

1 Introdução

A Mecânica Estatística usa como premissas básicas o conhecimento de alguns detalhes microscópicos do sistema e o fato de que o número de constituintes (átomos, moléculas, etc.) de um pedaço macroscópico de material é muito grande (tipicamente 10^{23}). O objetivo final é a descrição de propriedades e fenômenos em escala termodinâmica, como equações de estado, susceptibilidades e transições de fase.

Nos cursos introdutórios, quase sem exceção, somente são estudados sistemas onde não há interações entre os constituintes do sistema (por exemplo, os gases ideais, em suas versões clássica e quânticas). Apesar do sucesso desses modelos na explicação de um grande número de fenômenos, a verdade é que eles se constituem em abstrações bastante fortes. A sua maior limitação está no fato de que, a menos da condensação de Bose-Einstein, eles não permitem a ocorrência de transições de fase a temperaturas finitas.

A introdução de interações entre as partículas que formam um sistema pode mudar radicalmente as propriedades termodinâmicas. Além de abrir a possibilidade para a aparecimento de transições de fase (algumas bastante exóticas), as interações, quando suficientemente fortes, podem reformular completamente as propriedades de uma determinada fase da matéria.

Este curso tem como objetivo o estudo de fenômenos onde é fundamental o caráter coletivo. Ou seja, situações em que os constituintes do sistema conspiram, através de interações, na formação de novas fases da matéria. Em particular, vamos analisar com cuidado os chamados fenômenos críticos, introduzindo conceitos como a quebra espontânea de simetria, universalidade, invariância de escala e ordem de longo alcance. Como ferramentas, vamos motivar e posteriormente utilizar teorias de campo fenomenológicas do tipo Ginzburg-Landau e métodos perturbativos como o grupo de renormalização .

O formato do curso e uma boa parte do material a ser apresentado tem forte influência da disciplina *8.334 - Statistical Mechanics II* dada pelos Profs. Mehran Kardar, Patrick Lee e Boris Altshuler entre 1990 e 1991 no Massachusetts Institute of Technology. Alguns capítulos são adaptações de notas de aula do próprio autor quando era estudante nessa disciplina. Há também uma grande influência de textos como *Statistical Mechanics*, de K. Huang, *Basic Notions in Condensed Matter Physics*, de P. W. Anderson, *Principles of Condensed Matter*, de P. Chaikin e C. Lubensky, *Introduction to Modern Statistical Mechanics*, de D. Chandler e *Statistical Field Theory*, de G. Parisi. Portanto, em nenhum momento o texto dos próximos capítulos tem a pretensão de ser original ou inédito. Muitas passagens são traduções literais das referências acima citadas. O objetivo desta empreitada foi simplesmente fornecer uma referência de estudo acessível ao carente estudante de língua portuguesa!

2 Equilíbrio, estabilidade e transições de fase: Termodinâmica

Neste capítulo nós nos preocuparemos em usar apenas conceitos e leis da Termodinâmica. O material aqui descrito é uma adaptação parcial do Cap. 2 do livro de D. Chandler e do Cap. 2 do livro do K. Huang.

2.1 Condição de equilíbrio entre fases

Seja um sistema aberto, contínuo mas heterogêneo, composto de várias fases (i.e., diferentes estados da uma certa matéria), como mostrado na Fig. 1. Cada fase ou subparte do sistema (subsistema) é homogênea e pode ser caracterizada por um pequeno conjunto de variáveis termodinâmicas. Nós podemos particionar uma certa variável extensiva entre as diversas fases de modo que, em cada fase, haja proporcionalidade entre essa variável e a quantidade de matéria. No caso da energia interna,

$$E = \sum_{\alpha=1}^{\nu} E^{(\alpha)}, \quad (1)$$

onde ν é o número total de fases.¹ Analogamente, para a entropia, volume total e número de partículas de uma dada espécie química, teremos, respectivamente,

$$S = \sum_{\alpha=1}^{\nu} S^{(\alpha)}, \quad V = \sum_{\alpha=1}^{\nu} V^{(\alpha)} \quad \text{e} \quad N_i = \sum_{\alpha=1}^{\nu} N_i^{(\alpha)}, \quad (2)$$

onde $i = 1, 2, \dots, r$ e $\sum_{i=1}^r N_i = N$. Lembre-se que S , V e N_i são as variáveis canônicas da qual a energia interna depende: $E = E(S, V, N_i)$.

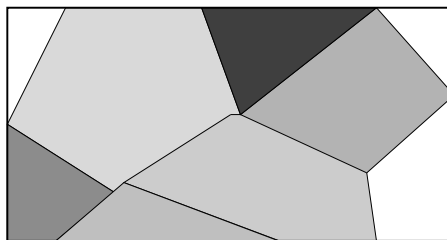


Figure 1: Sistema com várias fases coexistindo.

O sistema estará em equilíbrio quando para qualquer reparticionamento infinitesimal de S , V e N_i a energia total ou só aumenta, ou então permanece constante. Em outras palavras, para S , V e N_i fixos, mas $\{S^{(\alpha)}\}$, $\{V^{(\alpha)}\}$ e $\{N_i^{(\alpha)}\}$ variáveis,

$$(\delta E)|_{S,V,N_i} = \sum_{\alpha=1}^{\nu} \left[T^{(\alpha)} \delta S^{(\alpha)} - P^{(\alpha)} \delta V^{(\alpha)} + \sum_{i=1}^r \mu_i^{(\alpha)} \delta N_i^{(\alpha)} \right] \leq 0, \quad (3)$$

¹Essa divisão indica implicitamente que estamos desprezando contribuições à energia total relativas às superfícies (externa ou entre fases). Isso se justifica porque, no limite termodinâmico, quando o número N de partículas no sistema é muito grande (tipicamente 10^{23}), $E_{\text{volume}} \sim N$, ao passo que $E_{\text{superfície}} \sim N^{2/3}$. Portanto, $E_{\text{superfície}}/E_{\text{volume}} \sim N^{-1/3} \rightarrow 0$.

onde $T^{(\alpha)}$ é a temperatura, $P^{(\alpha)}$ a pressão e $\mu_i^{(\alpha)}$ o potencial químico da fase α (e da espécie i). Os vínculos a serem obedecidos são

$$\sum_{\alpha=1}^{\nu} \delta S^{(\alpha)} = 0, \quad \sum_{\alpha=1}^{\nu} \delta V^{(\alpha)} = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{\alpha=1}^{\nu} \delta \mu_i^{(\alpha)} = 0, \quad (4)$$

com $i = 1, 2, \dots, r$. Em geral, as variações $\delta S^{(\alpha)}$, $\delta V^{(\alpha)}$ e $\delta \mu_i^{(\alpha)}$ são livres, podendo ser positivas ou negativas, desde que respeitem os vínculos acima. Nesse caso, há somente uma solução possível para a desigualdade,

$$(\delta E)|_{S,V,N_i} = 0 \quad (5)$$

e

$$T^{(1)} = T^{(2)} = \dots = T^{(\nu)} \quad (6)$$

$$P^{(1)} = P^{(2)} = \dots = P^{(\nu)} \quad (7)$$

$$\mu_i^{(1)} = \mu_i^{(2)} = \dots = \mu_i^{(\nu)}, \quad (8)$$

com $i = 1, 2, \dots, r$. A condição (6) estabelece o equilíbrio térmico entre as fases; (7) significa equilíbrio mecânico, enquanto que (8) indica que as fases estão em equilíbrio de massa, i.e., não há crescimento relativo nas quantidades de uma dada espécie química.² A energia total é portanto estacionária (não varia em primeira ordem) no equilíbrio.

2.2 Condição de estabilidade de uma fase

A condição de equilíbrio, $(\delta E)|_{S,V,N_i} = 0$ para variações infinitesimais $\{\delta S^{(\alpha)}, \delta V^{(\alpha)}, \delta N_i^{(\alpha)}\}$, não determina a estabilidade do sistema. Ou seja, ela nada diz a respeito da capacidade do sistema de resistir a perturbações. Para tal, é preciso que a energia interna (ou o potencial termodinâmico relevante) seja um ponto de mínimo. Portanto, considerando variações além da primeira ordem, é preciso que

$$(\Delta E)|_{S,V,N_i} = (\delta^2 E)|_{S,V,N_i} + O(\delta^3 E) > 0. \quad (9)$$

Para pequenas perturbações, devemos impor que o termo de segunda ordem na expressão acima seja positivo; caso esse seja nulo (como o termo de primeira ordem), deve-se substituí-lo pelo de terceira ordem, e assim por diante.

Como esse critério de estabilidade se traduz em termos das variáveis termodinâmicas em jogo? Vamos, por exemplo, analisar o caso $\nu = 2$ e $\delta V^{(1)} = \delta V^{(2)} = 0 = \delta N_i^{(1)} = \delta N_i^{(2)}$. Temos que

$$\delta^2 E = \delta^2 E^{(1)} + \delta^2 E^{(2)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \right)_{V,N_i}^{(1)} [\delta S^{(1)}]^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2} \right)_{V,N_i}^{(2)} [\delta S^{(2)}]^2. \quad (10)$$

²Vale a pena relembrar o significado físico do potencial químico. Para isso, vamos supor que há somente duas fases no sistema e uma só espécie química. Seja $T^{(1)} = T^{(2)} = T$ e $P^{(1)} = P^{(2)} = P$, mas $\mu^{(1)} > \mu^{(2)}$ inicialmente. Se o sistema for isolado térmica e mecanicamente, ele evoluirá para o equilíbrio de modo que a sua entropia aumente ($\Delta S > 0$) durante o processo. Pela primeira lei da Termodinâmica, $T\Delta S = -\mu^{(1)}\Delta N^{(1)} - \mu^{(2)}\Delta N^{(2)}$, com $\Delta N^{(1)} = -\Delta N^{(2)}$. Uma vez que $\mu^{(1)} > \mu^{(2)}$, $\Delta N^{(1)} < 0$. Haverá então um fluxo de partículas para a região de menor potencial químico.

Como $\delta S = \delta S^{(1)} + \delta S^{(2)} = 0$, segue que

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2}\right)_{V, N_i}^{(1)} + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2}\right)_{V, N_i}^{(2)} \geq 0. \quad (11)$$

Lembrando que

$$\left(\frac{\partial^2 E}{\partial S^2}\right)_{V, N_i} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial S}\right)_{V, N_i} = \frac{T}{C_V}, \quad (12)$$

segue que, no equilíbrio ($T^{(1)} = T^{(2)} = T$),

$$\frac{1}{C_V^{(1)}} + \frac{1}{C_V^{(2)}} \geq 0. \quad (13)$$

Como a divisão em subsistemas é de certo modo arbitrária, essa condição simplesmente estabelece que a capacidade térmica a volume constante deve ser positiva. Esse resultado é bastante intuitivo. Se C_V pudesse ser negativa, o fluxo de calor entre duas fases se daria da mais fria para a mais quente, aumentando o desequilíbrio de temperaturas.

Não é difícil mostrar que algo similar ocorre quando analisamos flutuações mecânicas (volume) ou de massa (veja lista de exercícios). No caso mecânico, a condição de estabilidade se traduz numa compressibilidade positiva,

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T \geq 0. \quad (14)$$

Vamos então formalizar um critério genérico para a estabilidade. Chamando de Φ a energia interna de um sistema (ou um dos potenciais químicos a ela ligados por uma transformação de Legendre), e $\{X_i\}$, $i = 1, \dots, r$, e $\{Y_j\}$, $j = r + 1, \dots, n$, os seus conjuntos canônicos de variáveis extensivas e intensivas, respectivamente. Então, a estabilidade se traduz em

$$d\Phi = \sum_{i=1}^r Y_i dX_i - \sum_{j=r+1}^n X_j dY_j, \quad (15)$$

com

$$\left(\frac{\partial Y_i}{\partial X_i}\right)_{X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_r, Y_{r+1}, \dots, Y_n} \geq 0. \quad (16)$$

2.3 Regra de coexistência de fases

A condição de equilíbrio termodinâmico fixa também o número de fases que podem coexistir num dado sistema. Como exemplo, seja um sistema no qual T , P e μ_i são as variáveis intensivas relevantes. Fixando T e P , a condição de equilíbrio estabelece que

$$\mu_i^{(\alpha)}(T, P, n_1^{(\alpha)}, \dots, n_{r-1}^{(\alpha)}) = \mu_i^{(\beta)}(T, P, n_1^{(\beta)}, \dots, n_{r-1}^{(\beta)}), \quad (17)$$

com $i = 1, \dots, r$ e $1 \leq \alpha < \beta \leq \nu$. O coeficiente $n_i^{(\alpha)}$ é igual à proporção de partículas da espécie química i em relação ao total de partículas na fase α , de modo que $\sum_{i=1}^r n_i^{(\alpha)} = 1$. Temos então um conjunto de $r(\nu - 1)$ equações independentes e $2 + \nu(r - 1)$ variáveis intensivas.

Assim, o número de graus de liberdade (ou seja, o número de variáveis independentes) é igual a

$$f = 2 + r - \nu. \quad (18)$$

No caso de um sistema com somente uma substância ($r = 1$), $f = 3 - \nu$. Na presença de somente uma fase, há duas variáveis termodinâmicas independentes (T e P , por exemplo); já no caso da coexistência de duas fases, $f = 1$ e portanto somente uma quantidade intensiva pode ser variada independentemente. Finalmente, a coexistência de três fases só ocorre para um valor único e fixo de todas as variáveis intensivas. Isso pode ser visto no diagrama de fases na Fig. 2. Os pontos de coexistência de três fases são chamados de triplos. Existe também a possibilidade de uma linha de coexistência entre duas fases terminar num ponto, o qual é então chamado de ponto crítico. Contudo, é importante ressaltar que pontos críticos não são equivalentes aos triplos. Pontos críticos só podem ocorrer entre fases fluidas e que portanto não envolvem quebra de simetrias. Exemplificando, não há ponto crítico para linhas de coexistência fluido-sólido. Vamos voltar a esse assunto logo mais.

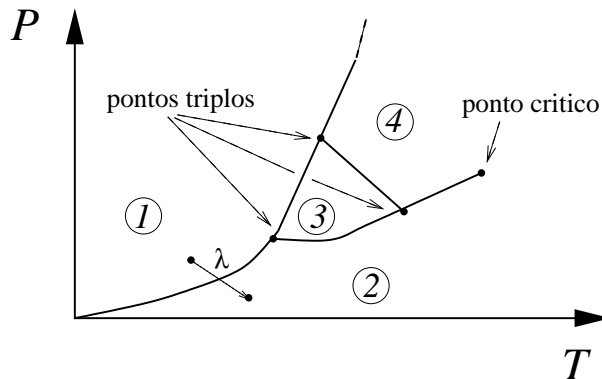


Figure 2: Diagrama de fase.

2.4 Transições de fases

Para entender um pouco melhor o que pode acontecer quando se atravessa uma linha de coexistência de fases, vamos recordar que, de acordo com a segunda lei da Termodinâmica, a energia livre de Gibbs $G = E - TS + PV = \mu N$ é sempre mínima quando o sistema é mantido a pressão e temperatura constantes:

$$\delta G = \delta E - \delta(TS) + \delta(PV) = \mu \delta N \leq 0. \quad (19)$$

Num diagrama PT , a linha que estabelece a coexistência de fases (1) e (2) indica que, nela, $\mu^{(1)}(P, T) = \mu^{(2)}(P, T)$. Suponha então que estejamos sobre essa linha. Para determinar qual fase é estável em um cada um dos lados, podemos determinar os potenciais químicos ao longo de um caminho parametrizado pela variável λ (veja Fig. 2), tanto à esquerda quanto à direita do ponto de cruzamento. O resultado é mostrado na Fig. 3. A fase estável é aquela cujo potencial químico (e portanto energia livre) é mínimo; a intersecção das curvas é chamado de ponto de transição. Assim, cada fase é representada por uma superfície (de Gibbs) no espaço $PT\mu$, sendo que as transições fase ocorrem nas linhas ou pontos de intersecção dessas superfícies (com exceção do ponto crítico).

