_1 = 1$ ,  $S'_2 = 1$  é claramente um, para temperaturas muito próxima de zero, já que nessa condição o estado tem uma forte tendência a ser ordenado. Por esse motivo  $K' \sim K$ .

O mesmo argumento aplicado a um sistema bidimensional forneceria um resultado  $K' \sim 3K$ , já que o acoplamento efetivo entre blocos seria dado, principalmente, pela soma sobre três pares de spins, como mostra a figura (4.7). De forma geral, se considerado um fator de dilatação  $b > 1$  em  $d$  dimensões obteríamos que a baixas temperaturas

$$K' \sim (b^{d-1}) K. \quad (4.34)$$

A partir dessa expressão observamos que o ponto fixo  $K = \infty$  ou  $T = 0$  é um ponto fixo atrativo para dimensão  $d > 1$ . Por outro lado, o ponto fixo  $K = 0$  ( $T = \infty$ ) também é atrativo, já que trata-se da fase paramagnética de altas temperaturas. Portanto, a topologia do diagrama de fluxo em  $d > 1$  é completamente diferente que no caso  $d = 1$ . Em particular, deve existir um ponto fixo intermédio  $K = K^*$  que separe o comportamento paramagnético do ferromagnético como indica a figura (4.8).

Para entender o caráter desse novo ponto fixo podemos analisar o fluxo do GR a partir de um ponto perto dele. Por exemplo, consideremos um ponto  $K$  perto do ponto fixo para temperaturas  $T > T_c$ . Aplicando iterativamente uma TGR, o ponto flui para o ponto fixo paramagnético  $T = \infty$ . Imaginemos que aplicamos  $n$  vezes a TGR até atingir um ponto  $K' = K_0$  correspondente a um comprimento de correlação fixo  $\xi_0 \sim 1$ . Temos então que

$$\xi(K) = b^{n(K)} \xi_0 \quad (4.35)$$

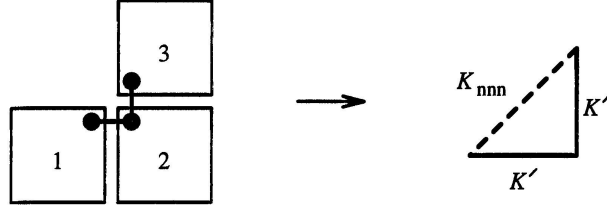


Figura 4.9: nextneighbours.eps

O número de iterações necessárias para atingir o ponto  $K' = K_0$  depende da posição do ponto inicial  $K$ . Quanto mais próximo estiver esse ponto do ponto fixo  $K^*$ , maior será o número de iterações necessárias. Em particular, dado que  $K^*$  é um ponto fixo,  $K^* = R(K^*)$ ,

$$\lim_{K \rightarrow K^*} n(K) = \infty \quad (4.36)$$

o que significa que

$$\lim_{K \rightarrow K^*} \xi(K) = \infty \quad (4.37)$$

portanto,  $K = K^*$  é um *ponto crítico* com comprimento de correlação infinita.

De qualquer forma, tem que ser notado que o presente problema foi extremamente simplificado, já que estamos considerando apenas uma constante de acoplamento. Para um sistema bidimensional, a soma sobre os spins extremos vai induzir também interações de alcance maior como se mostra na figura (4.9). Aplicando uma vez a TGR, se partirmos de um hamiltoniano com interações a primeiros vizinhos obtemos um hamiltoniano transformado com interações a segundos vizinhos

$$H(S) = -K \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \rightarrow H'(S') = -K' \sum_{\langle ij \rangle} S'_i S'_j - K'' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} S'_i S'_j \quad (4.38)$$

Em geral, aplicando a TGR  $n$  vezes, são geradas todas as interações possíveis de alcance finito, compatíveis com a simetria  $S \rightarrow -S$ . A estrutura do fluxo do GR é muito mais complicada que o fluxo unidimensional analisado.

## 4.4 Teoria geral

A teoria geral do Grupo de Renormalização é baseada na análise do fluxo do GR no espaço das constantes de acoplamento. As hipóteses básicas desta análise são as seguintes:

1. Consideramos um espaço vetorial  $n$ -dimensional formado pelas constantes de acoplamento  $\{K\}$ . A dimensão deste espaço pode ser infinita.

2. Assumimos a existência de uma transformação do Grupo de Renormalização

$$\{K'\} = R\{K\} \quad (4.39)$$

3. Assumimos a existência de um ponto fixo  $K^*$  tal que

$$\{K^*\} = R\{K^*\} \quad (4.40)$$

4. Assumimos que  $R\{K^*\}$  é diferenciável

Com essas suposições podemos linearizar a transformação perto do ponto fixo

$$K'_a - K_a^* \sim \sum_b T_{ab} (K_b - K_b^*) \quad (4.41)$$

onde  $K_a$  é a componente  $a$  do vetor  $K$  com  $a = 1, 2, \dots, n$ . A transformação linear fica caracterizada pela matriz  $T$  cujas componentes são

$$T_{ab} = \left. \frac{\partial K'_a}{\partial K_b} \right|_{K=K^*} . \quad (4.42)$$

#### 4.4.1 Variáveis de escala

É conveniente trabalhar em uma base do espaço vetorial das constantes de acoplamento que transformem de maneira simples perante uma TGR. Para isto, consideramos agora os autovalores e autovetores da matriz  $T$ ,

$$\sum_a e_a^i T_{ab} = \lambda^i e_b^i \quad (4.43)$$

onde  $e_a^i$  é a  $a$ -ésima componente do autovetor  $\vec{e}^i$  e  $\lambda^i$  são os autovalores.

Podemos definir agora combinações lineares das constantes de acoplamento conhecidas como variáveis de escala

$$u_i \equiv \sum_a e_a^i (K_a - K_a^*) . \quad (4.44)$$

As propriedades mais importantes dessas variáveis são, por um lado,

$$u_i(K^*) = 0 . \quad (4.45)$$

Ou seja, o ponto fixo  $K^*$  fica definido por  $u_i = 0$  para  $i = 1, \dots, n$ . Por outro lado, a transformação do grupo de renormalização linearizada fica definida de forma simples

$$u'_i = \lambda^i u_i \quad (4.46)$$

e é por esse motivo que  $u_i$  são chamadas de variáveis de escala. Elas transformam simplesmente mudando sua escala quando uma TGR é aplicada.

Podemos classificar as variáveis de escala  $u_i$ , dependendo do valor dos autovalores  $\lambda^i$ . É útil escrever os autovalores na forma  $\lambda^i = b^{y_i}$  onde  $b$  é o fator de dilatação e  $y_i$  um expoente real. Temos então a seguinte classificação:

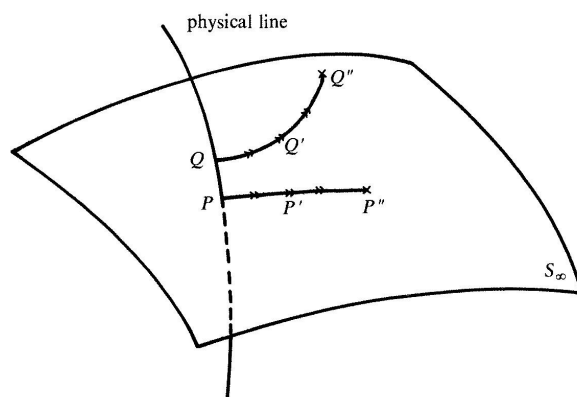


Figura 4.10: superficiecritica.eps

1. Se  $y_i > 0$ ,  $\lambda_i > 1$ ,  $u_i$  é uma variável relevante
2. Se  $y_i < 0$ ,  $\lambda_i < 1$ ,  $u_i$  é uma variável irrelevante
3. Se  $y_i = 0$ ,  $\lambda_i = 1$ ,  $u_i$  é uma variável marginal

As variáveis relevantes se afastam do ponto fixo quando são submetidas a uma TGR, já que ela é multiplicada por um número maior que um ( $\lambda_i > 1$ ), enquanto que as irrelevantes fluem ao ponto fixo ( $u_i = 0$ ) já que a transformação multiplica elas por uma escala menor que um ( $\lambda_i < 1$ ). As variáveis marginais não se transformam perante uma TGR e poderiam formar parte do ponto fixo.

Suponhamos um sistema com  $n$  variáveis relevantes e  $n' - n$  variáveis irrelevantes. As  $n' - n$  variáveis irrelevantes definem o hiperplano crítico em que todos os pontos estão dominados pelo ponto crítico. Isto é, cada ponto do hiperplano crítico, representa um hamiltoniano com as mesmas propriedades de longas distâncias que o ponto crítico, isto é  $\xi = \infty$ . Esse hiperplano é simbolizado com  $S_\infty$  na figura 4.10. As variáveis relevantes estão associadas geralmente (nem sempre é óbvio) com o número de variáveis “experimentais” que devemos ajustar para alcançar o ponto crítico. Por exemplo, variando a temperatura geramos uma linha física que geralmente atravessa a superfície crítica. Qualquer ponto sobre a linha física fora do hiperplano crítico se afastará do ponto crítico. Indicamos isto no esquema da figura 4.10.

### Exemplo de um ferromagneto

A modo de exemplo, num ferromagneto uniaxial, temos duas variáveis relevantes: uma associada com a temperatura  $T$  e a outra com o campo magnético  $H$ . De fato, o diagrama de fases de um ferromagneto uniaxial geralmente tem essas duas variáveis que devem ser ajustadas para alcançar o ponto crítico.

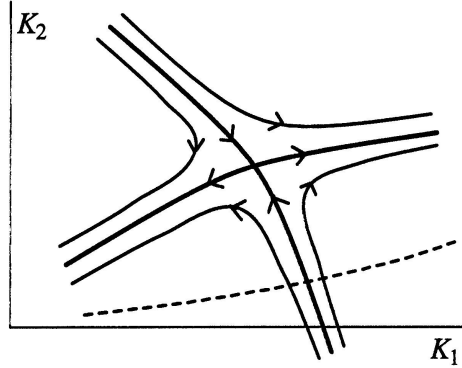


Figura 4.11: flowexample.eps

Na descrição microscópica temos variáveis de escala pares e ímpares perante a transformação  $S \rightarrow -S$ . As ímpares estão associadas ao campo magnético  $H$ , dado que este quebra explicitamente a simetria  $S \rightarrow -S$ . Apenas existem dois tipos de variáveis porque elas correspondem as duas representações irredutíveis do grupo de simetria  $Z_2$ . Para grupos de simetria mais complexos temos tantas classes de acoplamentos como representações irredutíveis tenha o grupo de simetria.