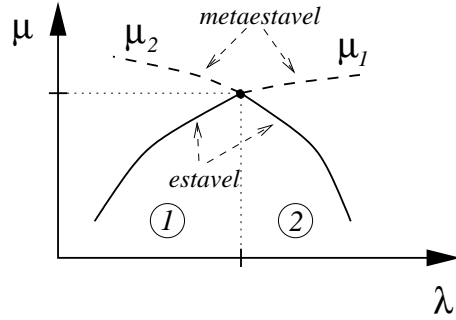


Figure 3: Variação do potencial químico através de uma linha de coexistência de fases.

Pela construção acima, fica claro que a energia livre não dá saltos ao cruzamos uma linha de coexistência. Porém, a sua derivada podem ser descontínua durante a transição. Quando isso acontece, a transição é denominada de primeira ordem. Note que essa discontinuidade implica numa mudança brusca no volume e entropia:

$$\Delta \left[\left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_T \right] = \Delta V \quad \text{e} \quad \Delta \left[\left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_P \right] = -\Delta S. \quad (20)$$

Nesses casos, há um calor latente, $L = T\Delta S$ associado à transição (como no caso corriqueiro da evaporação da água, por exemplo). A transição será de segunda ordem quando as primeiras derivadas de G forem contínuas (e portanto $\Delta V = \Delta S = 0$), mas a segunda derivada (curvatura) apresentar um salto. De um modo geral, a ordem da transição é determinada pela menor ordem onde ocorrem derivadas divergentes.

Neste curso nós vamos quase que exclusivamente nos concentrar em transições de fase de segunda ordem. Nós veremos que a elas está associado um conceito fundamental da física denominado quebra espontânea de simetria. Contudo, por uma questão de completeza, vamos discutir ainda alguns fatos importantes relacionados a transições de fase de primeira ordem (que, por sinal, não necessariamente excluem quebras espontâneas de simetria).

2.5 Equação de Clausius-Clapeyron

A partir do que foi discutido na seção anterior, podemos facilmente deduzir uma relação entre a pressão e a temperatura ao longo de uma linha de coexistência. Como $\mu^{(1)}(T, P) = \mu^{(2)}(T, P)$ e $d\mu = -sdT + vdP$ (onde $s = S/N$ e $v = V/N$ são a entropia e o volume específicos, respectivamente), segue que

$$-s^{(1)}dT + v^{(1)}dP = -s^{(2)}dT + v^{(2)}dP. \quad (21)$$

Portanto,

$$\left. \frac{dP}{dT} \right|_{12} = \frac{\Delta s(T)}{\Delta v(T)}, \quad (22)$$

onde $\Delta s = s^{(1)} - s^{(2)}$ e $\Delta v = v^{(1)} - v^{(2)}$. Note que essa equação define (a menos de uma constante) a função $P(T)$ da linha de coexistência. Equações análogas podem ser obtidas em situações onde as variáveis e potenciais termodinâmicos relevantes para a descrição da transição são outros.

2.6 Diagramas PV e construção de Maxwell

Ao invés de variáveis intensivas como P e T , é bastante comum o uso de variáveis conjugadas, como P e V , para a representação do diagrama de fase. Por exemplo, no caso de uma transição de primeira ordem em um fluido, ela pode ser representada pela curva isotérmica mostrada na Fig. 4. A fase menos densa (“gasosa”) coexiste com a fase mais densa (“líquida”) durante a discontinuidade da curva. Note que em todos os pontos, a compressibilidade κ_T é positiva, garantindo a estabilidade mecânica do sistema. É possível determinar os volumes específicos de cada fase em coexistência a partir da equação de Clausius-Clapeyron e da expressão do potencial químico (ou da energia livre):

$$P_{12}(T) = P^{(1)}(T, v^{(1)}) = P^{(2)}(T, v^{(2)}) \quad \text{e} \quad \mu(T) = \mu^{(1)}(T, v^{(1)}) = \mu^{(2)}(T, v^{(2)}). \quad (23)$$

Essas duas relações estabelecem conjuntamente uma espécie de equação de estado para o sistema.

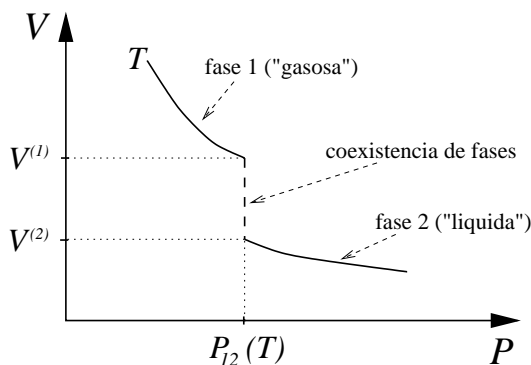


Figure 4: Curva isotérmica durante uma transição de fase de primeira ordem.

Muitas vezes a situação é invertida. Ou seja, a partir de alguma teoria aproximada, nós obtemos uma equação de estado para o sistema. Ocorre frequentemente com essas equações que, num determinado regime, elas levam a situações inconsistentes com as condições de estabilidade anteriormente descritas. O exemplo clássico é a equação de van der Waals para o gás não ideal:

$$\frac{P + a/v^2}{RT} = \frac{1}{v - b}, \quad (24)$$

onde R é a constante universal dos gases ideais e a e b são dois parâmetros relacionados com as partes atrativas e repulsivas, respectivamente, do potencial intermolecular. Com um pouco de álgebra, não é difícil mostrar que, a partir de uma certa temperatura crítica T_c , aparece uma região no diagrama de fase onde a compressibilidade é negativa (veja Fig. 5)! O ponto no qual $\kappa_{T_c} = 0$ é o ponto crítico.

A solução desse dilema está na construção de Maxwell. A instabilidade não é real e aparece como um indicativo da ocorrência de uma transição de fase de primeira ordem. A parte da curva em que aparece a compressibilidade negativa deve ser substituída por uma linha horizontal. Mas como alocar essa linha reta consistentemente? Para tal, vamos calcular a energia livre de Helmholtz do sistema integrando $-PdV$ ao longo da curva, começando da fase mais densa,

$$F(T, V) = - \int_{T, V_0}^{T, V} P(V') dV'. \quad (25)$$

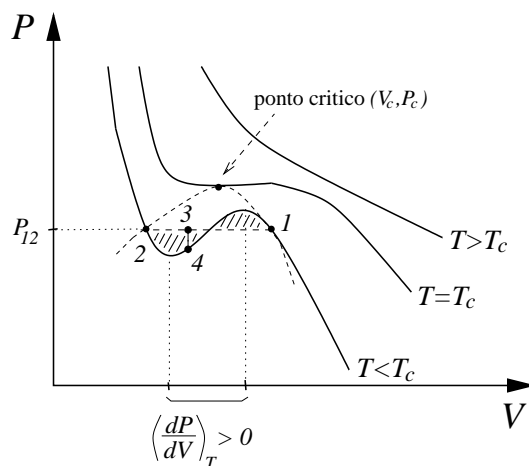


Figure 5: Curvas isotérmicas para a equação de estado de van der Waals.

O resultado é mostrado na Fig. 6. Como $P = -(\partial F/\partial V)_T$, as tangentes nos pontos a e b devem ser iguais e podem ser unida por uma linha reta. Portanto, qualquer ponto intermediário c desta linha estará abaixo do respectivo ponto d contido na curva original. No ponto c há coexistência de fases (1) e (2), mas a pressão permanece constante. Assim,

$$-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_1 = \frac{A_1 - A_2}{V_2 - V_1} = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_2. \quad (26)$$

Juntando as duas equações acima, nos chegamos a

$$P_{12}(V_2 - V_1) = \int_{V_1}^{V_2} P dV. \quad (27)$$

Portanto a linha horizontal na Fig. 5 deve ser posicionada de modo que acima e abaixo dela as áreas hachuradas sejam iguais.

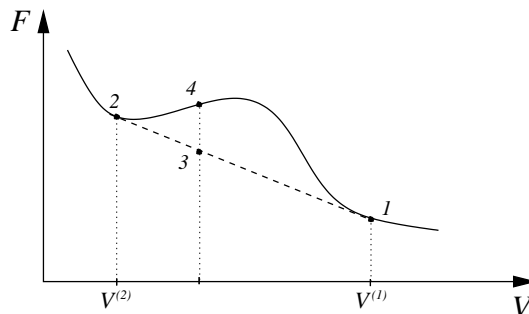


Figure 6: Energia livre na construção de Maxwell.

O lugar geométrico que une os pontos onde há separação de fases é equivalente à curva de coexistência no diagrama PT (na Fig. 5 ela é tracejada e passa pelos pontos 1, 2 e 3). Finalmente, chama-se de linha espinodal (não mostrada na Fig. 5) o lugar geométrico dos pontos em que a compressibilidade, calculada a partir da equação de van der Waals, se anula. Toda a região delimitada pela linha espinodal e a curva de coexistência é de metaestabilidade.

3 Transições de fase: abordagem variacional

3.1 Convexidade da energia livre

Vamos novamente abordar a questão da transição de fase, agora sendo um pouco mais genéricos e utilizando algumas ferramentas desenvolvidas no curso introdutório de Mecânica Estatística. Começamos definindo a função de partição do sistema (não perturbado) no ensemble canônico,

$$Z_0 = \sum_{\{x_i\}} e^{-\beta H_0(\{x_i\})}, \quad (1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$. H_0 representa a função hamiltoniana do sistema, sendo $\{x_i\}$ o seu conjunto de coordenadas. A soma é feita sobre todas as possíveis configurações dessas coordenadas. Agora vamos supor que uma certa perturbação atua sobre o sistema, de modo que a hamiltoniana passe a ser

$$H = H_0 - \lambda A, \quad (2)$$

onde A é uma certa quantidade extensiva (que depende das mesmas coordenadas $\{x_i\}$) e λ é uma variável intensiva que denota a perturbação (por exemplo, pode ser um campo magnético, sendo que neste caso A seria a magnetização). Vamos supor também que essa perturbação é ligada “adiabaticamente”, até que λ atinja o seu valor de saturação, de modo que o sistema esteja sempre em equilíbrio. Nessas condições, é fácil determinar o valor esperado (ou médio) de A :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\{x_i\}} A(\{x_i\}) e^{-\beta(H_0 - \lambda A)} \\ &= \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial(\beta\lambda)} \sum_{\{x_i\}} e^{-\beta(H_0 - \lambda A)} \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda}, \end{aligned} \quad (3)$$

onde, agora, Z é a função de partição relativa à hamiltoniana H . Diferenciando essa equação em relação a λ , chega-se à relação

$$\frac{d\langle A \rangle}{d\lambda} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \lambda^2} = \beta \left[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right] = \beta \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle. \quad (4)$$

Ou seja, $d\langle A \rangle/d\lambda \geq 0$, assim como $\partial^2 \ln Z/\partial \lambda^2 \geq 0$. Lembrando que a energia livre é dada por $F = -k_B T \ln Z$, nós podemos concluir que, no equilíbrio (quando a teoria do ensemble canônico é válida),

$$\frac{d^2 F}{d\lambda^2} \leq 0. \quad (5)$$

Concluimos então que a energia livre deve ser uma curva convexa em termos da perturbação λ , como pode ser visualizado na Fig. 7.

A energia livre F depende das características de fase em questão. Por exemplo, nós podemos imaginar uma situação em que as energias livres correspondentes a duas fases distintas do sistema, quando calculadas em função da mesma perturbação λ , cruzem-se num certo valor λ_c (vide Fig. 8).

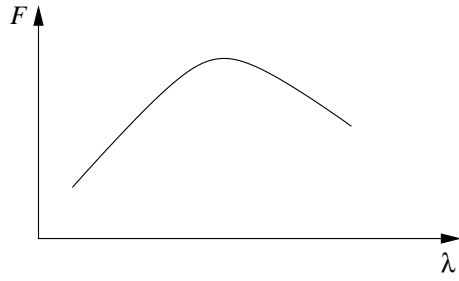


Figure 7: Convexidade da energia livre.

A cada lado do ponto de cruzamento, somente uma das fases é estável: aquela que tenha menor energia livre! A continuação da energia livre de uma fase dentro da região correspondente a outra fase caracteriza uma situação de metaestabilidade.

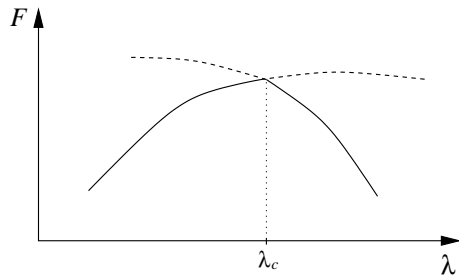


Figure 8: Transição de fase de primeira ordem.

Note que na Fig. 8 a derivada $dF/d\lambda$ não é contínua. Portanto, a transição entre as fases em questão é de primeira ordem. Neste curso nós praticamente não vamos estudar esse tipo de transição (a menos do que já foi visto no capítulo anterior). Nós iremos nos concentrar em transições de segunda ordem, como a mostrada na Fig. 9, onde F e $dF/d\lambda$ são funções contínuas em λ_c , mas $d^2F/d\lambda^2$ não é.

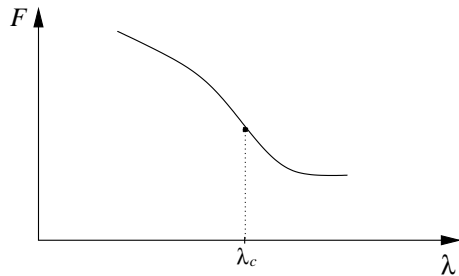


Figure 9: Transição de fase de segunda ordem.

Nesse caso, próximo ao ponto de transição, temos que

$$\frac{dF}{d\lambda} = \text{const.} + |\lambda - \lambda_c|^p, \quad (6)$$

onde $p > 0$ é um parâmetro bastante universal, dependendo exclusivamente de aspectos

gerais como dimensionalidade e simetrias do sistema, mas em nada dependendo de detalhes da hamiltoniana do sistema.

3.2 Princípio variacional

A função de partição é, do ponto-de-vista operacional, o elemento fundamental da Mecânica Estatística, a partir do qual podemos determinar todas as propriedades termodinâmicas do sistema. Contudo, nem sempre ela pode ser obtida exatamente. Em muitas situações isso não chega a ser um problema. Mesmo sem conhecê-la, é possível, de forma aproximada, determinar algumas propriedades básicas do sistema, como a existência de transições de fase.

Vamos ilustrar esse fato através de um exemplo em que se lança mão de um princípio variacional.

Nós vimos que a curvatura de energia livre é sempre negativa. Suponha que nós estejamos interessados em estudar um sistema cuja hamiltoniana H , em sua forma completa, não possibilite solução exata, mas em que seja possível isolar um termo, H_0 , perfeitamente tratável. Nós podemos então reescrever a hamiltoniana na forma

$$H' = H_0 + \lambda(H - H_0). \quad (7)$$

No limite $\lambda = 0$, $H' = H_0$ é solúvel, enquanto que para $\lambda = 1$, nós temos que $H' = H$. A função de partição Z' de H' dependerá de λ e

$$\frac{d^2 Z'}{d\lambda^2} \geq 0. \quad (8)$$

Graficamente, a situação é mostrada na Fig. 10. Não é difícil se convencer de que

$$\ln [Z'(\lambda)] \geq \ln [Z'(0)] + \lambda \left. \frac{d \ln Z'}{d\lambda} \right|_{\lambda=0}. \quad (9)$$

Como

$$\left. \frac{d \ln Z'}{d\lambda} \right|_{\lambda=0} = \beta \langle H - H_0 \rangle_{H_0}, \quad (10)$$

nós obtemos a relação variacional

$$F(\lambda = 1) \leq F(\lambda = 0) + \langle H - H_0 \rangle_{H_0}. \quad (11)$$

Conhecendo então a função de partição para a hamiltoniana H_0 , nós podemos estabelecer um limite superior para a energia livre total do sistema.