Isto significa que os autovetores da matriz  $T$  podem ser classificados de acordo com o sub-espço a que eles correspondem. Deve haver uma variável de escala relevante no sub-espço par, que chamamos de variável térmica, e uma variável relevante no espço ímpar que chamamos variável magnética. A estrutura da matriz  $T$  tem dois blocos da forma

$$T = \left( \begin{array}{c|c} T & 0 \\ \hline 0 & H \end{array} \right) \quad (4.47)$$

O ponto crítico é alcançado para  $H = 0$ . Portanto, ele se encontra no sub-espço de funções pares. Isto permite reduzir o problema do estudo do ponto crítico, ao estudo de apenas uma variável relevante no sub-espço térmico. As variáveis irrelevantes em geral são funções complicadas da temperatura e são infinitas.

Consideremos por simplicidade um espço de duas dimensões. Por exemplo, temos uma variável relevante e outra irrelevante. Podemos considerar o modelo de Ising com acoplamento de primeiros e segundos vizinhos,

$$\mathcal{H} = -K_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - K_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} S_i S_j \quad (4.48)$$

O diagrama de fluxo do GR tem a forma da figura (4.11). O ponto crítico é alcançado para algum valor das constantes de acoplamento  $K_1 = K_1^*$  e  $K_2 = K_2^*$ . Existe a chamada linha física associada à variável relevante que flui afastando-se do ponto crítico. Pontos sobre esta linha fluem, bem para a fase paramagnética  $T = \infty$ , bem para a

fase ferromagnética  $T = 0$ . A linearização dessa curva perto do ponto crítico fornece a combinação linear de  $K_1$  e  $K_2$  que fornece a variável de escala relevante.

Por outro lado existe uma linha que flui ao ponto crítico. É a superfície crítica que, no caso, é uma linha. Pontos sobre esta linha estão dominados pelas propriedades do ponto crítico. Esta linha separa o plano  $K_1 - K_2$  em duas regiões: uma dominada pelo ponto fixo paramagnético  $T = \infty$  e a outra dominada pelo ponto fixo ferromagnético  $T = 0$ .

Se considerarmos o modelo de Ising com acoplamento apenas a primeiros vizinhos ( $K_2 = 0$ ) e aumentamos a temperatura, vamos encontrar a interseção da linha crítica com o eixo  $K_2 = 0$ . Este ponto representa a transição de fase e determina a temperatura de transição do modelo. Se considerarmos agora uma pequena interação entre segundos vizinhos e aumentamos a temperatura a partir de zero, a linha física é representada no gráfico da figura (4.11) pela linha pontilhada. A interseção da linha pontilhada com a crítica determina a temperatura crítica desse modelo. Vemos que a temperatura crítica depende do modelo considerado; ela não é uma grandeza universal. Pelo contrario, as propriedades críticas de longas distâncias dos dois modelos são exatamente as mesmas, já que elas se encontram sobre a linha crítica e qualquer ponto sobre essa linha tem a mesmas propriedades assintóticas que o ponto crítico. Este é o conceito básico de universalidade.

#### 4.4.2 Propriedades de escala da energia Livre

Os expoentes críticos, podem ser obtidos a partir do diagrama de fluxos do grupo de renormalização perto do ponto crítico. Para entender como isto pode ser realizado estudamos as propriedades de escala da energia livre. No presente exemplo temos duas variáveis relevantes; a variável térmica  $u_t$  e a magnética  $u_h$ . Cada uma delas é caracterizada por um autovalor  $y_t > 0$  e  $y_h > 0$  respetivamente. Por outro lado existem infinitas variáveis irrelevantes  $u_3, u_4, \dots$ , cujos autovalores associados são  $y_3 < 0, y_4 < 0, \dots$ .

Uma transformação do grupo de renormalização preserva a função de partição então, a energia livre transforma como

$$Nf(K) \rightarrow Ng(K) + N'f(K') \quad (4.49)$$

$f(K)$  é a densidade de energia livre (ou energia por spin).

A função  $g(K)$  é analítica e tem sua origem na integração de graus de liberdade de pequenas distâncias. Ela contribui com uma constante global de normalização a nova função de partição, portanto ela não participa na transição de fase. Para o estudo dos expoentes críticos é suficiente considerar a parte singular da energia livre,  $F_s(K) = Nf_s(K)$ . Como o número de spins escala perante uma TGR como  $N' = b^{-d}N$ , onde  $b > 1$  é o fator de dilatação e  $d$  a dimensionalidade, temos que a densidade de energia livre satisfaz

$$f_s(K) = b^{-d}f_s(K') \quad (4.50)$$

Se começarmos o fluxo perto do ponto crítico, temos depois de  $n$  iterações do GR,

$$\begin{aligned} f_s(u_t, u_h, u_3, u_4, \dots) &= b^{-d} f_s(e^{y_t} u_t, e^{y_h} u_h, e^{ny_3} u_3, e^{ny_4} u_4, \dots) \\ &= b^{-nd} f_s(e^{ny_t} u_t, e^{ny_h} u_h, e^{ny_3} u_3, e^{ny_4} u_4, \dots) \end{aligned} \quad (4.51)$$

Note que, ao começar perto de ponto fixo, faz sentido considerar as variáveis de escala  $u_i \ll 1$ , por outro lado,  $y_3$  e  $y_4$  são negativos, por esse motivo, as variáveis irrelevantes se aproximam rapidamente do ponto fixo e podemos ignorá-las.

$$f_s(u_t, u_h) \approx b^{-nd} f_s(e^{ny_t} u_t, e^{ny_h} u_h) \quad (4.52)$$

As variáveis relevantes crescem com a aplicação da TGR. Portanto, não podemos iterar indefinidamente porque nos afastaríamos da região crítica. Dessa forma, iteramos até a variável térmica atingir um limite  $u_{t_0} \ll 1$ .

$$|e^{ny_t} u_t| = u_{t_0} \quad (4.53)$$

Ou seja, iteramos até um valor de  $n$  onde a aproximação linear da transformação ainda é válida,

$$n = \frac{1}{y_t} \ln \left( \frac{u_{t_0}}{u_t} \right) \quad (4.54)$$

Perto do ponto crítico,  $u_t$  e  $u_h$  são funções analíticas de  $T$  e  $h$  que, por simetria, tem a forma

$$u_t = \frac{t}{t_0} + O(t^2, h^2) \quad (4.55)$$

$$u_h = \frac{h}{h_0} + O(th) \quad (4.56)$$

onde  $r$  e  $h$  são a temperatura e campo magnético reduzidos e  $t_0$  e  $h_0$  são constantes de referência microscópicas.

Substituindo o valor de  $n$  máximo, dado pela equação (4.54), na equação (4.52) e usando as equações (4.55) e (4.56) chegamos à forma,

$$f_s(t, h) = \left| \frac{t}{t_0} \right|^{d/y_t} \Phi \left( \frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}} \right), \quad (4.57)$$

onde  $\Phi$  é uma função universal chamada função de escala.

É interessante notar que a forma da equação (4.57) foi obtida sem conhecer nenhum detalhe do modelo microscópico. A única suposição é que na vizinhança do ponto crítico existem duas variáveis de escala relevantes. Embora a forma específica da função  $\Phi$  não seja conhecida, a forma como escalam as variáveis é suficiente para calcular os expoentes críticos associados com o ponto crítico em questão.

### 4.4.3 Expoentes críticos

A partir da equação (4.57) podemos calcular os expoentes críticos do ponto fixo  $K^*$  em função dos autovalores  $y_t$  e  $y_h$ .

O calor específico pode ser calculado a partir de

$$C = \beta \left. \frac{\partial f_s}{\partial T} \right|_{h=0} \sim t^{d/y_t-2} \quad (4.58)$$

Portanto o expoente crítico associado é

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t} \quad (4.59)$$

Vemos que apenas o autovalor da variável térmica e a dimensionalidade são suficientes para conhecer a dependência do calor específico com a temperatura, perto do ponto crítico.

A magnetização tem a forma

$$M = \left. \frac{\partial f_s}{\partial h} \right|_{h=0} \sim (-t)^{\frac{d-y_h}{y_t}} \quad (4.60)$$

obtendo o expoente crítico

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} \quad (4.61)$$

Nesse caso, além da dimensionalidade, os autovalores associados com as duas variáveis de escala relevantes contribuem para determinar o comportamento do parâmetro de ordem.

Da mesma forma podemos calcular a suscetibilidade dada por

$$\chi = \left. \frac{\partial^2 f_s}{\partial h^2} \right|_{h=0} \sim |t|^{\frac{d-2y_h}{y_t}} \quad (4.62)$$

obtendo como conseqüência

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} \quad (4.63)$$

Podemos calcular também a magnetização em função do campo magnético na temperatura crítica obtendo o expoente crítico apenas em função do autovalor da variável magnética e a dimensionalidade,

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h} \quad (4.64)$$

Observamos que os quatro expoentes críticos,  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ , dependem apenas da dimensionalidade e dos autovalores das variáveis relevantes da transformação linearizada no ponto crítico. Portanto, eles não são independentes. A partir das equações (4.59), (4.61), (4.63) e (4.64), podem ser estabelecidas as seguintes relações de escala

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (4.65)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2 \quad (4.66)$$

Essas relações, não dependem da dimensionalidade e fornecem um vínculo não trivial entre a magnetização, o calor específico e a suscetibilidade perto de um ponto crítico. Elas são uma das grandes predições do grupo de renormalização, e foram comprovadas experimentalmente com um grau de precisão muito alto.

#### 4.4.4 A função beta

É possível escrever equações diferenciais que descrevem o fluxo do GR. Embora tenhamos trabalhado com o processo de blocos com um fator de dilatação  $b$ , como os expoentes críticos não dependem de  $b$ , poderíamos considerar o fator de dilatação  $b > 1$  como um número real arbitrário infinitesimalmente maior que 1.

$$b = 1 + \delta\ell \quad \text{com } \delta\ell \ll 1 \quad (4.67)$$

Isto define uma transformação do grupo de renormalização infinitesimal. Então, a mudança nas constantes de acoplamento pode ser expandida como

$$K'_a = K_a + \frac{dK_a}{d\ell} \delta\ell + O(\delta\ell^2) \quad (4.68)$$

definimos então a função

$$\frac{dK_a}{d\ell} = -\beta_a(K) \quad (4.69)$$

Usando esta formulação, os pontos fixos do GR são dados pelos zeros da função beta.

$$\beta_a(\{K^*\}) = 0 \quad (4.70)$$

A matriz de derivadas do GR  $T_{ab}$  tem agora a forma

$$T_{ab} = \delta_{a,b} + \left( \frac{\partial \beta_a}{\partial K_b} \right) \delta\ell \quad (4.71)$$

e os autovalores são

$$\lambda_i = (1 + \delta\ell)^{y_i} \sim 1 + y_i \delta\ell \quad (4.72)$$

portanto os valores  $y_i$  são os autovalores da matriz  $-\partial\beta_a/\partial K_b$ .

Na prática, o uso do grupo de renormalização passa pelo cálculo da função  $\beta$ . A partir dos zeros desta e dos autovalores da sua derivada é possível caracterizar completamente os pontos críticos e as transições de fase.

## Capítulo 5

# O Grupo de Renormalização em espaço de Fourier

Os exemplos descritos até agora mostram uma técnica chamada de grupo de renormalização em espaço real, ou espaço de configuração. Porém, existe uma técnica mais sistemática para chegar as equações de fluxo do grupo de renormalização em espaço de Fourier. Tanto para modelos discretos quanto para modelos contínuos, o espaço de momentos correspondente sempre será contínuo. Por esse motivo, é interessante refazer as transformações do grupo de renormalização no espaço de Fourier. A ideia é integrar sobre comprimentos de onda curtos (ou momentos grandes) e obter uma teoria efetiva para comprimentos de onda grandes (ou momentos pequenos). Nos modelos de rede, existe uma distância mínima em espaço de configuração que é o espaçamento de rede  $a$ . Isto implica que, no espaço de momentos, existe um momento máximo  $\Lambda \propto 1/a$ . Em modelos contínuos, esse momento máximo deve ser introduzido na forma de um *cut-off* ultravioleta  $\Lambda$ . O esquema de uma transformação do grupo de renormalização em espaço de momentos é esquematizado na figura 5.1 O primeiro passo é reduzir o cut-off

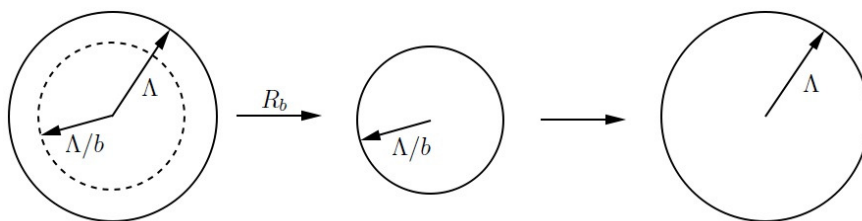


Figura 5.1: Ilustração do processo de renormalização.

com o fator de dilatação  $b > 1$ , de forma que  $\Lambda \rightarrow \Lambda/b$ . Este passo é completamente equivalente a escolher blocos de spins de tamanho  $b^d$  em espaço de configuração como temos ilustrado nos capítulos anteriores. O segundo passo é integrar sobre a casca esférica de raio maior  $\Lambda$  e raio menor  $\Lambda' = \Lambda/b$ . O resultado é um novo sistema, onde

os graus de liberdade tem um novo cut-off ultravioleta  $\Lambda' = \Lambda/b$ . Este novo sistema é equivalente em espaço de configuração a uma nova rede cujo parâmetro de rede é  $b^d a$ . Para poder comparar o novo sistema com o original, é necessário reescalar o momento em um fator  $b$  para voltar as unidades originais.

Com o intuito de mostrar explicitamente como fazer esse procedimento, recorremos a um sistema cujos graus de liberdade são descritos por um campo escalar  $\phi(\mathbf{x})$ , cuja transformada de Fourier é  $\tilde{\phi}(\mathbf{q})$ . O campo escalar  $\tilde{\phi}(\mathbf{q})$  pode ser separado em duas componentes: uma com suporte na casca esférica  $\Lambda/b < |\mathbf{q}| < \Lambda$  e a outra com suporte na esfera  $|\mathbf{q}| < \Lambda/b$ . Explicitamente,

$$\tilde{\phi}(\mathbf{q}) = \tilde{\phi}^>(\mathbf{q}) + \tilde{\phi}^<(\mathbf{q}) \quad (5.1)$$

onde temos definido

$$\tilde{\phi}^<(\mathbf{q}) \equiv \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \Theta\left(\frac{\Lambda}{b} - |\mathbf{q}|\right) \quad (5.2)$$

$$\tilde{\phi}^>(\mathbf{q}) \equiv \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \Theta\left(|\mathbf{q}| - \frac{\Lambda}{b}\right) \quad (5.3)$$

com a função de Heaviside (função degrau) dada por

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{para } x > 0 \\ 0 & \text{para } x < 0 \end{cases} \quad (5.4)$$

As componentes no espaço de configuração  $\phi^<(\mathbf{x})$  e  $\phi^>(\mathbf{x})$  são as anti-transformadas de Fourier dos campos  $\tilde{\phi}^<(\mathbf{q})$  e  $\tilde{\phi}^>(\mathbf{q})$  respectivamente. Por uma questão de simplicidade na notação, quando não houver lugar a confusão, deixaremos de usar o “ $\sim$ ” para os campos no espaço de Fourier. Sendo assim, a transformada de Fourier de  $\phi(\mathbf{x})$  será  $\phi(\mathbf{q})$ . Embora usemos o mesmo símbolo  $\phi$ , é claro que trata-se de funções diferentes.

Consideramos agora que o sistema é definido por um hamiltoniano  $\mathcal{H}_\Lambda[\phi]$ , onde o sub-índice  $\Lambda$  indica que as integrais de momento devem ser calculadas com esse cut-off. Definimos agora a transformação do grupo de renormalização da seguinte forma,

$$e^{-\mathcal{H}'_{\frac{\Lambda}{b}}[\phi^<]} = \int \mathcal{D}\phi^> e^{-\mathcal{H}_\Lambda[\phi^> + \phi^<]} \quad (5.5)$$

Essa equação pode ser considerada como a definição do novo hamiltoniano  $\mathcal{H}'_{\frac{\Lambda}{b}}[\phi^<]$ . Ela é completamente análoga à definição (4.3) para um sistema de spins. Da mesma forma que no sistema de spins, não é difícil mostrar que essa transformação deixa a função de partição invariante. Ou seja, estamos descrevendo o mesmo sistema físico com graus de liberdade que representam uma escala maior de distâncias, ou menor de momentos. O novo hamiltoniano assim definido representa um sistema cujo máximo valor do momento é  $\Lambda' = \Lambda/b$ . Também, ele contém a informação dos graus de liberdade de momentos altos devido à integração funcional feita na sua definição, equação (5.5). Para poder compará-lo com o hamiltoniano original, devemos reescalar os momentos e

os campos, de tal forma que o novo hamiltoniano fique definido no mesmo domínio de momentos. Por esse motivo fazemos a seguinte mudança de variáveis,

$$q'_i = b q_i \quad (5.6)$$

$$\phi_{<} \left( \frac{q'}{b} \right) = \xi(b) \phi'(q') \quad (5.7)$$

Ou seja, dilatamos cada componente  $i = 1, \dots$  do momento  $q_i$  por um fator  $b > 1$ . Também, mudamos a escala do campo numa quantidade  $\xi(b)$  que depende do fator de dilatação  $b$ . Com essa mudança, a integração no novo hamiltoniano, que era sobre a variável  $q < \Lambda/b$ , passa a ser sobre a variável  $q' < \Lambda$ , ou seja  $\mathcal{H}'_{\Lambda}(\phi')$ . Desta forma, a transformação do grupo de renormalização, assim definida transforma

$$\mathcal{H}_{\Lambda}(\phi) \rightarrow \mathcal{H}'_{\Lambda}(\phi') \quad (5.8)$$

com  $Z = Z'$ . Note que os dois hamiltonianos tem o mesmo domínio de integração, então podem ser comparados.

## 5.1 O modelo gaussiano

A modo de exemplo, aplicamos a técnica descrita na seção anterior ao modelo Gaussiano, cujo hamiltoniano é

$$\mathcal{H}_{\Lambda} = \frac{1}{2} \int d^d x \{c |\nabla \phi|^2 + r^2 \phi^2(x)\}. \quad (5.9)$$

O sub-índice  $\Lambda$ , indica que no espaço de momentos o sistema tem um *cut-off*  $\Lambda$  ou, no espaço de configuração, existe uma distância mínima  $a \sim 1/\Lambda$ . O hamiltoniano (5.9) tem a simetria de Ising; ele é invariante perante a troca  $\phi \rightarrow -\phi$ .

No espaço de Fourier, o hamiltoniano assume a seguinte forma:

$$\mathcal{H}_{\Lambda} = \frac{1}{2} \int_{q \leq \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (r + cq^2) |\phi(q)|^2 \quad (5.10)$$

onde  $q = |\mathbf{q}|$ , e o domínio de integração  $q \leq \Lambda$  é indicado explicitamente.