Vamos agora utilizar esse resultado para estudar o modelo de Ising:

$$-\beta H = K \sum_{\langle ij \rangle} m_i m_j + h \sum_{i=1}^N m_i, \quad (12)$$

onde $m_i = \pm 1$ e $\langle ij \rangle$ representa a soma sobre primeiros vizinhos numa rede (i e j representam os sítios da rede). Note que a conveção acima para as constantes K e h difere um pouco da usual, onde

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} m_i m_j - H \sum_{i=1}^N m_i. \quad (13)$$

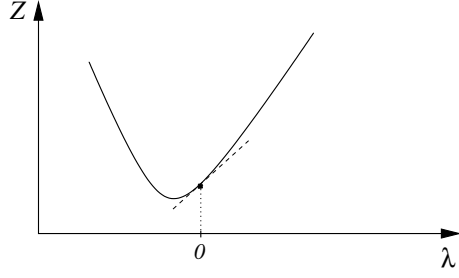


Figure 10: Função de partição .

Fazendo um mapeamento entre as duas representações , temos que $K = J/k_B T$ e $h = H/k_B T$, onde H é o campo magnético aplicado. Para interações ferromagnéticas, $J > 0$. Note que o segundo termo à direita na Eq. (12) representa uma hamiltoniana perfeitamente integrável: momentos magnéticos independentes na presença de um campo externo. Seja então

$$-\beta H_0 = \bar{h} \sum_{i=1}^N m_i, \quad (14)$$

onde \bar{h} representa uma espécie de campo médio a ser determinado posteriormente.³ Segue que a função de partição livre é dada por

$$Z_0 = \sum_{\{m_i\}} e^{-\beta H_0} = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{m_i=\pm 1} e^{\bar{h} m_i} \right) = (2 \cosh \bar{h})^N. \quad (15)$$

A energia livre associada é igual a

$$F_0 = -N k_B T \ln (2 \cosh \bar{h}). \quad (16)$$

Vamos agora calcular o valor médio

$$-\beta \langle H - H_0 \rangle_{H_0} = K \sum_{\langle ij \rangle} \langle m_i m_j \rangle_{H_0} + (h - \bar{h}) \sum_{i=1}^N \langle m_i \rangle_{H_0}. \quad (17)$$

Termo a termo,

$$\langle m_i \rangle_{H_0} = \frac{\sum_{m_i=\pm 1} m_i e^{\bar{h} m_i}}{\sum_{m_i=\pm 1} e^{\bar{h} m_i}} = \tanh \bar{h} \equiv m(\bar{h}). \quad (18)$$

e

$$\langle m_i m_j \rangle_{H_0} = \langle m_i \rangle_{H_0} \langle m_j \rangle_{H_0} = [m(\bar{h})]^2, \quad (19)$$

uma vez que no sistema com hamiltoniana H_0 os momentos magnéticos em sítios distintos são independentes. Seja z o número de coordenação da rede. Nós temos então que

$$-\beta \langle H - H_0 \rangle_{H_0} = \frac{KNzm^2}{2} + N(h - \bar{h})m. \quad (20)$$

³Aqui nós, dessa certa forma, estamos abrindo a possibilidade de que o efeito dos outros momentos magnéticos sobre possa ser visto como a criação de um campo efetivo

Agora nós podemos usar o princípio variacional e escrever que para a energia livre da hamiltoniana completa ($\lambda = 1$), vale a relação

$$-\frac{F}{Nk_B T} \geq \ln(2 \cosh \bar{h}) + \frac{Kzm^2}{2} + (h - \bar{h})m \equiv \psi(m). \quad (21)$$

(Note que $m = \tanh \bar{h}$ na nossa notação .) Dado um certo m (ou \bar{h}), a função ψ fornece uma estimativa da energia livre (limite superior). Nós podemos melhorar a estimativa escolhendo \bar{h} de modo que ψ seja mínimo:

$$\frac{d\psi}{dm} = 0 \rightarrow \bar{h} = h + Kzm. \quad (22)$$

Essa solução é chamada de campo médio. Como imaginávamos, o campo magnético efetivo é igual ao campo externo aplicado mais a magnetização média devida aos momentos magnéticos primeiros vizinhos. O campo médio m é solução da equação transcendental

$$m = \tanh(h + Kzm). \quad (23)$$

Há dois aspectos importantes nessa expressão. O primeiro é que, para ela admite uma solução em que a magnetização do sistema é proporcional ao campo externo: $h \ll 1eKz < 11$, então

$$m \approx \frac{h}{1 - Kz}. \quad (24)$$

Ou seja, na presença de campo externo, há magnetização . Contudo, mesmo quando $h = 0$, desde que $Kz > 1$, é possível haver magnetização também (veja Fig. 10). Esse é o segundo aspecto da equação acima, certamente não-trivial. Para temperaturas $T < T_c$, onde $T_c = Jz/k_B$, ocorre uma magnetização espontânea do sistema.

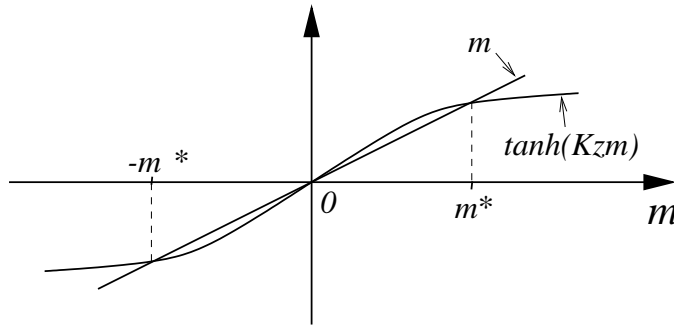


Figure 11: Solução gráfica da Eq. (23).

Próximo à temperatura de transição, não é difícil mostrar que (basta expandir a função \tanh até 3ª ordem)

$$m(T) \approx \sqrt{3 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)}. \quad (25)$$

Não é possível determinar uma expressão analítica $m(T)$ para qualquer $T < T_c$, mas a solução pode ser implementado numericamente. O resultado é mostrado na Fig. 12. À temperatura zero, todos os momentos magnéticos estão polarizados.

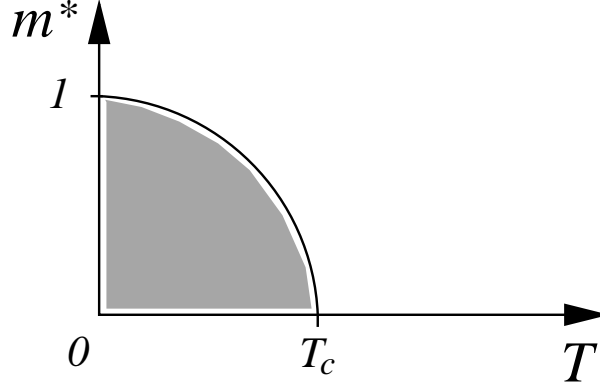


Figure 12: Magnetização espontânea.

A transição ferromagnética que ocorre em $T = T_c$ na ausência de campo magnético é de 2ª ordem. Para verificar essa afirmação, vamos escrever a função ψ em função de temperaturas próximas a T_c mantendo somente termos $O(m^2)$:

$$\psi_{\min}(T) \approx \ln 2 + \frac{T_c}{T} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \frac{m^2(T)}{2} \approx \begin{cases} \ln 2, & T > T_c, \\ \ln 2 - \frac{3}{2} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2, & T < T_c. \end{cases} \quad (26)$$

Portanto, a derivada segunda, $d^2\psi/dT^2$ é descontínua em $T = T_c$. Note ainda que a susceptibilidade magnética, definida como a derivada da magnetização em função do campo magnético quando este último tende a zero diverge. Ou seja, com um pouco de álgebra, não é difícil mostrar que

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_T \approx A_{\pm} |T - T_c|^{-1} \quad (27)$$

próximo ao ponto de transição. A amplitude A_{\pm} depende de que lado estamos da transição, mas o expoente algébrico da divergência é o mesmo.

Apesar de termos mostrado que a Eq. (23) é uma condição de extremo do funcional ψ , faltou verificar que ela corresponde a um máximo, ou seja, que a derivada segunda de ψ em relação a m é sempre negativa. Vamos fazer isso nos concentrando na região de parâmetros (h e T) onde $m \ll 1$. Nesse caso, podemos escrever que $\bar{h} = \text{arctanh} m \approx m + m^3/3$. Além disso, lembrando que $\cosh \bar{h} = 1/\sqrt{1 - m^2}$, nós temos que

$$\begin{aligned} \psi(m) &= \ln 2 - \frac{1}{2} \ln(1 - m^2) + \frac{Kz}{2} m^2 + [h - \text{arctanh}(m)]m \\ &\approx \ln 2 + h m + \frac{(Kz - 1)}{2} m^2 - \frac{1}{12} m^4. \end{aligned} \quad (28)$$

Portanto,

$$\frac{\partial \psi}{\partial m} \approx h + (Kz - 1)m - \frac{1}{3} m^3 \quad \text{e} \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial m^2} \approx Kz - 1 - m^2. \quad (29)$$

Quando $h = 0$, a condição $\partial\psi/\partial m = 0$ implica em $m = 0$ (fase paramagnética ou desordenada, quando $Kz < 1$) ou então $m^2 = 3(Kz - 1)$ (fase ferromagnética ou ordenada, quando $Kz > 1$). Em ambos os casos, note que $\partial^2\psi/\partial m^2 > 0$ sempre. Portanto, as fases são estáveis

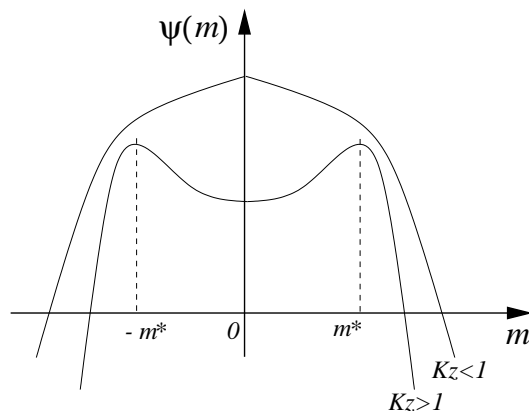


Figure 13: Funcional de energia livre na aproximação variacional em função da magnetização média ($h = 0$).

e correspondem ao melhor (maior) limite inferior da desigualdade da Eq. (21). A Eq. (23) corresponde a um máximo local do funcional $\psi(m)$, como mostra a Fig. 13.

Há dois aspectos interessantes embutidos na Eq. (29) quando assumimos $\partial\psi/\partial m = 0$. Note que para $Kz = 1$ ($T = T_c$, isotérma crítica), nós obtemos a solução

$$m \approx (3h)^{1/3}. \quad (30)$$

Por outro lado, para $T > T_c$, se o campo magnético aplicado for suficientemente fraco, nós chegamos facilmente à relação

$$m \approx \frac{h}{1 - Kz}. \quad (31)$$

Juntando esses resultados à Eq. (25) num diagrama $m \times T$, nós temos a Fig. 14. Note um fato importante. Para $T < T_c$, quando aplicamos um campo magnético oposto à magnetização já existente no sistema, aparece o fenômeno de histerese (linha tracejada). Fica a cargo do estudante mostrar que na presença de um campo magnético, a transição de fase (passagem de paramagnético a ferromagnético) deixa de ser de segunda ordem e passa a ser de primeira.

É importante obviamente não perder de vista que esses resultados foram obtidos a partir de uma teoria aproximada. A princípio, nada impede que tudo mude quando conseguirmos uma aproximação para a energia livre melhor do que o método variacional delineado na Eq. (21). Por exemplo, note que a solução de campo médio que acabamos de utilizar não distingue a dimensionalidade do sistema. Como veremos mais adiante, esse método é tanto pior quando mais baixa for a dimensão espacial; em particular, para $D = 1$ (cadeias de spin), flutuações são extremamente importantes e ele é extremamente inadequado. Para dimensões altas, ele pode ser muito bom se comparado à solução exata.

Porém, uma mensagem muito forte certamente fica. Nós conseguimos um exemplo no qual uma transição de fase de segunda ordem pode ocorrer. A transição está associada a uma quebra espontânea de simetria do sistema: apesar da hamiltoniana ser invariante a transformações do tipo $m_i \rightarrow -m_i$, para $T < T_c$ o sistema assume um estado em que essa simetria não vale (há um direção preferencial). Como veremos nos próximos capítulos, esse é uma das propriedades mais gerais e importantes de sistemas condensados e que até mesmo transcende a física da matéria condensada. Finalmente, lembre-se que a susceptibilidade do

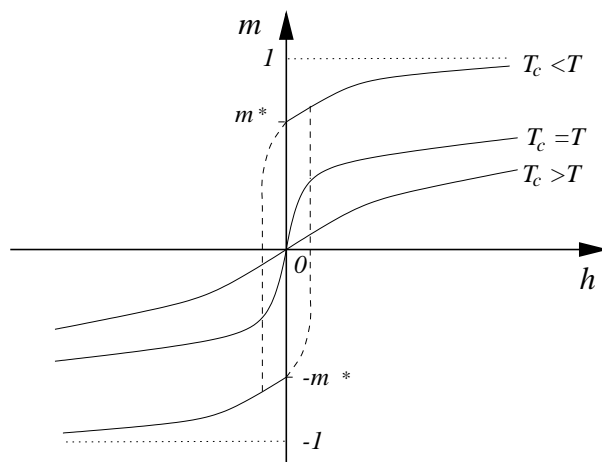


Figure 14: Magnetização em função do campo aplicado para diferentes temperaturas.

sistema divergiu no ponto de transição. Essa será outra característica marcante das transições de segunda ordem.

4 Fenômenos Críticos

Na seção anterior nós estudamos um exemplo no qual aparece uma transição de fase de segunda ordem. Duas coisas devem ter então ficado claras. Em primeiro lugar, concluímos que o aparecimento da transição está ligado à existência de interações entre as partículas ou constituintes elementares do sistema e ao limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$). Em segundo lugar, as propriedades físicas na região de transição apresentam singularidades, como por exemplo, a divergência da susceptibilidade magnética ou a descontinuidade do valor médio da magnetização.

Existem muitos outros sistemas na natureza que exibem comportamentos semelhantes quando próximos a pontos de transição de fase. Muitas vezes esses sistemas são completamente diferentes do ponto de vista físico e, mesmo assim, apresentam os mesmos tipos matemáticos de divergências ou discontinuidades. Esse comportamento não analítico de certas grandezas termodinâmicas é usualmente caracterizado por conjuntos de expoentes denominados críticos. Segue abaixo uma lista das propriedades termodinâmicas mais comuns e importantes e seus respectivos expoentes críticos (note o uso de letras gregas para estes últimos):

1. *Parâmetro de ordem.* É a quantidade física que difere as duas fases do sistema que podem coexistir. Por exemplo, no caso do ponto crítico do sistema líquido-gás ele é igual a diferença de densidades, $\delta\rho = \rho_l - \rho_g$. No caso do modelo de Ising, o parâmetro de ordem era a magnetização média do sistema por sítio,

$$m = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{M(h)}{N} \sim \begin{cases} 0, & T > T_c, \\ |T - T_c|^\beta, & T < T_c. \end{cases} \quad (1)$$

onde, na aproximação de campo médio, $\beta = 1/2$ independentemente da dimensão do sistema. Existe também um expoente associado à dependência isotérmica do parâmetro de ordem com o campo aplicado. À temperatura crítica, nós vimos que, para o modelo de Ising,

$$m \sim h^{1/\delta}. \quad (2)$$

Dentro da aproximação de campo médio, nós obtivemos $\delta = 3$, novamente independentemente da dimensão. Como veremos mais tarde, isso não é exatamente correto. No caso do sistema líquido-gás, $\delta\rho \sim |P - P_c|^{1/\delta}$ e, na aproximação de van der Waals, $\delta = 2$.

2. *Susceptibilidade magnética linear.*

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right)_{h=0} \sim |T - T_c|^{-\gamma_\pm}, \quad (3)$$

onde \pm denota de que lado nos aproximamos da transição (baixa ou alta temperatura, respectivamente). Em geral, $\gamma_\pm > 0$, havendo então uma divergência no ponto crítico. Portanto, $\delta > 1$ necessariamente. No caso do modelo de Ising na aproximação de campo médio, nós obtivemos $\gamma_\pm = \gamma = 1$.