O primeiro passo para implementar uma transformação do GR é diminuir o *cut off* até  $\Lambda' = \Lambda/b$  e separar o campo em duas componentes

$$\phi(q) = \phi^{>}(q) + \phi^{<}(q) \quad (5.11)$$

onde

$$\phi^{>}(\mathbf{q}) = \phi(\mathbf{q}) \Theta(q - \frac{\Lambda}{b}) \quad (5.12)$$

$$\phi^{<}(\mathbf{q}) = \phi(\mathbf{q}) \Theta(\frac{\Lambda}{b} - q) \quad (5.13)$$

Em termo dessas expressões temos que,

$$|\phi(\mathbf{q})|^2 = |\phi^<(\mathbf{q}) + \phi^>(\mathbf{q})|^2 = |\phi^<(\mathbf{q})|^2 + |\phi^>(\mathbf{q})|^2 + \phi^<(\mathbf{q})\phi^{>*}(\mathbf{q}) + \phi^{<*}(\mathbf{q})\phi^>(\mathbf{q}) \quad (5.14)$$

Os dois últimos termos da soma acima são nulos por se tratarem, basicamente, do produto  $\Theta\left(\frac{\Lambda}{b} - q\right)\Theta\left(q - \frac{\Lambda}{b}\right)$ . Portanto, não existem termos que acoplam os campos  $\phi^<$  e  $\phi^>$ . Consequentemente, o hamiltoniano se reduz a soma de dois hamiltonianos da forma,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^>[\phi^>] + \mathcal{H}^<[\phi^<] \quad (5.15)$$

A transformação do GR dada pela equação (5.5), pode ser agora facilmente calculada,

$$e^{-\mathcal{H}'_{\frac{\Lambda}{b}}[\phi^<]} = \int \mathcal{D}\phi^> e^{-\mathcal{H}^>[\phi^>] - \mathcal{H}^<[\phi^<]} \quad (5.16)$$

$$= \mathcal{N} e^{-\mathcal{H}^<[\phi^<]} \quad (5.17)$$

Onde a constante multiplicativa

$$\mathcal{N} = \int \mathcal{D}\phi^> e^{-\mathcal{H}^>[\phi^>]} \quad (5.18)$$

Desta forma, o hamiltoniano transformado, depois de integrar sobre modos de comprimentos de onda largos tem a forma,

$$\mathcal{H}'_{\frac{\Lambda}{b}}[\phi^<] = \frac{1}{2} \int_{q < \frac{\Lambda}{b}} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (r + cq^2) |\phi^<(q)|^2 \quad (5.19)$$

Ou seja, o hamiltoniano transformado tem exatamente a mesma forma que o hamiltoniano original. A única diferença é que o domínio de integração foi restringido a  $q < \Lambda/b$ . Vemos então que se quisermos comparar os hamiltonianos dados pelas equações (5.10) e (5.19) temos que mudar as variáveis de integração com o objetivo que as duas expressões tenham o mesmo domínio de integração. Para isto fazemos na equação (5.19) a seguinte transformação de escala

$$\begin{aligned} \mathbf{q}' &= b\mathbf{q} \\ \phi^<(\mathbf{q}'/b) &= \xi \phi'(\mathbf{q}') \end{aligned} \quad (5.20)$$

Com isto, o hamiltoniano tem a forma,

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{2} \int_{q' < \Lambda} \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} b^{-d} \xi^2 (r + cb^2 q'^2) |\phi'(\mathbf{q}')|^2 \quad (5.21)$$

Note que o domínio de integração voltou ao original  $q' < \Lambda$ . Podemos reescrever o hamiltoniano da seguinte forma,

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{2} \int_{q < \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (r' + c'q^2) |\phi(\mathbf{q})|^2 \quad (5.22)$$

onde definimos as constantes,

$$r' = b^{-d}\xi^2 r \quad (5.23)$$

$$c' = b^{-(d+2)}\xi^2 c \quad (5.24)$$

e tiramos as linhas das variáveis de momento e dos campos, já que não se faz mais necessário recarregar a notação.

Podemos comparar agora o hamiltoniano original dado pela equação (5.10) com o hamiltoniano obtido fazendo uma transformação do grupo de renormalização, dado pela equação (5.22). Observamos que eles tem exatamente a mesma forma, porém as constantes de acoplamento foram redefinidas  $\{c, r\} \rightarrow \{c', r'\}$ . Desta forma, o fluxo do GR no espaço de constantes de acoplamento é definido pelas equações (5.23) e (5.24) que podem ser reescritas da forma mais simples,

$$r' = b^{2-\eta} r \quad (5.25)$$

$$c' = b^{-\eta} c \quad (5.26)$$

onde introduzimos o expoente  $\eta$ , *chamado de dimensão anômala*, como uma forma de parametrizar o escalamento do campo, escolhendo,

$$\xi = b^{\frac{d+2-\eta}{2}} \quad (5.27)$$

As equações (5.25) e (5.26) são as equações do grupo de renormalização do modelo gaussiano.

De posse das equações de fluxo, podemos analisar os pontos fixos e as variáveis de escala. É fácil observar que no nosso caso temos duas situações diferentes. Escolhendo  $\eta = 2$ , as equações se reduzem a

$$r' = r \quad (5.28)$$

$$c' = b^{-2} c \quad (5.29)$$

É claro que nesse caso  $r$  é uma variável de escala marginal, já que ela não evolui com uma TGR. O ponto fixo da transformação é dado então por  $c = 0$  (e  $r$  arbitrário), sendo  $c$  uma variável de escala irrelevante. Temos então que este ponto fixo não tem variáveis de escala relevantes, e o hamiltoniano do ponto fixo se reduz a

$$\mathcal{H} = \frac{r}{2} \int d^d x \phi^2(\mathbf{x}) \quad (5.30)$$

Isto implica que o ponto fixo com  $\eta = 2$  representa uma fase a temperatura infinita, já que é representada por variáveis independentes em cada ponto do espaço, cuja media é sempre zero  $\langle \phi(x) \rangle = 0$ . Neste sentido, o ponto fixo obtido para  $\eta = 2$  não é interessante já que ele não descreve uma transição de fase, mas apenas uma fase desordenada.

Porém, existe outro ponto fixo para  $\eta = 0$ , que pode ser obtido das equações,

$$r' = b^2 r \quad (5.31)$$

$$c' = c \quad (5.32)$$

A partir dessas equações, observamos que existe um ponto fixo em  $r = 0$ , onde  $r$  é uma variável de escala relevante, e  $c$  é marginal. Portanto, o fluxo do GR tende a se afastar do ponto  $r = 0$  que separa duas fases bem definidas. Ainda, podemos considerar que o coeficiente de dilatação é  $b = 1 + \delta\ell$ , com  $\delta\ell$  infinitesimal. Podemos escrever então as equações do GR como um sistema de equações diferenciais

$$\frac{dr}{d\ell} = 2r \quad (5.33)$$

$$\frac{dc}{d\ell} = 0 \quad (5.34)$$

Lemos destas equações os autovalores correspondentes as variáveis de escala  $y_r = 2$  e  $y_c = 0$ .

## 5.2 Derivadas de ordem superior

No modelo gaussiano, consideramos somente a derivada primeira do campo. Uma pergunta válida seria se termos com derivadas de ordem superior mudam de alguma forma o modelo estudado. De forma geral, o termo que contém a derivada segunda de  $\phi$  e que respeita a simetria do problema (invariância frente a troca  $\phi \rightarrow -\phi$  e invariância rotacional) é dado por:

$$w_0 \int d^d x (\nabla^2 \phi)^2 \quad (5.35)$$

onde  $\nabla^2$  é o operador laplaciano em  $d$  dimensões. O hamiltoniano é escrito como

$$\mathcal{H}_\Lambda = \frac{1}{2} \int d^d x \{w_0 (\nabla^2 \phi)^2 + c |\nabla \phi|^2 + r^2 \phi^2(x)\}. \quad (5.36)$$

cuja versão em espaço de Fourier é

$$\mathcal{H}_\Lambda = \frac{1}{2} \int_{q \leq \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (r + cq^2 + w_0 q^4) |\phi(q)|^2 \quad (5.37)$$

Observamos que o modelo continua sendo gaussiano o que permite separar o hamiltoniano em dois termos, um contendo o campo  $\phi^>$  e o outro contendo apenas o campo  $\phi^<$ . Logo, integrando em  $\phi^>$  e fazendo a mesma transformação de escala dada pela equação (5.20) obtemos,

$$\mathcal{H}_\Lambda = \frac{1}{2} \int_{q \leq \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} (r' + c'q^2 + w'_0 q^4) |\phi(q)|^2 \quad (5.38)$$

onde definimos as novas constantes de acoplamento

$$r' = b^2 r \quad (5.39)$$

$$c' = c \quad (5.40)$$

$$w'_0 = b^{-2} w_0 \quad (5.41)$$

ou, em notação diferencial

$$\frac{dr}{d\ell} = 2r \quad (5.42)$$

$$\frac{dc}{d\ell} = 0 \quad (5.43)$$

$$\frac{dw_0}{d\ell} = -2w_0 \quad (5.44)$$

Observamos que o ponto fixo continua sendo  $r = 0$ ,  $w_0 = 0$  com  $c$  arbitrário. O termo com derivadas de ordem superior não mistura as diferentes constantes de acoplamento, tendo como consequência que  $r, c, w_0$  continuam sendo variáveis de escala. Ainda, observamos que o autovalor da variável  $w_0$  é  $y_{w_0} = -2$ , o que corresponde a uma variável de escala irrelevante. O fluxo descrito por estas equações do GR é representado na figura (5.2). Vemos que, se fixarmos uma condição inicial com  $r = 0$  e  $w_0 = \text{constante}$ ,

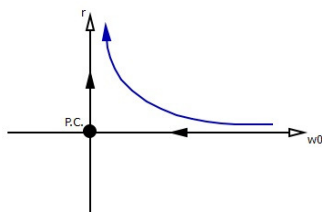


Figura 5.2: Diagrama de fluxo em termos da variável relevante  $r$  e a variável irrelevante  $w_0$

o fluxo converge ao ponto crítico. Isso é o que caracteriza a variável irrelevante  $w_0$ . Se começarmos com  $r > 0$ , o fluxo evolui para  $r \rightarrow \infty$ ,  $w_0 \rightarrow 0$ , o que caracteriza a fase desordenada com  $T = \infty$ . Nesse sentido, ao estudarmos a transição de fase descrita pelo ponto crítico gaussiano, podemos desprezar derivadas de ordem superior, já que esses termos são irrelevantes no sentido do GR, o que implica que na teoria efetiva de longas distâncias, esses termos escalam a zero.

### 5.3 Efeitos da rede

Existe uma pergunta importante em relação aos efeitos de uma rede, ou da formulação da teoria num espaço discreto. De um ponto de vista intuitivo, poderíamos supor que, num limite de longas distâncias, o efeito da rede deveria ser desprezível. Porém, o efeito da rede se manifesta de forma não trivial em relação à simetria do sistema. Por exemplo, se pensarmos um sistema bidimensional, o modelo contínuo tem simetria perante rotações contínuas no plano. A existência de uma rede quadrada quebra essa simetria, deixando uma simetria discreta residual como as rotações em um ângulo  $\pi/2$ . Passamos de um grupo de simetria contínuo,  $O(2)$  a um grupo de simetria discreto

$C_4$  (o grupo rotações pontuais numa rede quadrada). Então, não é evidente qual é o efeito da rede na transição de fase. Para entender isto de uma forma simples, podemos considerar um sistema gaussiano definido sobre uma rede quadrada em duas dimensões. Um hamiltoniano desse tipo pode ser escrito da seguinte forma,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \phi_i \phi_j + \alpha \sum_i \phi_i^2 \quad (5.45)$$

onde  $\phi_i$  é uma variável real, definida no sítio  $i$  de uma rede quadrada com parâmetro de rede  $a$ .  $J$  e  $\alpha$  são duas constantes de acoplamento positivas e  $\langle i, j \rangle$  significa somar sobre vizinhos próximos na rede.