3. *Compressibilidade isotérmica.*

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \sim |T - T_c|^{-\gamma_\pm}. \quad (4)$$

(Em geral, a letra γ é então reservada para os expoentes críticos associados a funções resposta do sistema.)

4. Capacidade térmica.

$$C \sim |T - T_c|^{-\alpha \pm}. \quad (5)$$

O que estaria por trás do grande grau de universalidade do comportamento crítico? Em primeiro lugar, vamos lembrar do significado físico da divergência das funções -resposta próximo ao ponto de transição de fase. Num sistema em que se encontra em sua fase “diluída” ou “desordenada” (alta temperatura), a entropia maximizada domina sobre a energia minimizada. Ou seja, a agitação térmica do sistema predomina sobre qualquer tendência de ordenamento ou de organização do sistema imposta pelas interações. As flutuações são de curto alcance espacial e a dinâmicas individuais das partículas do sistema estão descorrelacionadas. Ao baixarmos a temperatura em direção à temperatura crítica, o alcance das flutuações aumenta; um número cada vez maior de partículas vizinhas cooperam entre si de forma que as suas dinâmicas se correlacionem fortemente. Nessa situação, cada vez mais o sistema tende a responder de forma mais global, ou seja, como se o número de constituintes independentes decrescesse (e a “inércia” de cada um deles fosse cada vez maior). Uma leve perturbação no movimento de uma partícula é amplificado a uma perturbação que atinge indiretamente um grande número delas. Portanto, o sistema responde de forma cada vez mais intensa. Exatamente no ponto crítico, o comprimento característico de correlação das flutuações no sistema abrange o tamanho macroscópico linear do sistema. No sentido termodinâmico, o sistema se torna infinitamente sensível a perturbações e suas funções -resposta divergem.

Nós podemos ilustrar esse raciocínio utilizando o chamado teorema flutuação-dissipação, ou seja, a relação entre flutuações e respostas lineares.⁴ Seja então um sistema de magnetos acoplados entre si e a um campo magnético externo. A função de partição do sistema tem a forma

$$Z = \text{tr} \left\{ e^{-\beta[\mathcal{H} - h \int d^3r m(r)]} \right\}, \quad (6)$$

onde $M = \int d^3r m(r)$ é a magnetização do sistema. O seu valor esperado é igual a

$$\langle M \rangle = \frac{\partial \ln Z}{\partial(\beta h)} = \frac{\text{tr}[M \dots]}{[\dots]}. \quad (7)$$

A resposta linear do sistema – susceptibilidade – é igual a

$$\begin{aligned} \chi &= \left(\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial h} \right)_{h=0} = \beta \left(\frac{\partial \langle M \rangle}{\partial(\beta h)} \right)_{h=0} = \beta \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial(\beta h)^2} \right)_{h=0} \\ &= \beta \left\{ \frac{1}{Z} \text{tr} [M^2 \dots] - \frac{1}{Z^2} \text{tr}^2 [M \dots] \right\} \\ &= \beta [\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2]. \end{aligned} \quad (8)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} k_B T \chi &= \int d^3r \int d^3r' [\langle m(r)m(r') \rangle - \langle m(r) \rangle \langle m(r') \rangle] \\ &= V \int d^3r \langle m(r)m(0) \rangle_c. \end{aligned} \quad (9)$$

⁴A palavra dissipação é tradicionalmente usada porque, no caso de um campo elétrico aplicado a um condutor, a função resposta do sistema – a condutividade – é proporcional à energia dissipada.

A susceptibilidade é proporcional à integral espacial da função de correlação da magnetização local. Como, em geral,

$$\langle m(r)m(r') \rangle_c \sim e^{-r/\xi}, \quad (10)$$

onde χ é o comprimento de correlação das flutuações de $m(r)$, nós podemos estimar

$$k_B T \chi \sim a V \xi^3, \quad (11)$$

onde a é uma constante. Assim, quando $\chi \rightarrow \infty$, o mesmo ocorre com ξ . Podemos então definir mais um expoente crítico,

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu_{\pm}}. \quad (12)$$

No ponto crítico de transição de fase, as flutuações se correlacionam a grandes distâncias ($\nu_{\pm} > 0$). No restante do curso, nós vamos determinar os expoentes críticos para um grande número de sistemas e descobrir que eles se encaixam em classes de universalidade, além de respeitarem relações entre si. Como observação final, vale dizer que o fato do comprimento de correlação ser muito grande próximo ao ponto crítico tem implicações experimentais visíveis em sistema líquido-gás. Ocorre o fenômeno da opalescência: porções macroscópicas do sistema passam a espalhar luz de forma coletivo (ou seja, envolvendo um grande número de partículas), envolvendo então muitos comprimentos de onda na região visível do espectro. Nesse ponto, o sistema tem um aspecto leitoso, esbranquiçado.

5 Modos coletivos: de partículas a campos

No capítulo anterior, nós ampliamos o estudo da Mecânica Estatística para pelo menos uma situação em que há interações entre as partículas ou elementos constituintes do sistema. Como resultado, nós obtivemos a descrição de uma transição de fase do tipo ferromagnético-paramagnética. Ficou claro contudo que sistemas interagentes, de um modo geral, requerem algum tipo de aproximação para poderem ser estudados analiticamente. Neste capítulo nós vamos dar um passo além no sentido de estabelecer uma metodologia para o tratamento de sistemas interagentes. Nós vamos passar de uma descrição baseada em partículas individuais (discreta) para uma em que campos (contínuo) são os entes fundamentais.

Isso ocorre porque, para quem está interessado em propriedades termodinâmicas de um sistema, a descrição em termos de partículas é por vezes exageradamente detalhada ou então simplesmente desnecessária. Vimos no exemplo do modelo de Ising na aproximação de campo médio que a propriedade característica de uma fase homogênea era o número $m = \langle m_i \rangle$, independente de coordenadas espaciais. Ou seja, o conhecimento local da magnetização foi substituído pela sua média. Apesar dessa média ter sido feita sobre um ensemble, não é difícil se convencer que o mesmo resultado seria obtido caso fosse feita uma média espacial sobre as vizinhanças em torno de um dado sítio. Isso acontece porque as flutuações em m_i têm comprimentos característicos ξ muito maiores do que a distância média entre sítios, a . Isso certamente vale para a fase “ordenada” (ferromagnética), mas também é verdade na fase “desordenada” (paramagnética), desde que estejamos suficientemente próximos à temperatura de transição.

Portanto, por que então não substituir a variável m_i por um campo efetivo $m(x)$ com uma escala típica de variação muito maior do que a , mas menor do que ξ , de modo a poder capturar as flutuações mais relevantes quando próximo ao ponto de transição? Tal procedimento é chamado de granulação grosseira (numa tradução direta do inglês *coarse graining*). Para ilustrar esse procedimento, vamos revisitar um problema corriqueiro: vibrações na rede cristalina.

5.1 Fônons e Elasticidade

Vamos nos concentrar no estudo de um sólido cristalino do ponto de vista do movimento dos íons. Seja $\Phi = \Phi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ o potencial de interação entre eles e r_i , $i = 1, \dots, N$ os seus vetores de posição. Os íons tendem a adotar posições de equilíbrio $\{r_i^{(0)}\}$ de modo a minimizar Φ . As vibrações da rede cristalina podem então ser vistas como deslocamentos coletivos dos íons em relação a essas posições de equilíbrio: $u_i = r_i - r_i^{(0)}$, $i = 1, \dots, N$. Podemos escrever que

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_{i,\alpha} u_i^\alpha \left. \frac{\partial \Phi}{\partial u_i^\alpha} \right|_0 + \frac{1}{2} \sum_{ij,\alpha\beta} u_i^\alpha u_j^\beta \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_i^\alpha \partial u_j^\beta} \right|_0 + O(u^3). \quad (1)$$

Neste caso, a hamiltoniana dos íons será

$$\mathcal{H} = \frac{m}{2} \sum_{i,\alpha} \dot{u}_i^\alpha \dot{u}_i^\alpha + \frac{1}{2} \sum_{ij,\alpha\beta} K_{ij}^{\alpha\beta} u_i^\alpha u_j^\beta + O(u^3). \quad (2)$$

Como em geral $K_{ij} = f(|r_i^{(0)} - r_j^{(0)}|)$ somente, é fácil reescrever a hamiltoniana em termos dos modos normais

$$u^\alpha(q) = \sum_i e^{iq \cdot r_i^{(0)}} u_i^\alpha, \quad (3)$$

de modo que

$$\mathcal{H} = \sum_q \left[\frac{m}{2} \dot{u}^\alpha(q) \dot{u}^\alpha(q) + \frac{\tilde{K}^{\alpha\beta}(q)}{2} u^\alpha(q) u^\beta(q) \right] + O(u^3). \quad (4)$$

Para simplificar, vamos assumir que o cristal seja isotrópico, ou seja, $\tilde{K}^{\alpha\beta} = k\delta_{\alpha\beta}$. Segue então que, numa aproximação quadrática (pequenos deslocamentos),

$$\mathcal{H} = \sum_{q,\alpha} \left\{ \frac{m}{2} [\dot{u}^\alpha(q)]^2 + \frac{k(q)}{2} [u^\alpha(q)]^2 \right\}. \quad (5)$$

Claramente, a relação de dispersão dos modos normais neste caso é igual a

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{k(q)}{m}}. \quad (6)$$

Como foi visto em cursos anteriores, é fácil quantizar esses modos normais:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{q,\alpha} \hbar\omega(q) [\hat{n}_\alpha(q) + 1/2], \quad (7)$$

onde $\hat{n}_\alpha(q)$ representa o operador número. Seu valor esperado, $\langle \hat{n}_\alpha(q) \rangle$ é igual ao número de ocupação do estado $\{\alpha, q\}$. Lembrando que os fônons (quanta de oscilação da rede cristalina) são bósons, nos temos que

$$\langle \hat{n}_\alpha(q) \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega(q)/k_B T} - 1}. \quad (8)$$

A partir deste ponto podemos calcular a energia interna do sistema de fônons (na aproximação quadrática) e determinar propriedades termodinâmicas como, por exemplo, a capacidade térmica.

Exemplo: a cadeia unidimensional com acoplamento entre primeiros vizinhos (veja Fig. 15).

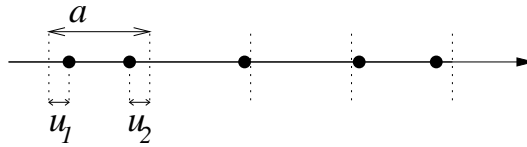


Figure 15: Rede cristalina em uma dimensão.

Nós começamos pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[\frac{m}{2} \dot{u}_i^2 + \frac{k}{2} (u_{i+1} - u_i)^2 \right]. \quad (9)$$

Definimos os modos normais

$$u(q) = \sum_i e^{iqr_i^{(0)}} u_i, \quad u_i = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} e^{-iqr_i^{(0)}} u(q). \quad (10)$$

Obtemos

$$\mathcal{H} = \frac{m}{2} \int \frac{dq}{2\pi} |\dot{u}(q)|^2 + \frac{k}{2} \int \frac{dq}{2\pi} (2 - 2 \cos q) |u(q)|^2, \quad (11)$$

lembrando que

$$\sum_i e^{i(q+q')r_i^{(0)}} = 2\pi \delta(q+q'). \quad (12)$$

Portanto,

$$\omega(q) = \sqrt{\frac{k(2 - 2 \cos q)}{m}} = \sqrt{\frac{k}{m}} 2|\sin(q/2)| \approx \sqrt{\frac{k}{m}} q \quad (q \ll 1). \quad (13)$$

A energia interna relativa a esse modos coletivos é igual a

$$\begin{aligned} E(T) &= E_0 + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dq}{2\pi} \frac{\hbar\omega(q)}{e^{\hbar\omega(q)/k_B T} - 1} \\ &= E_0 + \frac{(k_B T)^2}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} \int_0^{2\hbar/k_B T \sqrt{k/m}} \frac{u \, du}{(e^u - 1) \sqrt{1 - m(k_B T)^2 u^2 / 4\hbar^2 k}}. \end{aligned} \quad (14)$$

Quando $T \rightarrow 0$, chega-se a

$$E(T) \approx E_0 + (\#) \frac{(k_B T)^2}{\hbar} \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (15)$$

onde

$$(\#) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{u \, du}{e^u - 1}. \quad (16)$$

Ou seja, a capacidade térmica varia linearmente com a temperatura.

$$C(T) = \frac{dE}{dT} = (\#) \frac{k_B}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} T. \quad (17)$$

Ou seja, $C \approx AT^p$, onde A envolve constantes universais (\hbar , k_B , π , etc.) e detalhes do sistema (k e m), enquanto que p é um *número* universal. Naturalmente, a pergunta que se faz em seguida é: não seria possível determinar p sem fazer cálculos microscópicos tão detalhados? Será que p não depende somente de informações básicas como dimensionalidade e simetrias presentes no sistema?

A resposta é positiva. O procedimento de granulação grosseira serve exatamente para isso. Nós substituímos

1. termo cinético $\longrightarrow \frac{\rho}{2} \int dx [\dot{u}(x)]^2$

2. termo potencial $\longrightarrow \Phi[u(x)],$

onde ρ representa a densidade (uniforme) de ions e $u(x)$ é um campo contínuo que substitui u_i . O vetor de posição x varia sobre regiões muito maiores do que o espaçamento médio entre os níveis $a = 1/\rho$. O funcional Φ deve obedecer a algumas propriedades:

1. localidade $\longrightarrow \Phi[u(x)] = \int dx \phi\left(x, \frac{du}{dx}, \dots\right)$

2. simetria de translação $\longrightarrow \Phi[u(x) + c] = \Phi[u(x)].$

Assim, em ordem crescente em $u(x)$, um bom candidato seria

$$\Phi[u(x)] = \int \left[\frac{k}{2} \left(\frac{du}{dx} \right)^2 + \frac{L}{2} \left(\frac{d^2u}{dx^2} \right)^2 + \dots + M \left(\frac{du}{dx} \right)^3 + \dots \right]. \quad (18)$$

Note a ausência de termos lineares, uma vez que implicitamente supusemos que Φ é sempre mínima em relação aos deslocamentos u . Podemos também usar a representação em espaço de Fourier,

$$u(q) = \int dx e^{iqx} u(x) \quad (19)$$

para escrever

$$\Phi = \int \frac{dq}{2\pi} \left[\frac{k}{2} q^2 |u(q)|^2 + \frac{L}{2} q^4 |u(q)|^2 + \dots \right]. \quad (20)$$

No limite de baixas temperaturas ($T \rightarrow 0$) somente os modos de baixa frequência (e grandes comprimentos de onda, $q \rightarrow 0$) são importantes. Este é o chamado limite hidrodinâmico. Nesse caso, é essencial manter somente o primeiro termo da expansão do lado direito da Eq. (20). Assim,

$$\mathcal{H} \approx \frac{\rho}{2} \int \frac{dq}{2\pi} \left[|\dot{u}(q)|^2 + \frac{kq^2}{2\rho} |u(q)|^2 \right] = \frac{\rho}{2} \int dx \left[\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + v^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right], \quad (21)$$

onde $v = \sqrt{k/\rho}$ e $\omega(q) = v|q|$. Note quanto progresso fizemos sem precisar escrever a hamiltoniana microscópica do sistema. A partir deste ponto, basta utilizar a primeira linha da Eq. (14) para chegar à conclusão que, em uma dimensão, $E(T) \sim T^2$ e portanto $C \sim T$ toda vez que a relação de dispersão $\omega(q)$ for linear.

Podemos agora generalizar o resultado acima para d dimensões:

$$u(x) \rightarrow \vec{u}(\vec{x}) \quad (22)$$

e

$$\Phi[u(x)] \rightarrow \Phi[u^\alpha(\vec{x})]. \quad (23)$$

Agora, as restrições sobre Φ devem ser modificadas. Com relação à localidade, tudo continua igual; espacialmente porém, os termos de expansão devem apresentar não só invariância de translação, mas também de rotação:

$$\Phi \left[\sum_{\beta} R_{\alpha\beta} u^\beta(\vec{x}) + c^\alpha \right] = \Phi [u^\alpha(\vec{x})],$$

onde $R_{\alpha\beta}$ representa uma matrix de rotação. Ou seja, Φ deve envolver combinações de derivadas de u^α que sejam invariantes a rotações. Uma maneira convencional de se implementar essa restrição é utilizar o tensor de “stress”,

$$u^{\alpha\beta}(\vec{x}) \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u^\alpha}{\partial x^\beta} + \frac{\partial u^\beta}{\partial x^\alpha} \right). \quad (24)$$

Se o sistema for anisotrópico, isso leva a

$$\Phi = \int d^d x \left[\frac{\mu}{2} \sum_{\alpha\beta} u^{\alpha\beta} u^{\beta\alpha} + \frac{\lambda}{2} \sum_{\alpha} u^{\alpha\alpha} \sum_{\beta} u^{\beta\beta} + O(u^3) \right], \quad (25)$$

onde μ e λ são chamados de coeficientes de Lamé. Na realidade, é mais prático (e fisicamente mais intuitivo) visualizar esses termos na representação do espaço de Fourier:

$$\Phi \approx \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[\frac{\mu q^2}{2} |\vec{u}(\vec{q})|^2 + \frac{\mu + \lambda}{2} |\vec{q} \cdot \vec{u}(\vec{q})|^2 \right]. \quad (26)$$

Claramente essa expressão contém os dois únicos invariantes quadráticos em u possíveis: o próprio módulo de u ao quadrado e o quadrado do módulo de seu gradiente. Quaisquer outros termos são de ordem mais alta em u ou \vec{q} . A partir dessa expressão é fácil separar os $(d-1)$ modos transversais ($\vec{u} \perp \vec{q}$) do modo longitudinal ($\vec{u} \parallel \vec{q}$):

$$\omega_T(\vec{q}) = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} |\vec{q}| \quad \text{e} \quad \omega_L(\vec{q}) = \sqrt{\frac{2\mu + \lambda}{\rho}} |\vec{q}|. \quad (27)$$

Finalmente,

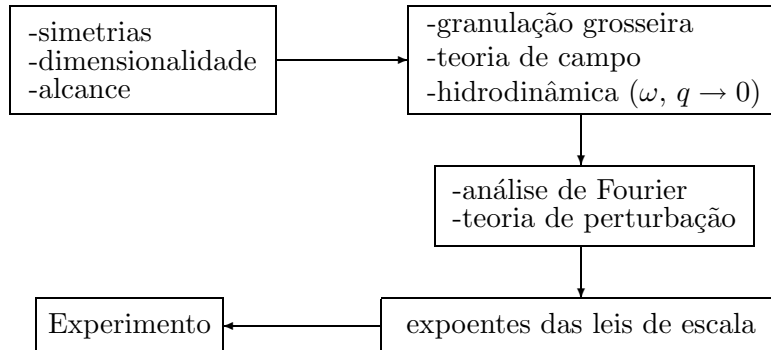
$$E(T) \approx E_0 + \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[\frac{\hbar \omega_L(\vec{q})}{e^{\hbar \omega_L/k_B T} - 1} + \frac{(d-1)\omega_T(\vec{q})}{e^{\hbar \omega_T/k_B T} - 1} \right]. \quad (28)$$

Contando potências de q é fácil ver que há $d+1$ delas (d provenientes do diferencial de integração e 1 do fator de energia). Como $\omega \sim q$, nós podemos fazer a mudança de variável $u \equiv \hbar \omega/k_B T$ em cada um dos termos do integrando e chegar ao resultado

$$E(T) - E_0 \approx A(v_L, v_T, d) T^{d+1}, \quad (29)$$

ou seja, $C \sim T^d$ para $T \rightarrow 0$. Algumas observações são pertinentes:

1. A dependência com o material aparece exclusivamente no coeficiente A .
2. O expoente da lei de escala só depende da dimensionalidade (mas, em geral, pode variar com o alcance das interações).
3. Em geral os expoentes são indicadores precisos da física dos modos de excitações mais elementares do sistema. Por exemplo, para o gás de Bose (partículas com massa), a dispersão é quadrática ($\varepsilon \sim k^2$) e achamos $C \sim T^{3/2}$ em $d=3$. Note que as excitações elementares que acabamos de tratar (fônons) são exemplos de fenômenos coletivos, onde muitas partículas (ions) cooperam através das interações e reformulam a resposta do sistema a baixas temperaturas.
4. O programa geral a ser seguido na granulação grosseira é o seguinte:



6 Teoria de Ginzburg-Landau

Nas aulas anteriores nós vimos que na vizinhança dos pontos críticos as flutuações no sistema se correlacionam a grandes distâncias, produzindo divergências nas funções-resposta. Nessas circunstâncias, os aspectos e detalhes microscópicos do sistema deixam de ser importantes. Até mais do que isso, eles passam a ser complicadores desnecessários na descrição da transição de fase. Isso acontece porque quem responde pela física do sistema são os modos de excitação coletivos e o que importa é o seu comportamento no limite hidrodinâmico ($\vec{q} \rightarrow 0$).

Portanto, o processo de granulação grossiera é especialmente útil no estudo de fenômenos críticos. Detalhes microscópicos são deixados de lado e a teoria é desenvolvida com base em aspectos de dimensionalidade e simetria do problema e na identificação dos graus de liberdade relevantes. No caso do modelo de Ising (ou qualquer outro modelo fraseado em termos de spins ou momentos magnéticos locais), nós substituímos a variável m_i pelo campo médio $m(\vec{r})$ através de um processo de média (suavização)

$$m(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_{i \in \{\vec{r}\}_\lambda} m_i, \quad (1)$$

como indicado na Fig. 16.

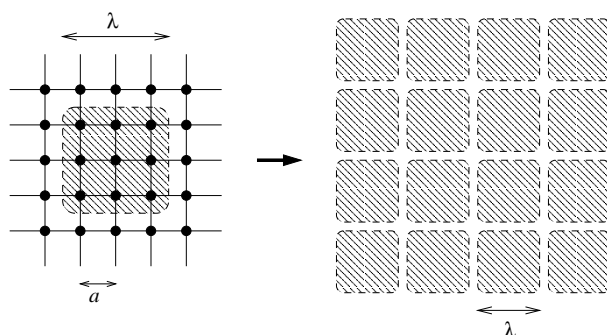


Figure 16: Granulação grosseira dos momentos magnéticos locais.

Obviamente, nesse processo perde-se qualquer informação a respeito de correlações ou flutuações que aconteçam em escalas menores do que λ . Contudo, isso não chega a ser um problema (muito pelo contrário!) quando estamos próximos à transição de fase.

Como escolher então os campos apropriados à descrição da uma certa transição em sistemas diferentes do modelo de Ising? Talvez esse seja um dos pontos-chave da interpretação do fenômeno físico em si. Não há regra geral a seguir além da intuição e experiência. Por hora, vamos nos concentrar nos aspectos mais quantitativos.

Em primeiro lugar, é preciso determinar a dimensionalidade do espaço:

$$\begin{aligned} \vec{x} = x & \quad (d = 1) & \quad \text{unidimensional} \\ \vec{x} = (x_1, x_2) & \quad (d = 2) & \quad \text{bidimensional} \\ \vec{x} = (x_1, x_2, x_3) & \quad (d = 3) & \quad \text{tridimensional} \\ & \quad \dots & \end{aligned}$$

Vamos denotar por d a dimensão espacial do sistema e $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ o seu vetor posição. O próprio parâmetro de ordem m também pode ser um escalar ou um vetor (vamos deixar de lado a possibilidade dele ser um tensor):

$$\vec{m} = (m_1, m_2, \dots, m_n),$$

onde n denota a dimensão (número de componentes). Por exemplo, alguns casos comuns são:

1. $n = 1$. modelo de Ising (magnetos uniaxiais), transição líquido-gas, misturas binárias;
2. $n = 2$. supercondutores, superfluidos, magnetos polares (modelo XY);
3. $n = 3$. magnetos ordinários (modelo de Heisenberg).

Uma vez estabelecidos a dimensionalidade do sistema e o campo associado ao parâmetro de ordem, é preciso construir uma hamiltoniana efetiva. A idéia de Landau foi usar para tal fim somente os vínculos de simetria impostos pela natureza do sistema e supor que, próximo ao ponto de transição, só são relevantes os termos de mais baixa ordem em \vec{m} (ou seja, $|\vec{m}| \ll 1$). Tipicamente, as restrições a seguir são as seguintes:

1. localidade

$$\beta\mathcal{H}[\vec{m}] = \int d^d x \Phi[\vec{m}(\vec{x})].$$

2. isotropia (invariância a rotações)⁵

$$\mathcal{H}[R^{(n)}\vec{m}] = \mathcal{H}[\vec{m}].$$

3. uniformidade (invariância a translações)⁶

$$\Phi[\vec{m}(\vec{x} + \vec{c})] = \Phi[\vec{m}(x)].$$

As condições 2) e 3) implicam que somente termos do tipo

$$\vec{m} \cdot \vec{m} = m^2, \quad m^4, \quad m^6, \quad \dots$$

$$(\nabla\vec{m})^2, \quad (\nabla^2\vec{m}), \quad m^2(\nabla\vec{m})^2, \quad \dots$$

possam aparecer em Φ . Termos ímpares não satisfazem 2) em geral; contudo, eles podem ser necessários em alguns casos (nós veremos isso ocorrer em exemplos), sendo o mais comum aquele onde há um campo magnético externo e que leva à inclusão da energia magnética

$$-\vec{h} \cdot \vec{m}.$$

Usando os termos de mais baixa ordem permitidos, nós podemos escrever a expansão

$$\Phi[\vec{m}(\vec{x})] = \frac{t}{2} m^2 + u m^4 + \frac{K}{2} (\nabla\vec{m})^2 + \dots - \vec{h} \cdot \vec{m}. \quad (2)$$

⁵Obviamente isso só vale quando na ausência de um campo externo aplicado.

⁶Na presença de desordem “fixa”, essa restrição não se aplica.

Note que não incluímos derivadas em ordem $O(m^2)$ além do gradiente. Isso porque cada derivada em relação a \vec{x} traz consigo uma potência em \vec{q} (pensando em componentes de Fourier). No limite $\vec{q} \rightarrow 0$, correspondente a flutuações suaves e de grande comprimento de onda, os termos de ordem $O(q^4)$ se tornam irrelevantes.

Os parâmetros de expansão t , u , K , etc., são fenomenológicos. Isto é, devem ser determinados a posteriori, quando os resultados da teoria são confrontados com os dados experimentais. Neles estão embutidas dependências não-universais com T , P , V , etc. Note que essas dependências são extremamente difíceis de serem determinadas exatamente por primeiros princípios (microscopicamente), devido ao processo de granulação grosseira (o qual carrega em si um grande grau de arbitrariedade). Em raros casos é possível estabelecer uma ligação entre t , u , K , etc. e os parâmetros microscópicos do sistema.

Vamos agora nos concentrar em outro aspecto do problema, de certo modo formal, que tem profundas implicações práticas. Para calcular propriedades físicas e termodinâmicas do sistema (sempre suposto em equilíbrio), é necessário determinar a função de partição. Após a granulação grosseira, a única variável de configuração passou a ser $\vec{m}(\vec{x})$. Portanto,

$$\mathcal{Z} = \int D\vec{m}(\vec{x}) e^{-\beta\mathcal{H}[\vec{m}]}.$$
 (3)

Ou seja, devemos somar os pesos de Boltzmann de todas as possíveis configurações do campo $\vec{m}(\vec{x})$. Como fazer isso?

A Eq. (3) acima é um exemplo de integração funcional. Negligenciando detalhes matemáticos ou qualquer rigor, para nós, ela nada mais é do que a soma de um número muito grande de integrais usuais:

$$\mathcal{Z} = \lim_{\lambda \rightarrow 0, N \rightarrow \infty} \int \prod_{i=1}^N d^n m_i e^{-\beta\mathcal{H}[\vec{m}]},$$
 (4)

onde λ fornece a discretização do espaço (d -dimensional), $x_i^{(\alpha)} - x_{i-1}^{(\alpha)} = \lambda$, perfazendo um total de N pontos. Em cada um desses pontos nós definimos a variável $\vec{m}_i = \vec{m}(\vec{x})$. Ou seja, é como se voltássemos atrás no processo de granulação grosseira, só que com uma constante de rede bem maior ($\lambda \gg a$). Derivadas e gradientes são definidos como

$$\frac{\partial m_i^{(\alpha)}}{\partial x^{(\beta)}} = m_{i+1}^{(\alpha)} - m_i^{(\alpha)},$$

com i correndo ao longo da direção de β .

Uma vez estabelecido \mathcal{Z} , \mathcal{H} , \vec{m} , etc., podemos passar à prática. Porém, é óbvio que mesmo depois da discretização, a integral funcional ainda representa um obstáculo formidável. Só existe um único tipo calculável exatamente – a gaussiana. O que fazer nos outros casos? Novamente temos que lançar mão de métodos aproximados. A vantagem deles em relação à abordagem variacional é que a integral funcional representa um melhor ponto de partida para expansões sistemáticas em que é possível melhorar muito o conhecimento da quantitativo da física de fenômenos críticos.

6.1 Aproximação de ponto de sela – campo médio

Por uma questão de convergência, é claro que ao truncar a expansão mostrada na Eq. (2), devemos supor $u > 0$. Deve então existir uma certa configuração $\vec{m}_0(\vec{x})$ que minimize o

valor de $\beta\mathcal{H}[\vec{m}]$ e portanto maximize o integrando $\exp\{-\beta\mathcal{H}[\vec{m}]\}$. Uma aproximação usual é simplesmente substituir a integral pelo valor máximo do integrando,

$$\mathcal{Z} \approx e^{-\beta\mathcal{H}[\vec{m}_0]}. \quad (5)$$

(Deve haver ainda uma constante de proporcionalidade relativa ao volume do espaço de configurações, mas que pode ser ignorada quando estamos interessados na termodinâmica do sistema.) Por hora nós não tentaremos justificar essa aproximação. Vamos inicialmente explorar as suas consequências.

Em primeiro lugar, como $K > 0$ em geral (é energeticamente custoso modular espacialmente o parâmetro de ordem), vamos assumir que a configuração $\vec{m}_0(\vec{x})$ é uniforme,

$$\vec{m}_0(\vec{x}) = \vec{m}_0.$$

Como $\beta F = -\ln \mathcal{Z}$, nós temos que

$$\frac{\beta F}{L^d} = \min \{\Phi(\vec{m}_0)\} = \min \left\{ \frac{t}{2} m_0^2 + u m_0^4 - \vec{h} \cdot \vec{m}_0 \right\}, \quad (6)$$

onde L^d é o volume total do sistema. Obviamente, o aspecto da função $\Phi(\vec{m}_0)$ depende fortemente do sinal de t , como mostra a Fig. 17 para o caso em que $\vec{h} = 0$.

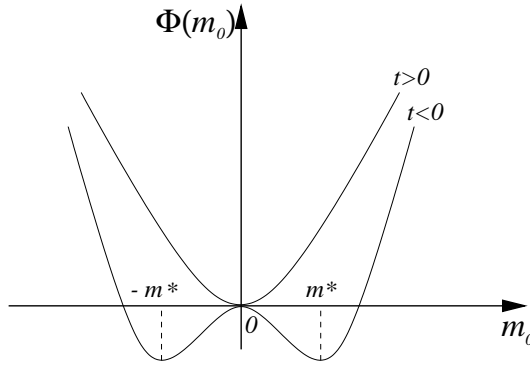


Figure 17: Funcional de energia na aproximação de campo médio.

Vamos analisar cada caso separadamente.

1. $\underline{t \geq 0}$: há somente um ponto de mínimo. Na ausência de campo externo ($\vec{h} = 0$), esse mínimo ocorre em $\vec{m}_0 = 0$. Note que a condição de mínimo,

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \vec{m}_0} = 0 \longrightarrow (t + 4u m_0^2) \vec{m}_0 = \vec{h}, \quad (7)$$

implica que, na presença de um campo externo, o mínimo é deslocado para a direção e sentido de \vec{h} : para campos suficientemente fracos, acha-se que $\vec{m}_0 \approx \vec{h}/t$. Fazendo uma analogia com o sistema magnético, a “magnetização” (ordenamento) do sistema é proporcional ao campo externo. Cessando \vec{h} , cessa também \vec{m} . Esse é o comportamento paramagnético. Note que função-resposta,

$$\chi = \frac{\partial m_0}{\partial h} \approx \frac{1}{t}. \quad (8)$$

Quando $t \rightarrow 0^+$, há uma divergência.