Definimos agora a transformada de Fourier

$$\phi_j = \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \phi(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \quad (5.46)$$

onde  $\mathbf{r}_j = a(n_j\mathbf{i} + m_j\mathbf{j})$  com  $n_j$  e  $m_j$  números inteiros. Substituindo a equação (5.46) no hamiltoniano (5.45) e somando sobre todos os sítios da rede obtemos o hamiltoniano no espaço de momentos,

$$\mathcal{H} = \int_{q<\Lambda} \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \epsilon(\mathbf{q}) |\phi(\mathbf{q})|^2 \quad (5.47)$$

onde

$$\epsilon(\mathbf{q}) = \alpha - J [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)] \quad (5.48)$$

Observamos que  $\epsilon(\mathbf{q})$  é invariante se trocarmos  $q_x \leftrightarrow q_y$ , que nada mais é que uma rotação em  $\pi/2$ . Portanto, a simetria da rede quadrada se vê refletida de forma correta na estrutura da relação de dispersão  $\epsilon(\mathbf{q})$ . Verificamos também, que a integral nos momentos na equação (5.47) tem um *cut-off* natural  $\Lambda \sim 1/a$ . Dado que no integrando  $|qa| < 1$ , podemos expandir os cossenos em serie de potências de  $qa$ . Temos que,

$$\epsilon(\mathbf{q}) = \alpha - 2J + J \left[ \frac{1}{2!} \{ (q_x a)^2 + (q_y a)^2 \} - \frac{1}{4!} \{ (aq_x)^4 + (aq_y)^4 \} + \dots \right] \quad (5.49)$$

Substituindo essa expressão no hamiltoniano obtemos

$$\mathcal{H} = \int_{q<\Lambda} \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \{ r + cq^2 + w_0 (q_x^4 + q_y^4) \} |\phi(\mathbf{q})|^2 \quad (5.50)$$

onde definimos as constantes  $r = \alpha - 2J$ ,  $c = Ja^2/2$  e  $w_0 = -Ja^4/4$ . A primeira observação é que os dois primeiros termos do hamiltoniano coincidem com o modelo gaussiano contínuo estudado anteriormente. Esses termos são invariantes perante rotações contínuas no plano. Já o terceiro termo não pode ser escrito em função do módulo de  $\mathbf{q}$ . Essa contribuição não é invariante rotacional, tendo a simetria discreta da rede quadrada. Portanto, para  $q \rightarrow 0$ , o modelo é praticamente o modelo contínuo. Os efeitos da rede começam a ser observados na ordem  $q^4$ . Se agora analisarmos o hamiltoniano (5.50) usando o grupo de renormalização chegaremos exatamente as equações

(5.42)-(5.44). Portanto, os termos quárticos, que contem a informação da simetria da rede, são irrelevantes, e fluem para o ponto crítico gaussiano.

Como conclusão, as propriedades de longas distâncias do modelo gaussiano contínuo e na rede são exatamente as mesmas. Se começarmos o fluxo com um hamiltoniano inicial definido na rede, ele flui ao hamiltoniano contínuo. Isto significa que, mesmo que no modelo original a simetria de rotação esteja quebrada, no ponto crítico essa simetria é restaurada. É o que chamamos de uma simetria *emergente* na criticalidade. Lembremos que no capítulo I, observamos este mesmo fenômeno similar na transição de fase líquido-gás. Embora ela não tenha a simetria de Ising, essa simetria emerge no ponto crítico líquido-gás, estabelecendo que a transição de fase ferromagnética uniaxial e a transição líquido-gás se encontram na mesma classe de universalidade.

## 5.4 O ponto fixo gaussiano: análise perturbativa

Nesta seção analisamos a estabilidade do ponto fixo gaussiano. Para isto vamos trabalhar com um hamiltoniano que possa ser escrito como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V \quad (5.51)$$

onde o termo quadrático é

$$\mathcal{H}_0 = \int d^d x \left[ \frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{2} r \phi^2 \right] \quad (5.52)$$

e  $V$  é uma perturbação. A interação local mais simples que preserva a simetria de Ising  $\phi \rightarrow -\phi$  é o potencial quártico,

$$V = \frac{u}{4!} \int d^d x \phi^4(x) \quad (5.53)$$

O objetivo é aplicar a técnica do GR em espaço de momentos e tentar entender o diagrama de fluxos perto do ponto fixo gaussiano em função de  $r$  e  $u$ . Para isto, como é usual, definimos o hamiltoniano com um *cut-off* ultravioleta  $\Lambda$ . A seguir diminuímos o *cut-off* com um fator  $b > 1$ ,  $\Lambda \rightarrow \Lambda' = \Lambda/b$ . Introduzimos então os campos  $\phi^>$  e  $\phi^<$  que, no espaço de Fourier, têm suporte na casca esférica  $\Lambda/b < q < \Lambda$  e na esfera  $q < \Lambda/b$  respectivamente.

Já comprovamos anteriormente que o termo quadrático do hamiltoniano se comporta de forma muito simples em relação a essa separação de domínios no espaço de momentos. De fato,

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0^>[\phi^>] + \mathcal{H}_0^<[\phi^<] \quad (5.54)$$

Por outro lado, a interação quártica não tem essa propriedade e, em geral, a perturbação depende das duas componentes,  $V[\phi] = V[\phi^<, \phi^>]$ . Podemos escrever o hamiltoniano total da forma,

$$\mathcal{H}_\Lambda = \mathcal{H}_0^>[\phi^>] + \mathcal{H}_0^<[\phi^<] + V[\phi^>, \phi^<] \quad (5.55)$$

onde o sub-índice  $\Lambda$  indica que o hamiltoniano depende do *cut-off* ultravioleta  $\Lambda$ .

Definimos agora uma transformação do grupo de renormalização integrando funcionalmente o campo  $\phi^>$  da seguinte forma,

$$e^{-\mathcal{H}'_{\Lambda/b}} = \int \mathcal{D}\phi^> e^{-(\mathcal{H}_0^> + \mathcal{H}_0^< + V[\phi^>, \phi^<])} \quad (5.56)$$

Multiplicando e dividindo pela constante

$$\mathcal{N} = \int \mathcal{D}\phi^> e^{-\mathcal{H}_0^>[\phi^>]} \quad (5.57)$$

obtemos a expressão simples

$$e^{-\mathcal{H}'_{\Lambda/b}} = \mathcal{N} e^{-\mathcal{H}_0^<} \langle e^{-V} \rangle_{\mathcal{H}_0^>} \quad (5.58)$$

Nessa expressão,  $\langle \dots \rangle_{\mathcal{H}_0^>}$  indica a média estatística calculada com a distribuição gaussiana dada pelo hamiltoniano  $\mathcal{H}_0^>$ . Explicitamente,

$$\langle e^{-V} \rangle_{\mathcal{H}_0^>} = \frac{\int \mathcal{D}\phi^> e^{-\mathcal{H}_0^>[\phi^>]} e^{-V[\phi^>, \phi^<]}}{\int \mathcal{D}\phi^> e^{-\mathcal{H}_0^>[\phi^>]}} \quad (5.59)$$

Note que essa média estatística é uma função de  $\phi^<$ , como deve ser.

A equação (5.58) define a transformação do grupo de renormalização, quando o *cut-off* é diminuído num fator  $b > 1$ . Observamos que, se  $u = 0$ , isto é,  $V = 0$ , a equação coincide com a usada no modelo gaussiano, equação (5.17).

Para conhecer o hamiltoniano efetivo depois da TGR devemos calcular a média da equação (5.59). Dado que  $V$  é uma função quártica, a integral funcional não pode ser feita de forma exata. Por esse motivo devemos implementar algum método aproximado para seu cálculo. O método mais simples é o chamado teoria de perturbações. Para isto expandimos o exponencial em serie de Taylor,  $exp(-V) = 1 - V + (1/2)V^2 + \dots$ , retendo apenas o termo linear como uma primeira aproximação. A posteriori, será necessário investigar se essa aproximação é adequada para nosso propósito ou se será necessário melhorá-la. A média estatística será dada então por,

$$\langle e^{-V} \rangle \sim 1 - \langle V \rangle \quad (5.60)$$

Com o mesmo grau de aproximação, podemos re-exponenciar o resultado, obtendo

$$\langle e^{-V} \rangle \sim e^{-\langle V \rangle} \quad (5.61)$$

lembrando sempre que essa relação é válida apenas a ordem linear em  $V$ . Substituindo a aproximação linear na equação (5.58) obtemos

$$e^{-\mathcal{H}'_{\Lambda/b}} = \mathcal{N} e^{-\mathcal{H}_0^<} e^{-\langle V \rangle}_{\mathcal{H}_0^>} \quad (5.62)$$

Logo, a menos de uma constante, obtemos para o hamiltoniano efetivo

$$\mathcal{H}'_{\Lambda/b} = \mathcal{H}_0^< + \langle V \rangle_{\mathcal{H}_0^>} \quad (5.63)$$

O problema ficou reduzido ao cálculo da média estatística do potencial  $V$ . Como esse potencial é polinomial nos campos, e a distribuição de probabilidade é gaussiana, essa média sempre pode ser calculada. Para proceder, é importante notar alguns aspetos associados à simetria do problema. No nosso caso, o potencial é quártico, logo suas componentes são

$$\phi^4(x) = (\phi^> + \phi^<)^4 = \phi^{>4} + 4\phi^{>3}\phi^< + 6\phi^{>2}\phi^{<2} + 4\phi^>\phi^{<3} + \phi^{<4}. \quad (5.64)$$