2. $t < 0$: na ausência de campo externo há degenerescência no ponto de mínimo. Ou seja, há um contínuo (caso $n > 1$) de mínimos, ou então pelo menos dois deles (caso $n = 1$),

$$|\vec{m}_0|^2 = -\frac{t}{4u}. \quad (9)$$

O ponto $\vec{m} = 0$ torna-se um máximo local (configuração instável). Esse é o comportamento análogo ao do ferromagnético, onde ocorre polarização espontânea. Na presença do campo \vec{h} , a degenerescência entre os pontos de mínimo é quebrada. Passa a prevalecer aquele ponto cuja direção de \vec{m} está orientada paralela a \vec{h} . Quando o campo externo é suficientemente fraco, obtém-se que

$$m_0^2 \approx -\frac{t}{4u} + \sqrt{\frac{4u}{-t}}h. \quad (10)$$

No caso $n = 1$ – parâmetro de ordem com uma só componente, nós poderíamos desenhar um diagrama de fase como mostrado na Fig 18.

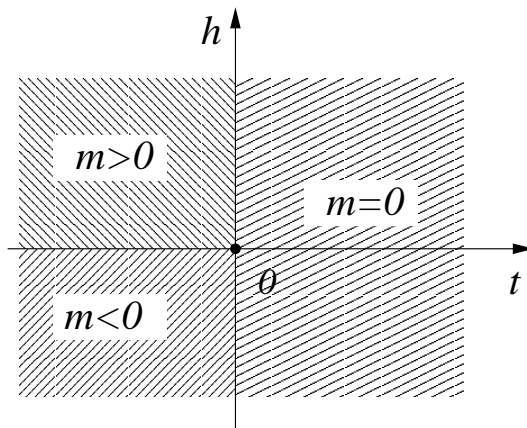


Figure 18: Diagrama de fase na aproximação de campo médio quando $n = 1$.

Fica claro então que, em analogia ao caso dos magnetos, o parâmetro t pode ser identificado com uma espécie de temperatura reduzida do sistema,

$$t \sim \frac{T - T_c}{T_c}, \quad (11)$$

onde T_c é a temperatura de transição característica do sistema (e sobre a qual nada podemos dizer). O parâmetro u , por sua vez, ser aproximadamente constante (independente da temperatura) próximo à transição ,

$$u \approx \text{const.} + O(T - T_c). \quad (12)$$

Os fatores de proporcionalidade e as constante numéricas embutidas nas Eqs. (11) e (12) dependem de detalhes do sistema que foram perdidos depois do procedimento de granulação grosseira. Certamente t e u podem ser expandidos sistematicamente em termos de $(T - T_c)/T_c$. Contudo, próximo à transição , os termos de mais baixa ordem são dominantes. Tendo isso em conta, nós obtemos as seguintes propriedades para a energia livre de Landau-Ginzburg na aproximação de campo médio:

1. *Magnetização espontânea* ($\vec{h} = 0$).

$$|\vec{m}_0| \sim \begin{cases} |t|^{1/2}, & T < T_c, \\ 0, & T > T_c. \end{cases} \quad (13)$$

Portanto $\beta = 1/2$.

2. *Capacidade térmica* ($\vec{h} = 0$).

$$\beta F = L^d \min \{ \Phi(m) \} = \begin{cases} -t^2/16u, & T < T_c, \\ 0, & T > T_c. \end{cases} \quad (14)$$

Assim,

$$C = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right) = -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left(\frac{\beta F}{L^d} \right) = \begin{cases} 1/8u, & T < T_c, \\ 0, & T > T_c. \end{cases} \quad (15)$$

Não há divergência e podemos dizer que $\alpha = 0$.

3. *Susceptibilidade linear* ($n = 1$).

$$\chi = \left(\frac{\partial m_0}{\partial h} \right)_{h=0} = \frac{1}{t + 12um_0^2} = \begin{cases} 1/2t, & T < T_c, \\ 1/t, & T > T_c. \end{cases} \quad (16)$$

Os expoentes $\gamma^+ = \gamma^- = 1$, mas $A_+/A_- = 1/2$, independentemente de constantes do material.

4. *Equação de estado isotérmica a $T = T_c$* ($n = 1$).

$$m_0 \approx \left(\frac{h}{4u} \right)^{1/3} \quad (17)$$

e, portanto, $\delta = 3$.

Os expoentes críticos acima coincidem com aqueles obtidos pelo método variacional para o modelo de Ising. Eles independem das propriedades específicas do material e até mesmo da dimensionalidade do espaço e da natureza do parâmetro de ordem. Apesar disso ir de encontro às nossas pretensões, neste caso a independência é exagerada! Na prática, sistemas com diferentes d e n , principalmente, têm valores de α , β , γ e δ distintos. A aproximação de campo médio feita sobre o ponto de sela da função de partição, de um modo geral, falha em capturar essas diferenças.

Nas próximas aulas nós vamos tentar estabelecer qual o problema da aproximação de campo médio e como melhorá-la.

7 Quebra espontânea de simetria, flutuações transversais e modos de Goldstone

Um dos aspectos mais importantes da teoria de Landau-Ginzburg é a descrição de certas transições de fase como fenômenos de quebra espontânea de simetria. Nós já havíamos visto algo semelhante com o modelo de Ising através da aproximação variacional. Vamos tentar elaborar um pouco mais esse conceito.

A idéia é simples. Se a hamiltoniana do sistema possui alguma simetria (por exemplo, invariância por rotações),

$$\mathcal{H} [\hat{R} \vec{m}] = \mathcal{H} [\vec{m}], \quad (1)$$

o sistema pode assumir uma configuração ou estado em que essa propriedade não é necessariamente respeitada, mesmo na ausência de campos externos. Por exemplo, o estado fundamental do sistema pode adquirir uma orientação preferencial e não ser invariante perante a transformação \hat{R} . Em geral essa quebra espontânea de simetria ocorre abaixo de uma certa temperatura crítica. Nós vimos que, no caso dos ferromagnetos, eles passam a se orientar predominantemente ao longo de uma certa direção arbitrária quando a temperatura está abaixo do ponto de Curie.

Esse fenômeno tem um papel fundamental na física de sistemas condensados. Aplica-se tanto a sistemas magnéticos quanto a cosmogênese (dentro dos modelos cosmológicos atuais). Ocorre também em processos de cristalização (transição líquido-sólido), onde a formação de uma rede e o posicionamento quase fixo dos íons viola a invariância de translação presente na interação eletromagnética. Quebras espontâneas de simetria estão presentes também na supercondutividade e na superfluidez. Obviamente ela não é relevante em transições do tipo líquido-gás, onde nenhuma simetria fundamental das interações entre as partículas é quebrada. Popularmente, quebras espontâneas de simetria são associadas a transições de fase de segunda ordem. Isso porém não é sempre verdade, como mostra o exemplo da cristalização. Existem casos em que a quebra espontânea de simetria é extremamente sutil e exige um grande grau de abstração, como nos casos dos sistemas vítreos.

Sempre que houver esse tipo de transição, é necessário identificar e introduzir um certo parâmetro de ordem na descrição quantitativa do sistema. Na fase dita desordenada, geralmente a alta temperatura, o sistema se encontra num estado onde globalmente preserva a simetria fundamental da hamiltoniana. Portanto, nessa fase o parâmetro de ordem é nulo. Já na fase ordenada, a baixa temperatura, a existência de um parâmetro de ordem não nulo sinaliza a quebra de simetria.

7.1 Flutuações transversais

No caso do modelo de Ising, a simetria da hamiltoniana é discreta, do tipo Z_2 : há invariância global quando o sinal de todos os momentos magnéticos ou spins são reversos. Em sua fase ordenada, o parâmetro de ordem assume somente um dos dois valores possíveis, ± 1 . Apesar de haver essa degenerescência, qualquer processo para tentar ir da solução positiva para a negativa é extremamente custoso: teríamos que ir revertendo localmente spin por spin, criando assim excitações. Não há qualquer possibilidade ligar as duas orientações possíveis do parâmetro de ordem de forma suave e contínua.

Em sistemas onde há simetrias contínuas, como no modelo de Heisenberg, nós podemos implementar um conexão contínua entre as infinitas possíveis orientações do parâmetro de

ordem na fase ordenada. Ou seja, como transformações uniformes (globais) do tipo

$$\vec{m} \rightarrow \hat{R} \vec{m} \quad (2)$$

não custam energia (eles somente conectam estados degenerados), nós podemos imaginar que transformações não-uniformes (locais), mas de variação espacial extremamente suave,

$$\vec{m}(\vec{x}) \rightarrow \hat{R}(\vec{x}) \vec{m}(\vec{x}) \quad (3)$$

devem custar pouquíssima energia. Claro que esse segundo tipo de transformação gera excitações no sistema. Porém, quanto mais suave for a modulação em $\hat{R}(\vec{x})$, (ou seja, maior o comprimento de onda envolvido), tanto menor será a energia dessas excitações. No caso do modelo de Heisenberg, ela pode ser algo como mostrado na Fig. 19

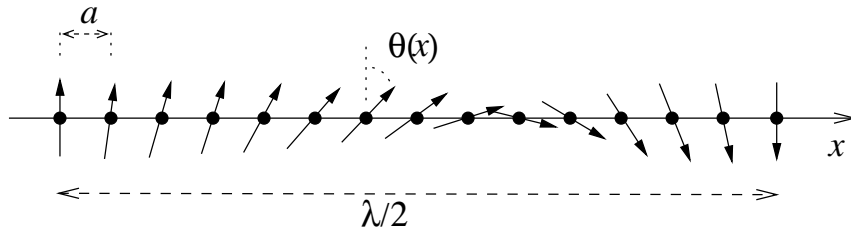


Figure 19: Flutuação transversal com comprimento de onda longo ($\lambda \gg a$).

O ângulo de desvio $\theta(x)$ em relação à uma certa direção de referência varia apreciavelmente somente sobre escalas de comprimento $\lambda \gg a$, onde a é a constante de rede do sistema. Em sistemas magnéticos, excitações desse tipo são chamadas de magnons.⁷ Outro exemplo importante de flutuações do parâmetro de ordem são os fônons. Eles correspondem a suaves modulações no espaçamento dos ions de uma rede cristalina (ou seja, na ordem estabelecida pela quebra se simetria de translação).

A essas flutuações do parâmetro de ordem se dá o nome de modos de Goldstone. Eles são essenciais no entendimento de fenômenos críticos. Vamos ilustrar esse fato com um exemplo bastante simples e que cobre dois tipos comuns de sistemas com parâmetros de ordem bidimensional ($n = 2$), como modelos XY e superfluidos. O parâmetro de ordem pode ser representado como um campo complexo

$$\psi(\vec{x}) = m_1(\vec{x}) + i m_2(\vec{x}) = |\psi(\vec{x})| e^{i\theta(\vec{x})}. \quad (4)$$

Seguindo o procedimento discutido anteriormente, a hamiltoniana do sistema não depende explicitamente da fase $\theta(\vec{x})$ na ausência de acoplamento entre ψ e campos externos,

$$\beta\mathcal{H} = \int d^d x \left[\frac{K}{2} |\nabla\psi|^2 + \frac{t}{2} |\psi|^2 + u|\psi|^4 + \dots \right]. \quad (5)$$

Vamos inicialmente analisar os resultados da aproximação de campo médio (ψ uniforme). Para $t < 0$ há quebra espontânea de simetria e o parâmetro de ordem deixa de ser nulo,

$$|\psi_0| = \bar{\psi} = \sqrt{\frac{-t}{4u}}. \quad (6)$$

⁷Este é um exemplo bastante simples!

No entanto, a sua fase é indeterminada,

$$\psi_0 = \bar{\psi} e^{i\theta_0}, \quad (7)$$

com $\theta \in [0; 2\pi)$. Podemos representar graficamente a energia livre do sistema em termos das componentes do parâmetro de ordem na forma mostrada na Fig. 20, semelhante a um chapéu mexicano, ou ainda, o fundo de uma garrafa de vinho.

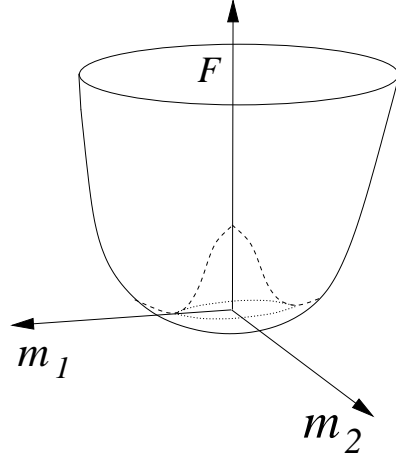


Figure 20: Energia livre na aproximação de campo médio quando $t < 0$ e $n = 2$.

Há uma simetria cilíndrica em $F(\psi_0)$. Ela é quebrada quando escolhemos um determinado valor de θ_0 (o que corresponde a fixar uma direção no espaço $m_1 \times m_2$). Essa degenerescência em θ é um reflexo de uma simetria mais fundamental da própria hamiltoniana microscópica do sistema e ocorre, na prática, porque o funcional da Eq. (5) é invariante a rotações *globais* de fase:

$$\mathcal{H} [|\psi(\vec{x})| e^{i\theta(\vec{x})+i\eta}] = \mathcal{H} [|\psi(\vec{x})| e^{i\theta(\vec{x})}] \quad (8)$$

para qualquer constante η .

Neste sistema, os modos de Goldstone serão modulações locais da fase θ . Nós podemos então escrever que

$$\psi_G(\vec{x}) = \bar{\psi} e^{i\theta(\vec{x})}. \quad (9)$$

(Vamos considerar somente modulações na fase, muito menos custosas energeticamente do que modulações na amplitude do parâmetro de ordem.) Assim,

$$|\psi(\vec{x})| = \bar{\psi}^2 \quad \text{e} \quad |\nabla\psi(\vec{x})|^2 = \bar{\psi}^2 (\nabla\theta)^2. \quad (10)$$

Em termos desses modos, a hamiltoniana efetiva, próxima ao ponto de mínimo relativo à solução de campo médio passa a ser

$$\beta\mathcal{H} = \beta\mathcal{H}_0 + \frac{K\bar{\psi}^2}{2} \int d^d x [\nabla\theta(\vec{x})]^2, \quad (11)$$

onde

$$\beta\mathcal{H}_0 = L^d \left(\frac{t}{2} \bar{\psi}^2 + u \bar{\psi}^4 \right). \quad (12)$$

Passando para o espaço de momentos (Fourier),

$$\theta(\vec{x}) = \frac{1}{L^d} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \tilde{\theta}(\vec{q}), \quad \tilde{\theta}(\vec{q}) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \theta(\vec{x}), \quad (13)$$

nós obtemos

$$\beta\mathcal{H} = \beta\mathcal{H}_0 + \frac{\bar{K}}{2} \sum_{\vec{q}} q^2 |\tilde{\theta}(\vec{q})|^2, \quad (14)$$

com $\bar{K} = K\bar{\psi}^2/L^d$. Note a similaridade desta hamiltoniana com aquela utilizada para o problema de granulação grosseira dos fônons há algumas aulas atrás. Para cada \vec{q} existe um modo independente. A energia de cada modo,

$$\omega(\vec{q}) = v |\vec{q}| \quad (15)$$

é tão menor quanto maior for o comprimento de onda associada (menor $|\vec{q}|$.) Obviamente, os modos aparecem desacoplados devido à aproximação quadrática na expansão em potências de $\nabla\theta$ desenvolvida na Eq. (11). Contudo, é interessante calcular a função de correlação associada a eles. Como a função de distribuição é fatorável e gaussiana,

$$P[\tilde{\theta}(\vec{q})] \sim e^{-\frac{\bar{K}}{2} \sum_{\vec{q}} q^2 |\tilde{\theta}(\vec{q})|^2} = \prod_{\vec{q}} e^{-\frac{\bar{K}}{2} q^2 |\tilde{\theta}(\vec{q})|^2}, \quad (16)$$

o cálculo é relativamente simples:

$$\langle \tilde{\theta}(\vec{q}) \tilde{\theta}(\vec{q}') \rangle = \frac{\delta_{\vec{q}, -\vec{q}'}}{\bar{K} q^2}, \quad (17)$$

portanto

$$\begin{aligned} \langle \theta(\vec{x}) \theta(\vec{x}') \rangle &= \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'} e^{i(\vec{q}\cdot\vec{x} + \vec{q}'\cdot\vec{x}')} \langle \tilde{\theta}(\vec{q}) \tilde{\theta}(\vec{q}') \rangle = \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\vec{q}} \frac{e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}}{\bar{K} q^2} \rightarrow \frac{1}{\bar{K} L^d} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}}{q^2} \\ &= -\frac{1}{\bar{K} L^d} C(\vec{x} - \vec{x}'), \end{aligned} \quad (18)$$

A função de correlação $C(\vec{x})$ satisfaz à equação de Poisson de uma carga puntiforme,

$$\nabla^2 C(\vec{x}) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} = \delta^{(d)}(\vec{x}), \quad (19)$$

e, portanto, podemos usar o teorema de Gauss para obtê-la:

$$\int_{\text{esfera}} d^d x \nabla^2 C(\vec{x}) = \int_{\text{superfície}} d\vec{S} \cdot \nabla C(\vec{x}) = x^{d-1} S_d \left(\frac{dC}{dx} \right), \quad (20)$$

sendo x o raio da esfera (em d dimensões) e $S_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$. Assim, chegamos à equação

$$x^{d-1} S_d \left(\frac{dC}{dx} \right) = 1, \quad (21)$$

cuja solução é (só depende de $x = |vecx|$)

$$C(x) = C_0 + C_1 \frac{x^{2-d}}{2-d}, \quad (22)$$

onde C_0 e C_1 são constantes. No limite de grandes distâncias, algo muito interessante ocorre com essa função de correlação : a menos de uma constante multiplicativa,

$$C(x) \longrightarrow \begin{cases} \text{const.}, & (d > 2), \\ \ln(x), & (d = 2), \\ \frac{x^{2-d}}{2-d}, & (d < 2) \end{cases} . \quad (23)$$

Para $d > 2$ a função de correlação decai até saturar em um certo valor finito. Nesse caso as flutuações espaciais do parâmetro de ordem existem, mas tem um certo alcance finito. Algo diferente acontece quando $d \leq 2$: a correlação entre as flutuações do parâmetro de ordem *crecem* com o aumento da distância! Isso indica que não há manutenção da ordem em larga escala no sistema. Os modos de Goldstone em sistemas de baixa dimensionalidade destroem a ordem de longo alcance da solução sugerida pela aproximação de campo médio.

Esse resultado é geral, e vale também quando $n > 2$. É conhecido como teorema de Mermin-Wagner e pode ser enunciado da seguinte maneira:

Para sistemas com interações de curto alcance e com quebra de simetria contínua, não existe ordem de longo alcance em $d \leq 2$.

Por exemplo, não é possível cristalização em duas dimensões à temperatura finita. Cristais ditos bidimensionais (grafite, por exemplo), requerem algum tipo de acoplamento em camadas, mesmo que tenue, para existirem.

A dimensão 2 tem então o papel de divisor de águas entre os sistemas que podem e os que não podem apresentar ordenamento a grandes distâncias. É usualmente chamada de dimensão crítica inferior.

Not que sistemas onde o parâmetro de ordem tem $n = 1$ ou onde há simetrias discretas (como no caso do modelo de Ising), estão fora da restrição imposta pelo teorema de Mermin-Wagner. Esses sistemas não têm modos de Goldstone. Neles pode ocorrer ordenamento de longo alcance mesmo quando $d = 2$. Para eles a dimensão crítica inferior é 1, como veremos mais tarde. Por exemplo, o modelo de Ising bidimensional apresenta uma transição de fase ordem/desordem à temperatura finita.

Fica claro então, pelo menos para sistemas de baixa dimensionalidade, porque a teoria de Landau-Ginzburg na aproximação de campo médio não fornece expoentes críticos compatíveis com os valores experimentais. Os modos de Goldstone, fundamentais na redução ou eventual destruição da ordem de longo alcance, são ignorados na aproximação de campo médio.

8 Flutuações: correções à aproximação de campo médio

Vamos voltar ao exemplo dos magnetos e estudar como flutuações, correlações e susceptibilidades estão relacionadas. Seja a distribuição de probabilidade de uma certa configuração do parâmetro de ordem $\vec{m}(\vec{x})$,

$$P[\vec{m}] = \frac{1}{Z} \exp \left\{ - \int d^d x \left[\frac{K}{2} (\nabla \vec{m})^2 + \frac{t}{2} m^2 + u m^4 \right] \right\}. \quad (1)$$

Da solução de campo médio na aproximação de ponto de sela nós temos que

$$\vec{m}(\vec{x}) = \bar{m} \hat{e}_1, \quad \text{com} \quad \bar{m} = \begin{cases} 0, & t > 0, \\ \sqrt{-t/4u}, & t < 0, \end{cases} \quad (2)$$

onde \hat{e}_1 é um versor na direção da quebra espontânea de simetria. Vamos agora permitir que sobre o campo médio \bar{m} atuem flutuações, tanto longitudinais (ao longo da direção de \hat{e}_1), quanto transversais (perpendiculares a \hat{e}_1):

$$\vec{m}(\vec{x}) = [\bar{m} + \phi_l(\vec{x})] \hat{e}_1 + \sum_{\alpha=2}^n \phi_t^\alpha(\vec{x}) \hat{e}_\alpha. \quad (3)$$

Localmente essas flutuações são de pequena amplitude ($\phi_l, \phi_t^\alpha \ll \bar{m}$). Portanto, nós podemos expandir a hamiltoniana efetiva em ordem quadrática:

$$(\nabla \vec{m})^2 = (\nabla \phi_l)^2 + \sum_{\alpha=2}^n (\nabla \phi_t^\alpha)^2 \quad (4)$$

$$m^2 = \bar{m}^2 + 2\bar{m}\phi_l + \phi_l^2 + \sum_{\alpha=2}^n \phi_t^{\alpha 2} \quad (5)$$

$$m^4 = \bar{m}^4 + 4\bar{m}^3\phi_l + 6\bar{m}^2\phi_l^2 + 2\bar{m} \sum_{\alpha=2}^n \phi_t^{\alpha 2} + O(\phi^3, \phi^4). \quad (6)$$

Juntando tudo, nós temos que (note que há um cancelamento entre os termos lineares em ϕ_l)

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H} = & L^d \left(\frac{t}{2} \bar{m}^2 + u \bar{m}^4 \right) + \int d^d x \left\{ \left[\frac{K}{2} (\nabla \phi_l)^2 + \left(\frac{t}{2} + 6u \bar{m}^2 \right) \phi_l^2 \right] \right. \\ & \left. + \frac{K}{2} \sum_{\alpha=2}^n \left[(\nabla \phi_t^\alpha)^2 + \left(\frac{t}{2} + 2u \bar{m}^2 \right) \phi_t^{\alpha 2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Para facilitar o desenvolvimento dos cálculos, nós podemos renomear algumas constantes:

$$\frac{K}{\xi_l^2} = t + 12u \bar{m}^2 \quad \text{e} \quad \frac{K}{\xi_t^2} = t + 4u \bar{m}^2, \quad (8)$$

onde ξ_l e ξ_t têm dimensão de comprimento. A distribuição de probabilidade das configurações de flutuações passa a ser dada por

$$P[\phi_l, \phi_t^\alpha] \sim e^{- \int d^d x \left\{ \frac{K}{2} [(\nabla \phi_l)^2 + \phi_l^2 / \xi_l^2] + \frac{K}{2} \sum_{\alpha=2}^n [(\nabla \phi_t^\alpha)^2 + \phi_t^{\alpha 2} / \xi_t^2] \right\}}. \quad (9)$$

Passando para a representação no espaço de Fourier, nós temos que

$$P[\phi_l, \phi_t^\alpha] \sim \exp \left\{ -\frac{K}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[(q^2 + \xi_l^{-2}) |\tilde{\phi}_l(\vec{q})|^2 + (q^2 + \xi_t^{-2}) \sum_{\alpha=2}^n |\tilde{\phi}_t^\alpha(\vec{q})|^2 \right] \right\}. \quad (10)$$

Na aproximação quadrática, os modos são independentes entre si e obedecem a distribuições gaussianas. Então, não é difícil concluir que

$$\langle \tilde{\phi}_l(\vec{q}) \rangle = \langle \tilde{\phi}_t^\alpha(\vec{q}) \rangle = 0, \quad (11)$$

$$\langle \tilde{\phi}_l(\vec{q}) \tilde{\phi}_l(\vec{q}') \rangle = \frac{(2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}')}{\sqrt{K}(q^2 + \xi_l^{-2})}, \quad (12)$$

$$\langle \tilde{\phi}_t^\alpha(\vec{q}) \tilde{\phi}_t^\beta(\vec{q}') \rangle = \frac{\delta_{\alpha\beta} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}')}{\sqrt{K}(q^2 + \xi_t^{-2})}, \quad (13)$$

e

$$\langle \tilde{\phi}_l(\vec{q}) \tilde{\phi}_t^\alpha(\vec{q}') \rangle = 0. \quad (14)$$

As constantes ξ_l e ξ_t são comprimentos de correlação. Isso pode ser mais facilmente visualizado se calcularmos os correlatores das flutuações no espaço real:

$$\begin{aligned} C(\vec{x} - \vec{x}') &= \langle [\vec{m}(\vec{x}) - \bar{m}\hat{e}_1] \cdot [\vec{m}(\vec{x}') - \bar{m}\hat{e}_1] \rangle \\ &= \langle \phi_l(\vec{x}) \phi_l(\vec{x}') \rangle - \sum_{\alpha=2}^n \langle \phi_t^\alpha(\vec{x}) \phi_t^\alpha(\vec{x}') \rangle \\ &= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} e^{i(\vec{q}\cdot\vec{x} + \vec{q}'\cdot\vec{x}')} \left[\langle \tilde{\phi}_l(\vec{q}) \tilde{\phi}_l(\vec{q}') \rangle - \sum_{\alpha=2}^n \langle \tilde{\phi}_t^\alpha(\vec{q}) \tilde{\phi}_t^\alpha(\vec{q}') \rangle \right] \\ &= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x} - \vec{x}')} \left[\frac{1}{K(q^2 + \xi_l^{-2})} + \frac{n-1}{K(q^2 + \xi_t^{-2})} \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Para seguir adiante, nós precisamos calcular integrais do tipo

$$I(\vec{x}) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{q^2 + \xi^{-2}}. \quad (16)$$

Note porém que $I(\vec{x})$ satisfaz à seguinte equação diferencial,

$$\nabla^2 I + (d-1) \frac{\vec{x}}{x^2} \cdot \nabla I - \frac{1}{\xi^2} I = \delta^{(d)}(\vec{x}). \quad (17)$$

Assumindo simetria esférica, $I = I(x)$, ela se reduz a

$$\frac{d^2 I}{dx^2} + \frac{(d-1)}{x} \frac{dI}{dx} - \frac{1}{\xi^2} I = 0, \quad (x > 0). \quad (18)$$

É fácil verificar que uma função do tipo $I(x) \sim e^{-x/\xi}/x^p$ satisfaz essa equação, desde que

$$p = \begin{cases} d-2, & x \ll \xi, \\ (d-1)/2, & x \gg \xi. \end{cases} \quad (19)$$

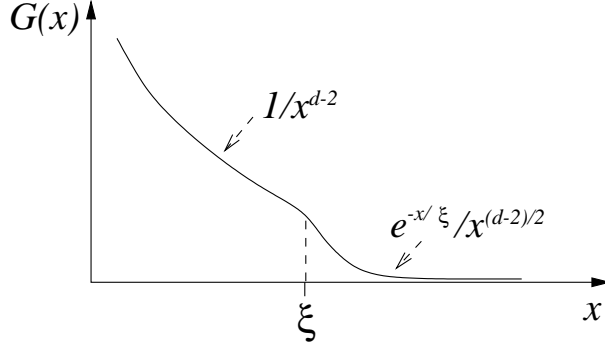


Figure 21: Função de correlação associada a flutuações .

Portanto, separando a função de correlação em partes trasnversal e longitudinal, nós observamos que cada uma delas tem um aspecto semelhante ao da Fig. 21.

A curtas distâncias ($x \ll \xi$), o decaimento é do tipo lei de potência (algébrico) e o expoente é $d - 2$. A grandes distâncias ($x \gg \xi$), as correlações decaem exponencialmente (muito rapidamente). Ou seja, ξ mede o alcance das flutuações dentro do sistema. Vale lembrar que os comprimentos de correlação dependem de que lado estamos em relação ao ponto crítico, divergindo em $t = 0$:

$$\xi_t = \begin{cases} 1/\sqrt{tK}, & t > 0, \\ 1/\sqrt{-2tK}, & t < 0 \end{cases} \quad (20)$$

e

$$\xi_t = \begin{cases} 1/\sqrt{tK}, & t > 0, \\ \infty, & t < 0. \end{cases} \quad (21)$$

Fisicamente, ξ nos fornece uma estimativa sobre a distância sobre a qual flutuações do parâmetro de ordem são correlacionadas. No ponto de transição essas correlações se estendem por todo o sistema e $\xi \rightarrow \infty$. Na fase desordenada (alta temperatura), os comprimentos de correlação vai diminuindo com o aumento da temperatura. Na fase ordenada, ξ_l diminui quando nos distanciamos da transição, mas o mesmo não ocorre com ξ_t . O fato de ξ_l e ξ_t diferirem tão marcadamente na fase ordenada tem o seguinte significado. Se por um lado torna-se cada vez mais difícil excitar flutuações longitudinais (mesmo que tenham grandes comprimentos de onda) a baixas temperaturas, o mesmo não ocorre com as flutuações transversais. Isso porque os modos longitudinais são *massivos*, i.e., têm um mínimo de energia que está ligado à concavidade da “aba” do potencial $\Phi(\vec{m})$ (veja Fig. 20), como num oscilador harmônico. Já os modos transversais correm envolta da parte de energia interna da “aba” do potencial (modos de Goldstone); eles não têm “massa”, e podem ter energia arbitrariamente pequena, sendo então facilmente excitáveis.

Relembrando a relação entre susceptibilidade (ou função resposta linear) e flutuações,

$$\chi \sim \int d^d x \langle \vec{m}(\vec{x}) \cdot \vec{m}(0) \rangle_c, \quad (22)$$

nós obtemos os seguintes resultados:

$$\chi_l \sim \int d^d x \langle \phi_l(\vec{x}) \phi_l(0) \rangle \sim \int_0^{\xi_l} \frac{d^d x}{x^{d-2}} + \int_{\xi_l}^{\infty} \frac{d^d x e^{-x/\xi_l}}{x^{(d-1)/2}}$$

$$\sim \xi_t^2 + O(\xi_t^{1/2}) \sim \begin{cases} 1/t, & t > 0, \\ -1/2t, & t < -0. \end{cases} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \chi_l &\sim (n-1) \int d^d x \langle \phi_t^\alpha(\vec{x}) \phi_t^\alpha(0) \rangle \\ &\sim \begin{cases} 1/t, & t > 0, \\ L^2, & t < -0. \end{cases} \end{aligned} \quad (24)$$

Ou seja, a divergência a baixas temperaturas em ξ_t faz com que a susceptibilidade escale com o quadrado do tamanho linear do sistema. Este último resultado corrobora a nossa observação de que o sistema é extremamente sensível a perturbações transversais a baixas temperaturas devido à proliferação de modos de Goldstone.

8.1 Comparação entre resultados da aproximação de campo médio e dados experimentais

No capítulo anterior nós determinamos todos os expoentes críticos mais relevantes dentro da aproximação de campo médio. Segue abaixo uma tabela com esses resultados e alguns dados experimentais de transições de fase críticas bem conhecidas.