Temos que calcular a média estatística sobre os campos  $\phi^>$  com peso gaussiano. Como a distribuição é par, todos os termos ímpares em  $\phi^>$  tem média zero. Desta forma, é suficiente focar apenas nas potências pares de  $\phi^>$ ,

$$\phi^4(x) = \phi^{>4} + 6\phi^{>2}\phi^{<2} + \phi^{<4} + \text{potências ímpares de } \phi^>. \quad (5.65)$$

A média do potencial pode ser escrita como

$$\langle V \rangle_{\mathcal{H}_0^>} = \frac{u}{4!} \int d^d x \left\{ \phi^{<4}(\mathbf{x}) + 6\phi^{<2}(\mathbf{x}) \langle \phi^{>2}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}_0^>} + \langle \phi^{>4}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathcal{H}_0^>} \right\} \quad (5.66)$$

O último termo é uma constante, no sentido que não depende de  $\phi^<$ , portanto pode ser ignorado. Os outros dois termos podem ser re-escritos como,

$$\langle V \rangle_{\mathcal{H}_0^>} = \frac{6uG^>(0)}{4!} \int d^d x \phi^{<2}(\mathbf{x}) + \frac{u}{4!} \int d^d x \phi^{<4}(\mathbf{x}) \quad (5.67)$$

onde temos definido a constante  $G^>(0)$ , sabendo que

$$G^>(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \langle \phi^>(\mathbf{x}) \phi^>(\mathbf{x}') \rangle_{\mathcal{H}_0^>} \quad (5.68)$$

é a função de correlação de dois pontos do campo  $\phi^>(\mathbf{x})$ , calculada com o hamiltoniano quadrático  $\mathcal{H}_0^>$ . Uma observação interessante é que a expressão (5.67) contem um termo quadrático e um quártico. Ou seja, o cálculo da media gerou termos que já existiam no hamiltoniano original. Portanto, a dimensão do espaço de parâmetros se mantem constante, já que nenhum termo novo foi gerado. Substituindo a equação (5.67) na equação (5.63), podemos escrever o hamiltoniano efetivo como

$$\mathcal{H}'_{\Lambda/b} = \int d^d x \left[ \frac{1}{2} |\nabla \phi(\mathbf{x})|^2 + \frac{1}{2} \left( r + \frac{u}{2} G^>(0) \right) \phi^{<2}(\mathbf{x}) + \frac{u}{4!} \phi^{<4}(\mathbf{x}) \right], \quad (5.69)$$

que tem a mesma forma que o hamiltoniano original, equação (5.51). O efeito da transformação do grupo de renormalização (na aproximação linear) foi renormalizar o termo quadrático, e reduzir o *cut-off* em  $\Lambda/b$ . Para poder comparar  $\mathcal{H}'^<$  com  $\mathcal{H}$ , temos que reescalar os momentos e os campos para que os dois hamiltonianos fiquem definidos

no mesmo domínio de integração. Para fazer isto, é mais conveniente escrever a equação (5.69) em espaço de momentos. Realizando a transformada de Fourier obtemos,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'^< &= \int_{q < \Lambda/b} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{2} \left[ r + \frac{u}{2} G^>(0) + q^2 \right] |\phi^<(\mathbf{q})|^2 \\ &+ \frac{u}{4!} \prod_{i=1}^4 \int_{q_i < \Lambda/b} \left[ \frac{d^d q_i}{(2\pi)^d} \phi^<(\mathbf{q}_i) \right] \delta^d(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4) \end{aligned} \quad (5.70)$$

Usamos agora o mesmo escalamento que usamos no modelo gaussiano,

$$\mathbf{q}' = b\mathbf{q} \quad (5.71)$$

$$\phi^<(\mathbf{q}'/b) = b^{\frac{d+2}{2}} \phi'(\mathbf{q}') \quad (5.72)$$

Com essa transformação  $d^d q = b^{-d} d^d q'$  e  $\delta^d(\mathbf{q}'/b) = b^d \delta^d(\mathbf{q}')$  Fazendo explicitamente a mudança de variáveis,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \int_{q' < \Lambda} \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} \frac{b^{-d}}{2} \left[ r + \frac{u}{2} G^>(0) + b^{-2} q'^2 \right] b^{d+2} |\phi'(\mathbf{q}')|^2 \\ &+ \frac{u}{4!} \prod_{i=1}^4 \int_{q'_i < \Lambda} \left[ \frac{d^d q'_i}{(2\pi)^d} \phi(\mathbf{q}'_i) \right] b^{-4d} b^{2(d+2)} b^d \delta^d(\mathbf{q}'_1 + \mathbf{q}'_2 + \mathbf{q}'_3 + \mathbf{q}'_4) \end{aligned} \quad (5.73)$$

Podemos escrever o hamiltoniano de forma que fique evidente sua estrutura que é idêntica ao hamiltoniano original

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \int_{q < \Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{2} \left[ r' + q^2 \right] |\phi(\mathbf{q})|^2 \\ &+ \frac{u'}{4!} \prod_{i=1}^4 \int_{q_i < \Lambda} \left[ \frac{d^d q_i}{(2\pi)^d} \phi(\mathbf{q}_i) \right] \delta^d(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4) \end{aligned} \quad (5.74)$$

onde já simplificamos a notação  $\phi'(\mathbf{q}') \rightarrow \phi(\mathbf{q})$  e temos definido as constantes de acoplamento renormalizadas,

$$r' = b^2 \left( r + \frac{u}{2} G^>(0) \right) \quad (5.75)$$

$$u' = b^{4-d} u \quad (5.76)$$

Notamos que, para completar o cálculo das equações do GR, precisamos calcular a constante  $G^>(0)$ , já que ela depende do fator de dilatação  $b$ . Usando a definição, equação (5.68), obtemos a forma da função de correlação na origem,

$$G^>(0) = \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + r}. \quad (5.77)$$

Essa integral é bem definida, isto é, as divergências ultravioletas são controladas pelo *cut-off*  $\Lambda$ . Por sua vez, as possíveis divergências infravermelhas são controladas pelo

*cut-off*  $\Lambda/b$ . A principio, essa integral pode ser resolvida exatamente. Porém, estamos interessados apenas na dependência com  $b$ , num regime perto do ponto fixo  $r = 0$ . Nesse regime,  $r \ll (\Lambda/b)^2$ . Como o limite inferior da integral é  $\Lambda/b$ , podemos expandir

$$\frac{1}{q^2 + r} = \frac{1}{q^2} \left( 1 - \frac{r}{q^2} + \dots \right) \quad (5.78)$$

O segundo termo, vai produzir nas equações de fluxo um termo da ordem  $ur$ , o qual estamos desprezando perto do ponto fixo  $r = 0, u = 0$ . Portanto, a expressão aproximada de  $G^>(0)$  é

$$G^>(0) \sim \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} dq \frac{q^{d-1}}{q^2} = 2B(1 - b^{2-d}) \quad (5.79)$$

onde temos definido a constante

$$B = \frac{1}{2} \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \frac{\Lambda^{d-2}}{(d-2)} \quad (5.80)$$

sendo  $\Omega_d$  a área da hyper-esfera  $d$ -dimensional de raio um. Substituindo a equação (5.79) nas equações de fluxo (5.75) e (5.76) chegamos as expressões,

$$r' = b^2[r + uB(1 - b^{2-d})] \quad (5.81)$$

$$u' = b^{4-d}u \quad (5.82)$$

Na aproximação particular que estamos trabalhando, as equações (5.81) e (5.82) são lineares. Podemos rescrevê-las em forma matricial,

$$\begin{pmatrix} r' \\ u' \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} r \\ u \end{pmatrix} \quad (5.83)$$

onde a matriz  $T$  tem a forma,

$$T = \begin{pmatrix} \frac{\partial r'}{\partial r} & \frac{\partial r'}{\partial u} \\ \frac{\partial u'}{\partial r} & \frac{\partial u'}{\partial u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b^2 & B(b^2 - b^{4-d}) \\ 0 & b^{4-d} \end{pmatrix}. \quad (5.84)$$

Os autovalores e autovetores são calculados facilmente.

$$\lambda_1 = b^2 \quad \Rightarrow \quad e^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.85)$$

$$\lambda_2 = b^{4-d} \quad \Rightarrow \quad e^{(2)} = \begin{pmatrix} -B \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.86)$$

Suponha que escolhemos um ponto inicial no plano  $u - r$ , por exemplo

$$\vec{\mu}_0 = r_0 \hat{i} + u_0 \hat{j} \quad (5.87)$$

onde  $\hat{i}$  e  $\hat{j}$  são a base de vetores unitários cartesianos usuais. O mesmo vetor pode ser escrito na base de autovetores de  $T$ ,  $\{e^{(1)}, e^{(2)}\}$ , sendo que  $e^{(1)} = \hat{i}$  e  $e^{(2)} = -B\hat{i} + \hat{j}$ . Encontramos que

$$\vec{\mu}_0 = (r_0 + Bu_0)e^{(1)} + u_0e^{(2)} \quad (5.88)$$

Portanto as variáveis de escala são

$$\begin{aligned} u_1 &= r_0 + Bu_0 & \text{com autovalor } \lambda_1 &= b^2 \\ u_2 &= u_0 & \text{com autovalor } \lambda_2 &= b^{4-d} \end{aligned} \quad (5.89)$$

Vemos que para  $d > 4$ , temos uma variável de escala relevante ( $u_1$ ) e uma irrelevante ( $u_2$ ). Nesse caso a superfície (linha) crítica é definida como  $u_1 = -0$ , ou  $r = -u/B$ . Mostramos este comportamento na figura 5.3.

Outra forma de representar as equações de fluxo do GR é considerando transformações infinitesimais  $b = 1 + d\ell$ . Nesse caso, a matriz de transformação linearizada tem a forma,

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & B(d-2) \\ 0 & 4-d \end{pmatrix} d\ell \quad (5.90)$$

A matriz do segundo termo é precisamente  $-\partial\beta_a/\partial K_b$ , onde

$$\beta_1 = -2r + B(2-d)u \quad (5.91)$$

$$\beta_2 = (d-4)u \quad (5.92)$$

é a função beta. Os autovalores dessa matriz são  $y_1 = 2$  e  $y_2 = 4-d$ . Sendo que as equações diferenciais do fluxo são

$$\frac{dr}{d\ell} = 2r + B(d-2)u \quad (5.93)$$

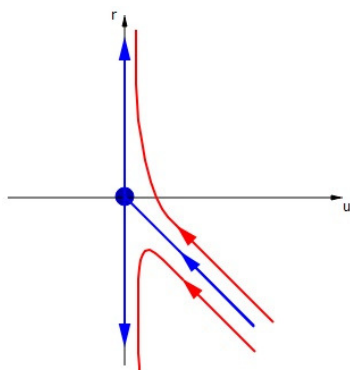
$$\frac{du}{d\ell} = (4-d)u \quad (5.94)$$

É simples verificar que essas equações são compatíveis com as equações de escala

$$\frac{du_1}{d\ell} = 2u_1 \quad (5.95)$$

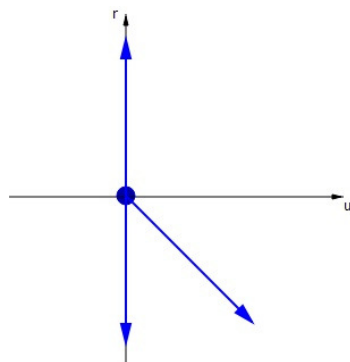
$$\frac{du_2}{d\ell} = (4-d)u_2 \quad (5.96)$$

Um forma gráfica de representar esta informação é através de um diagrama de fluxos. Para isto temos que considerar dois casos. Se  $d > 4$ , o autovalor  $y_1 > 0$  enquanto que  $y_2 < 0$ . Isto implica que temos uma variável de escala relevante ( $u_1$ ) e a outra irrelevante ( $u_2$ ). Representamos isto na figura 5.3 Nessa figura, as variáveis de escala são representadas em azul. O ponto fixo gaussiano fica na origem e as setas indicam o fluxo do GR. Observamos que a variável irrelevante define a “superfície” crítica cujas propriedades de longa distância são dominadas pelo ponto fixo gaussiano. Um ponto fora dessa linha vai evoluir seja para a fase desordenada  $r \rightarrow \infty$  ou para

Figura 5.3:  $d > 4$ 

a fase ordenada a  $T = 0$ . Desta forma, o ponto fixo gaussiano domina a transição de fase.

A situação é diferente se considerarmos  $d < 4$ . Nesse caso, a variável  $u_2$  passa a ser relevante, pois  $y_2$  torna-se positivo. O diagrama de fluxo tem a forma dada na figura 5.4. Observamos que o ponto fixo gaussiano é puramente repulsivo neste caso.

Figura 5.4:  $d < 4$ 

Isto significa que não existe nenhum hamiltoniano na sua vizinhança que tenha as mesmas propriedades de longas distâncias que o ponto fixo gaussiano. Portanto, a transição de fase deve estar descrita por outro ponto fixo. No presente cálculo não temos acesso a esse hipotético ponto fixo já que fizemos uma análise perturbativa a primeira ordem. Ou seja, nossos resultados apenas tem validade para uma pequena vizinhança do ponto fixo gaussiano. Para explorar o diagrama de fluxo com maior detalhe temos que melhorar a aproximação utilizada.

Vemos também que a análise realizada nos fornece a informação correta sobre dimensão crítica superior que, no presente exemplo é  $d_c = 4$ . Para dimensões  $d > d_c$ , o ponto fixo gaussiano descreve bem a transição levando aos mesmos expoentes críticos que a teoria de Landau. Porém, para  $d < d_c$ , o ponto fixo gaussiano já não domina

a física da transição de fase, tendo que melhorar a aproximação para tentar entender dimensões inferiores. Isto coincide com o critério de Ginzburg estudado no capítulo anterior.

## 5.5 Dimensão crítica superior e efeitos de não localidade

Antes de discutirmos a expansão  $\epsilon$ , vamos estudar um potencial de interação de ordem " $p$ " e seus efeitos sobre a teoria.

$$V_p = u_p \int d^d x \varphi^p(x) = u_p \int_{|q| < \Lambda} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \frac{d^d q_{p-1}}{(2\pi)^d} \varphi(q_1) \varphi(q_2) \cdots \varphi(-q_1 - q_2 \cdots - q_{p-1}) \quad (5.97)$$

Usaremos novamente o procedimento padrão

$$\begin{aligned} \varphi(q) &\Rightarrow \varphi^<(q) \\ q' &= bq \\ \varphi^<(q) &= b^{\frac{d+2}{2}} \varphi'(q') \end{aligned} \quad (5.98)$$

Com os campos e os momentos redefinidos, o potencial fica

$$V_p = u_p \int_{|q| < \Lambda/b} \frac{d^d q'_1}{(2\pi)^d} \cdots \frac{d^d q'_{p-1}}{(2\pi)^d} \varphi(q_1) \varphi(q_2) \cdots \varphi(-q_1 - q_2 \cdots - q_{p-1}) b^{-d(p-1)} b^{p(\frac{d+2}{2})} \quad (5.99)$$

O próximo passo é reescalonar as constantes:

$$\begin{aligned} u'_p &= b^{\lambda_p} u_p \\ \lambda_p &= p \frac{(d+2)}{2} - d(p-1) = \frac{2p - d(p-2)}{2} \end{aligned} \quad (5.100)$$

Nota-se que, se  $p = 1$ ,  $\lambda_p > 0$  e, caso  $p$  seja igual a 2,  $\lambda_p$  também será 2. Algo interessante ocorre para valores de  $p$  maiores que 2: nessas situações,  $\lambda_p$  poderá ser positivo ou negativo de acordo com a dimensão do problema.

$$d_c = \frac{2p}{p-2} \Rightarrow \begin{cases} \text{se } d > d_c, \text{ então } \lambda_p < 0 \text{ e } u_p \text{ é irrelevante} \\ \text{se } d < d_c, \text{ então } \lambda_p > 0 \text{ e } u_p \text{ é relevante} \end{cases},$$

onde  $d_c$  é a *dimensão crítica superior*. A tabela a seguir destaca alguns resultados conhecidos.

Em nosso estudo, tratamos somente de interações locais. Vamos estudar, no caso em que  $p = 4$ , o que aconteceria se levássemos em conta interações não locais.

$$\begin{aligned} V_4 &= \int dx_1 \cdots dx_4 u(x_1 \cdots x_4) \varphi_1 \cdots \varphi_4 \\ &= \int \frac{dq_1}{(2\pi)^d} \cdots \frac{dq_4}{(2\pi)^d} u(q_1 \cdots q_4) \tilde{\varphi}_1 \cdots \tilde{\varphi}_4 \end{aligned} \quad (5.101)$$

p	$d_c$
4	4
3	6
6	3

em que

$$\begin{aligned}
\tilde{u}(q_1, q_2, q_3, q_4) &= \int dx_1 \dots dx_4 u(x_1, x_2, x_3, x_4) e^{-i(q_1 x_1 + \dots + q_4 x_4)} \\
&= u(q_1, q_2, q_3, q_4) \delta^d(q_1 + q_2 + q_3 + q_4) \\
&\approx u(0) + u_2 q^2.
\end{aligned} \tag{5.102}$$

No último resultado, chamamos de  $q^2$  combinações dos  $q_i$ s que incluem somente termos quadráticos nos momentos, isto é,  $q_1^2, q_2 q_3, \dots$ . O termo  $u_2$  é o termo que incluirá as interações não locais. Fazendo a transformação de escala novamente, vemos que

$$\begin{aligned}
u' &= b^{4-d} u \\
u'_2 &= b^{2-d} u_2.
\end{aligned} \tag{5.103}$$

Logo, nota-se que  $u_2$  torna-se irrelevante com mais facilidade que  $u$  e, por esse motivo, é coerente considerarmos apenas interações locais.

## 5.6 Expansão $\epsilon$ -O modelo $O(n)$

Vamos, agora, estudar a expansão perturbatória no modelo em que existem  $n$  campos escalares. O hamiltoniano do modelo escalar  $\mathcal{O}(n)$  é:

$$\mathcal{H} = \int \left\{ \sum_{i=1}^n \left[ r \varphi_i^2 + \frac{1}{2} (\nabla \varphi_i)^2 \right] + u (\sum_i \varphi_i^2)^2 \right\} d^d x \tag{5.104}$$

Novamente, separaremos o hamiltoniano em dois, seguindo o procedimento habitual. Cabe ressaltar que, dessa vez, teremos o hamiltoniano não-perturbado  $H_0$  e o potencial  $V$  de interação.

$$\begin{aligned}
e^{H'_{\Lambda/b}} &= e^{-H'_{\Lambda/b}} \int [\mathcal{D}\varphi] e^{-H_0^>(\varphi^>)} e^{-V(\varphi^>, \varphi^<)} \\
&= e^{-H'_{\Lambda/b}} \left\langle e^{-V(\varphi^>, \varphi^<)} \right\rangle_{H_0^>}
\end{aligned} \tag{5.105}$$

O próximo passo é expandir o potencial considerando que as perturbações causadas pelo potencial são pequenas. Caso considerássemos somente a primeira ordem, teríamos

$$\langle e^{-V} \rangle = r^{-\langle V \rangle}. \tag{5.106}$$

Levando a expansão até a segunda ordem, a expressão torna-se mais complicada, como pode ser observado a seguir.

$$\begin{aligned}\langle e^{-V} \rangle &\approx 1 - \langle V \rangle + \frac{1}{2} \langle V^2 \rangle + \frac{1}{3} \langle V^3 \rangle \\ &\approx e^{-\langle V \rangle + \frac{1}{2}[\langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2] + \dots}\end{aligned}\quad (5.107)$$

Logo

$$H'_{\Lambda/b} = H_{\Lambda/b}^{\leq} + \langle V \rangle - \frac{1}{2} [\langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2] \quad (5.108)$$

Seguindo os mesmo procedimentos que usamos no modelo  $\mathcal{O}(1)$ , obtemos

$$\begin{aligned}r' &= b^{-d} b^{d+2} \left[ r + 4(n+2)u \int_q G^{\>}(q) \right] + \mathcal{O}(u^2) \\ u' &= b^{4-d} \left[ u - 4(n+8)u^2 \int_q G^{\>2}(q) \right] + \mathcal{O}(u^3),\end{aligned}\quad (5.109)$$

onde

$$G^{\>}(q) = \frac{1}{q^2 + r} \quad (5.110)$$

Faremos agora a transformação infinitesimal do Grupo de Renormalização, que é dada por

$$b \rightarrow 1 + \delta l \quad (5.111)$$

Fazendo as integrais das funções de Green, chegamos a

$$\begin{aligned}\frac{dr(l)}{dl} &= 2r(l) + 4\Omega_d(n+2) \frac{u(l)}{1+r(l)} \\ \frac{du(l)}{dl} &= \underbrace{\epsilon}_{4-d} u(l) - 4\Omega_d(n+8) \frac{u^2(l)}{(1+r(l))^2}\end{aligned}\quad (5.112)$$

Para encontrar os pontos fixos, temos que resolver o seguinte sistema de equações:

$$\frac{dr}{dl} = \frac{du}{dl} = 0 \left\{ \begin{array}{l} 2r + 4\Omega_d(n+2) \frac{u}{1+r} = 0 \\ \epsilon u - 4\Omega_d(n+8) \frac{u^2}{(1+r)^2} = 0 \end{array} \right.$$

Portanto, teremos dois pontos fixos:

### 1. Gaussiano

$$\begin{aligned}u &= 0 \\ r &= 0\end{aligned}\quad (5.113)$$

2. Ponto fixo de Heisenberg

$$\begin{aligned} u^* &= \frac{\epsilon}{4(n+8)\Omega_d} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ r^* &= -\frac{1}{2} \left( \frac{n+2}{n+8} \right) \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5.114)$$

Linearizando em torno deste ponto fixo, temos

$$\begin{pmatrix} \frac{d\delta r}{dl} \\ \frac{d\delta u}{dr} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \frac{n+2}{n+8}\epsilon & \frac{4(n+2)\Omega_d}{1+r} \\ 0 & -\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta r \\ \delta u \end{pmatrix}$$

onde

$$\begin{aligned} \delta r &= r - r^* \\ \delta u &= u - u^* \end{aligned} \quad (5.115)$$

Diagonalizando a matriz, chegamos aos seguintes auto-valores

$$\begin{aligned} \lambda_t &= \frac{1}{\nu} = 2 - \frac{n+2}{n+8}\epsilon \\ \lambda_u &= -\epsilon \end{aligned} \quad (5.116)$$

Com esse novo ponto, o diagrama de fluxo torna-se mais complexo

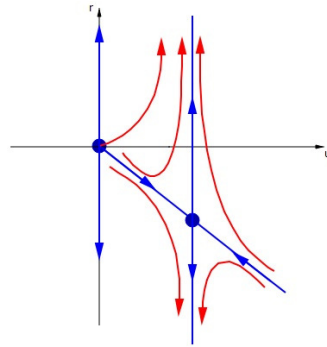


Figura 5.5: Diagrama de fluxo.

## 5.7 Hamiltoniano de Heisenberg com anisotropia cúbica

O modelo  $\mathcal{O}(n)$ , que estudamos até então, possui dois pontos fixos (se nos limitarmos a termos de ordem  $\epsilon^3$ ) e vale para  $2 < d < 4$ . Isso deixa de ser verdade se a simetria

rotacional contínua for quebrada, como acontece com o seguinte hamiltoniano.

$$\mathcal{H} = \int d^d x \left\{ \sum_i \frac{1}{2} r \varphi_i^2 + \frac{1}{2} (\nabla \varphi_i)^2 + u \left( \sum_i \varphi_i^2 \right)^2 + v \sum_i \varphi_i^4 \right\} \quad (5.117)$$

O hamiltoniano acima possui uma anisotropia cúbica. Para demonstrar que essa afirmativa está correta, vamos considerar o caso em que  $d = 2$ .

$$\varphi_1 = \varphi \cos \theta ; \varphi_2 = \varphi \sin \theta. \Rightarrow \begin{cases} u(\varphi_1^2 + \varphi_2^2)^2 = u\varphi^4 \\ v(\varphi_1^4 + \varphi_2^4) = v\varphi^4(\cos^2 \theta + \sin^4 \theta) \end{cases}$$

Nota-se que a simetria não é mais preservada para rotações arbitrárias. As únicas rotações que preservam-na são as que rotacionam o sistema em  $\pi/2$ .

Agora existem três constantes de acoplamento,  $\{r, u, v\}$ , uma a mais do que tínhamos anteriormente. Seguindo os procedimentos de análise de constantes concluí-se que, para  $d > 4$ ,  $r$  é relevante e  $u$  e  $v$  são irrelevantes. A seguir, temos um esboço do diagrama de fluxo. O ponto fixo representado na figura anterior é o ponto fixo

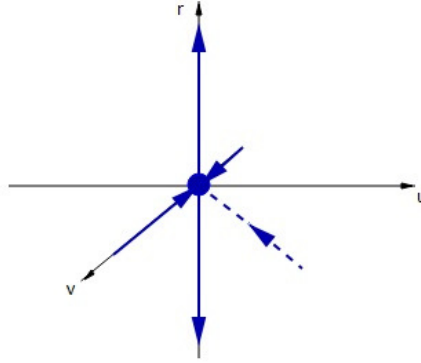


Figura 5.6: Diagrama de fluxo

Gaussiano.

Para  $d < 4$ , os pontos  $u$  e  $v$  são relevantes. Deve-se fazer uma análise mais minuciosa desse caso, embora o procedimento a ser executado seja o mesmo. Os resultados obtidos são:

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dl} &= (2 - \eta)r + 4\Omega_d[(n + 2)u + 3v] \frac{1}{1 + r} \\ \frac{du}{dl} &= (\epsilon - 2\eta)u - 4\Omega_d[(n + 8)u^2 + 6uv] \frac{1}{(1 + r)^2} \\ \frac{dv}{dl} &= (\epsilon - 2\eta)v - 4\Omega_d[12u + 9v^2] \frac{1}{(1 + r)^2}, \end{aligned} \quad (5.118)$$

onde  $\eta = \mathcal{O}(u^2, uv, v^2)$ . Lembrando que, próximo a temperatura crítica,  $r \approx 0$ , e que estamos procurando pontos fixos de ordem  $\epsilon$ , temos que as equações que fornecem os pontos fixos são:

$$\frac{dr}{dl} = \frac{du}{dl} = \frac{dv}{dl} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \{\epsilon - 4\Omega_d[(n+8)u^* + 6v^*]\} = 0 \\ v\{\epsilon - 4\Omega_d[12u + 9v]\} = 0 \end{cases}$$

O sistema anterior tem quatro soluções, e cada uma corresponde a um ponto fixo distinto.

- Ponto Fixo Gaussiano

$$u = v = 0 \quad (5.119)$$

- Ponto Fixo de Heisenberg

$$\begin{aligned} v_H &= 0 \\ u_H &= \frac{\epsilon}{4\Omega_d(n+8)} \end{aligned} \quad (5.120)$$

- Ponto Fixo de Ising Esse ponto fixo recebeu esse nome porque, nesse ponto, o hamiltoniano se reduz a "n" modelos de Ising independentes.

$$\begin{aligned} u_I &= 0 \\ v_I &= \frac{\epsilon}{36\Omega_d} \end{aligned} \quad (5.121)$$

- Ponto Fixo Cúbico

$$\begin{aligned} u_C &= \frac{\epsilon}{12\Omega_d n} \\ v_C &= \frac{n-4}{3} \frac{\epsilon}{12\Omega_d n} \end{aligned} \quad (5.122)$$

Para estudar a estabilidade desses pontos, devemos linearizar as equações para cada um deles.

$$\begin{aligned} \frac{d\delta u}{dl} &= \{\epsilon - 4\Omega_d[2(n+8)u^* + 6v^*]\} \delta u - 24\Omega_d u^* \delta v \\ \frac{d\delta v}{dl} &= \{\epsilon - 4\Omega_d[12u^* + 18v^*]\} \delta v - 48\Omega_d v^* \delta u \end{aligned} \quad (5.123)$$

Isso nos leva aos seguintes resultados:

- Gaussiano:

$$\lambda_G^u = \lambda_G^v = \epsilon \quad (5.124)$$

- Heisenberg

$$\begin{aligned}\lambda_H^u &= -\epsilon \\ \lambda_H^v &= \frac{n-4}{n}8\epsilon\end{aligned}\quad (5.125)$$

- Ising

$$\begin{aligned}\lambda_I^u &= \frac{1}{3}\epsilon \\ \lambda_I^v &= -\epsilon\end{aligned}\quad (5.126)$$

- Cúbico

$$\begin{aligned}\lambda_C^1 &= -\epsilon \\ \lambda_C^2 &= \frac{4-n}{3n}\end{aligned}\quad (5.127)$$

Notamos que, além da dimensão crítica, o número de campos também possui uma criticalidade para  $n = n_c = 4$ . O caso em que  $d > d_c$  já foi estudado anteriormente, então resta-nos determinar qual o efeito que o número de campos tem sobre o sistema quando  $d < d_c$ . O diagrama para  $n < n_c$  fica

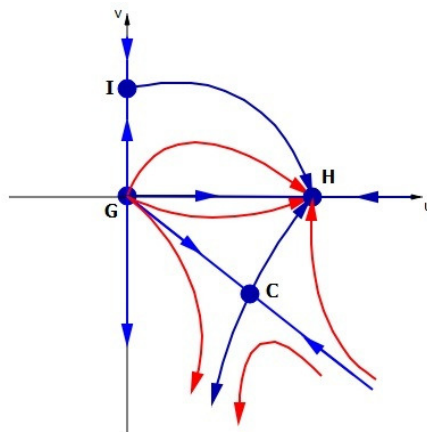
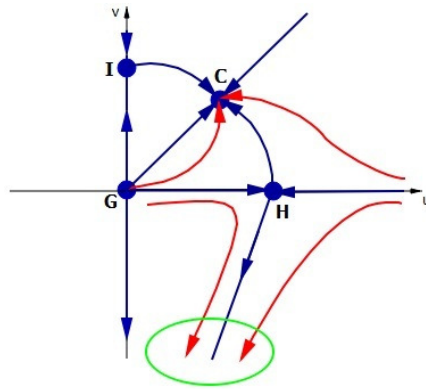


Figura 5.7: Diagrama de fluxo para  $n < n_c$

Já para  $n > n_c$ , o diagrama passa a ser

Figura 5.8: Diagrama de fluxo para  $n > n_c$ 

Observando a área destacada em verde, supõe-se que haja uma transição de primeira ordem. Isso finaliza os estudos do Grupo de Renormalização em sistemas em equilíbrio. Passaremos, agora, ao estudo de sistemas dinâmicos.