Transição	Material	α	β	γ	ν
ferromagnetismo ($n = 3$)	Fe, Ni	-0.1	0.4	1.3	—
superfluidez ($n = 2$)	He ⁴	0	0.3	1.3	0.7
gás-líquido ($n = 1$)	CO ₂ , Xe	0.1	0.3	1.2	0.7
ferroelétricos ($n = 3$)	PbTiO ₃	0	0.5	1	0.5
supercondutores ($n = 2$)	Al, Pb, Nb	0	0.5	1	0.5
campo médio		0	0.5	1	0.5

Note como os expoentes da solução de campo médio não estão perfeitamente de acordo com os valores experimentais, salvo os casos dos ferroelétricos e supercondutores. Uma tabela mais extensa sugere que, na realidade, os expoentes tendem a se agrupar em classes, de acordo com n e d , por exemplo. Nesse sentido, a aproximação de campo médio para o ponto de sela leva a resultados excessivamente universais. Além disso, nem sequer faz sentido falar em ordem abaixo da dimensão crítica inferior.

Sem abandonar as hipóteses básicas que nos levaram a construir a hamiltoniana efetiva de Landau-Ginzburg, vamos tentar melhorar a aproximação de ponto de sela e a solução de campo médio incorporando flutuações ao cálculo da energia livre.

Num primeiro momento, vamos analisar as consequências da inclusão das flutuações gaussianas no cálculo de quantidades físicas. Em seguida, estabeleceremos um critério de validade para a teoria de Landau-Ginzburg na aproximação de campo médio (ficará então claro porque ela aparentemente funciona para supercondutores, por exemplo).

8.2 Correções à aproximação de campo médio.

Vamos primeiramente lembrar o resultado, bastante conhecido para funções de uma variável, chamado de aproximação de Laplace (é o precursor da aproximação de ponto de sela),

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-N f(x)} \approx \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-N[f(x_0)+f''(x_0)(x-x_0)^2/2]} = e^{-N f(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{N f''(x_0)}}, \quad (25)$$

onde $N \gg 1$, $f'(x_0) = 0$ e, supostamente, $f''(x_0) > 0$; x_0 portanto é o ponto de mínimo global de $f(x)$. Nós podemos então proceder de forma análoga para o caso da função de partição de Landau-Ginzburg inserindo as flutuações quadráticas no parâmetro de ordem, indo além da solução (uniforme) de campo médio (nesse caso, que faz o papel de N é o volume do sistema, L^d):

$$\begin{aligned} Z &= e^{-L^d(\frac{t}{2}\bar{m}^2+u\bar{m}^4)} \int \mathcal{D}\phi_l(\vec{x}) \mathcal{D}\phi_t^\alpha(\vec{x}) \exp \left\{ -\frac{K}{2} \int d^d x [(\nabla\phi_l)^2 + \phi_l^2/\xi_l^2] \right. \\ &\quad \left. -\frac{K}{2} \int d^d x \left[\sum_{\alpha=2}^n (\nabla\phi_t^\alpha)^2 + \phi_t^{\alpha 2}/\xi_t^2 \right] \right\} \\ &= Z_0 \int \mathcal{D}\phi_l(\vec{x}) e^{-\frac{K}{2} \int d^d x [(\nabla\phi_l)^2 + \phi_l^2/\xi_l^2]} \prod_{\alpha=2}^n \int \mathcal{D}\phi_t^\alpha(\vec{x}) e^{-\frac{K}{2} \int d^d x [(\nabla\phi_t^\alpha)^2 + \phi_t^{\alpha 2}/\xi_t^2]}. \end{aligned} \quad (26)$$

Nós precisamos então calcular as integrais funcionais gaussianas. Como fazê-lo? A técnica usual é a seguinte: primeiro, passamos para a representação de momentos,

$$\begin{aligned} I &= \int \mathcal{D}\phi(\vec{x}) e^{-\frac{K}{2} \int d^d x [(\nabla\phi)^2 + \phi^2/\xi^2]} = \int \mathcal{D}\tilde{\phi}_{\vec{q}} e^{-\frac{K}{2} \sum_{\vec{q}} |\tilde{\phi}_{\vec{q}}|^2 (q^2 + \xi^{-2})} \\ &= \prod_{\vec{q}} \int d\tilde{\phi}_{\vec{q}} e^{-\frac{K}{2} |\tilde{\phi}_{\vec{q}}|^2 (q^2 + \xi^{-2})} \\ &= \prod'_{\vec{q}} \int d\tilde{\phi}_{\vec{q}} d\tilde{\phi}_{\vec{q}}^* e^{-\frac{K}{2} |\tilde{\phi}_{\vec{q}}|^2 (q^2 + \xi^{-2})}. \end{aligned} \quad (27)$$

Como $\phi(\vec{x})$ é real e, portanto, $\tilde{\phi}_{\vec{q}} = \tilde{\phi}_{-\vec{q}}^*$, na última linha da equação acima o produto envolve somente metade dos estados \vec{q} . Nós podemos então fazer uma mudança de variáveis $\tilde{\phi}_{\vec{q}} = \tilde{\phi}_{\vec{q}}^R + i\tilde{\phi}_{\vec{q}}^I$, de modo que $d\tilde{\phi}_{\vec{q}} d\tilde{\phi}_{\vec{q}}^* = 2 d\tilde{\phi}_{\vec{q}}^R d\tilde{\phi}_{\vec{q}}^I$. Assim,

$$\begin{aligned} I &= \prod'_{\vec{q}} 2 \int d\tilde{\phi}_{\vec{q}}^R \int d\tilde{\phi}_{\vec{q}}^I e^{-\frac{K}{2} \tilde{\phi}_{\vec{q}}^R{}^2 (q^2 + \xi^{-2})} e^{-\frac{K}{2} \tilde{\phi}_{\vec{q}}^I{}^2 (q^2 + \xi^{-2})} \\ &= \prod'_{\vec{q}} 2 \left[\frac{2\pi}{K(q^2 + \xi^{-2})} \right] = e^{\sum_{\vec{q}}' \ln[4\pi/K(q^2 + \xi^{-2})]} \\ &= (\text{const.}) \times e^{-\frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \ln[K(q^2 + \xi^{-2})]}. \end{aligned} \quad (28)$$

Portanto, utilizando esse resultado, nós podemos escrever a função de partição na forma

$$Z \sim \exp \left\{ -L^d \left(\frac{t}{2} \bar{m}^2 + u \bar{m}^4 \right) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \left[K \left(q^2 + \frac{1}{\xi_l^2} \right) \right] - \frac{n-1}{2} \sum_{\vec{q}} \left[K \left(q^2 + \frac{1}{\xi_t^2} \right) \right] \right\}, \quad (29)$$

de modo que a energia livre seja igual a (no limite de $L \rightarrow \infty$)

$$\frac{F}{k_B T L^d} = \frac{t}{2} \bar{m}^2 + u \bar{m}^4 + \frac{1}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left\{ \ln \left[K(q^2 + \xi_l^{-2}) \right] + (n-1) \ln \left[K(q^2 + \xi_t^{-2}) \right] \right\}. \quad (30)$$

Agora nós podemos utilizar esse resultado para determinar como as flutuações influenciam o comportamento da capacidade térmica (ou qualquer outra propriedade termodinâmica) próximo à temperatura crítica:

$$C = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right) \approx -k_B T^2 L^d \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left(\frac{F}{k_B T L^d} \right). \quad (31)$$

1. $t > 0$ ($\bar{m} = 0$, $\xi_l = \xi_t = 1/\sqrt{tK}$):

$$\begin{aligned} C &\sim -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left\{ \frac{1}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} [\ln(Kq^2 + t) + (n-1) \ln(Kq^2 + t)] \right\} \\ &\sim \frac{1}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[\frac{1}{(Kq^2 + t)^2} + \frac{n-1}{(Kq^2 + t)^2} \right] \sim \frac{n}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(Kq^2 + t)^2}. \end{aligned} \quad (32)$$

2. $t < 0$ ($\bar{m} = \sqrt{-t/4u}$, $\xi_l = 1/\sqrt{-2tK}$, $\xi_t = \infty$):

$$\begin{aligned} C &\sim -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left\{ -\frac{t^2}{16u} + \frac{1}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} [\ln(Kq^2 - 2t) + (n-1) \ln(Kq^2)] \right\} \\ &\sim \frac{1}{8u} + 2 \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(Kq^2 - 2t)^2}. \end{aligned} \quad (33)$$

Note que os modos transversais não contribuem para a capacidade térmica a baixas temperaturas (modos de Goldstone) porque, ao contrário dos modos longitudinais, não “armazenam” energia.

Antes de prosseguir com o cálculo, vamos para e analisar as Eqs. (32) e (33). Não é difícil verificar que, dimensionalmente, eles devem resultar numa quantidade proporcional a algum comprimento elevado à potência $4 - d$. Qual seria esse comprimento? Só há três escalas no problema: a constante de rede (ou comprimento de granulação grosseira) a , o comprimento de correlação longitudinal ξ_l e o tamanho linear do sistema L . Em ordem: $a \ll \xi_l \ll L$. Portanto, eles devem aparecer como resultado das integrais acima (seja diretamente ou em algum tipo de combinação). Para $d \geq 4$, as integrais divergem em seu limite superior (comprimentos de onda pequenos):

$$\begin{aligned} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + 1/\xi_l^2)^2} &= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^4} \left(1 + \frac{1}{q^2 \xi_l^2} \right)^{-2} = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^4} \left(1 - \frac{1}{q^2 \xi_l^2} + \dots \right) \\ &= \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{a^{4-d}}{(d-4)} \left[1 + O(a^{6-d}/\xi_l^2) \right]. \end{aligned} \quad (34)$$

Segue então que $\Delta C = C_+ - C_- = 1/8u + \frac{S_d}{(2\pi)^d} a^{4-d} d - 4 \frac{(4-n)}{2}$. Neste caso as correções ao resultado de campo médio apenas modificam a altura da discontinuidade, como mostra a Fig. 22.

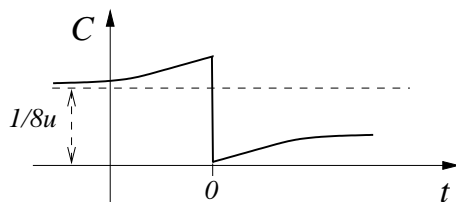


Figure 22: Capacidade térmica no ponto crítico quando $d \geq 4$.

Para $d < 4$, a integral sempre converge; a maior contribuição vem de momentos pequenos (comprimentos de onda grandes):

$$\int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 + 1/x_i^2)^2} = \frac{S_d}{(2\pi)^d} \xi^4 \int_0^\infty \frac{dz z^{d-1}}{(z^2 + 1)^2}. \quad (35)$$

Ou seja, $\Delta C = 1/8u + (\text{const.})|t|^{(d-4)/2}$. Algo bem diferente ocorre neste caso, como mostra a Fig. 23. As flutuações acabam modificando substancialmente o resultado da aproximação de campo médio próximo ao ponto crítico! A correção à capacidade térmica é mais singular do que a própria discontinuidade. Isso indica que o ponto de partida – aproximação de ponto de sela e solução de campo médio – é, neste caso, impróprio. As flutuações, por menor que sejam, modificam os expoentes críticos de forma substancial e não perturbativa. Seria preciso então levá-las em conta de forma mais completa, buscando uma outra abordagem. Chegaríamos às mesmas conclusões se tivéssemos calculado qualquer outra quantidade termodinâmica próxima ao ponto crítico.

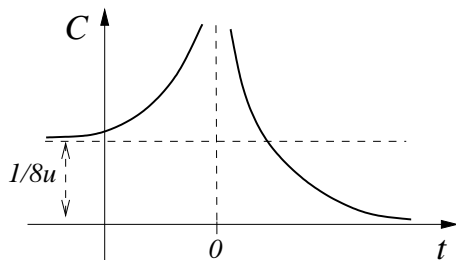


Figure 23: Capacidade térmica no ponto crítico quando $d < 4$.

A dimensão 4 tem um papel importante na teoria de Landau-Ginzburg. Independentemente de n , é chamada de dimensão crítica superior.

8.3 Critério de Ginzburg

A dimensionalidade espacial do sistema delimita fortemente a aplicabilidade da aproximação de ponto de sela e a solução de campo médio da teoria de Landau-Ginzburg. Flutuações são a causa primordial dessa limitação, uma vez que próximo à transição elas ganham enorme importância devido à divergência do comprimento de correlação.

Contudo, há situações, como no caso dos supercondutores, onde a teoria de campo médio parece funcionar relativamente bem em comparação aos dados experimentais (mesmo tendo $d = 3 < 4$). A pergunta que fica então no ar é a seguinte: existe algum critério extra de

aplicabilidade da teoria? Ou ainda: por que as coisas funcionam tão bem em alguns sistemas enquanto que não deveriam?

Para entender onde está o problema, vamos relembrar que a discontinuidade na capacidade térmica no ponto crítico, segundo a teoria de campo médio, segue

$$\Delta C \sim \frac{1}{u}, \quad (36)$$

enquanto que as correções a esse resultado induzida pelas flutuações variam como

$$\delta C \sim \frac{\xi^{4-d}}{K^2}, \quad (37)$$

onde $\xi = \xi(t)$ é o comprimento de correlação, que, por sua vez, varia na forma

$$\xi(t) \sim \sqrt{\frac{K}{|t|}} = \xi_0 |t|^{-1/2}, \quad (38)$$

sendo $\xi_0 = \sqrt{K}$ um comprimento característico do sistema. Assim,

$$\delta C \sim \frac{1}{\xi_0} |t|^{-(4-d)/2}. \quad (39)$$

Para que as correções na capacidade térmica devido às flutuações sejam pequenas quando comparadas à discontinuidade vinda da teoria de campo médio, é preciso que não estejamos muito próximos do ponto de transição:

$$\delta C < \Delta C \longrightarrow \frac{1}{\xi_0} |t|^{-(4-d)/2} < \Delta C. \quad (40)$$

Ou seja, somente para $|t| < t_G$, onde $t_G = (\xi_0^d \Delta C)^{-2/(4-d)}$, é que a divergência (quando $d < 4$) domina sobre a discontinuidade. Este é o chamado critério de Ginzburg de aplicabilidade da teoria de Landau na aproximação de campo médio. Se permanecermos longe do ponto crítico, $|t| \gg t_G$, a influência das flutuações sobre o comportamento da capacidade térmica é muito pequena e pode não ser suficiente para que seja detectada experimentalmente. Nesse caso, a teoria de campo médio pareceria válida. Por outro lado, como ξ_0 em geral é muito pequeno, para $d < 4$ o intervalo caracterizado por t_G pode ser muito grande, de modo que a região onde as flutuações dominam o comportamento crítico é visível experimentalmente. Vamos então usar alguns exemplos para ilustrar as duas situações .

- *Supercondutores convencionais*. Nesse caso, $\xi_0 \sim 1000\text{Å}$ (grosseiramente, esse é o “tamanho” linear do par de Cooper). Então, $t_G^{sc} \sim (10^3)^{-6} \sim 10^{-18}$ (em unidades arbitrárias).
- *Superfluidos tipo He⁴*. Agora, $\xi_0 \sim 1\text{Å}$ (da ordem do comprimento de onda térmico dos átomos). Portanto, $t_G^{sf} \sim (10^0)^{-6} \sim 1$ (nas mesmas unidades arbitrárias).

Supondo que $\Delta C^{sc} \approx \Delta C^{sf}$, nós vemos que

$$\frac{t_G^{sc}}{t_G^{sf}} \approx 10^{-18}. \quad (41)$$

Assim, no caso dos supercondutores é necessário ir muito próximo ao ponto crítico para ver os efeitos das flutuações. Obviamente, nenhum experimento tem atualmente essa resolução tão pequena em temperatura e isso explica porque aparentemente a teoria de campo médio funciona para eles. Note que no caso dos supercondutores de alta T_c , o comprimento de correlação é bem menor, tipicamente $\xi_0 \sim 10\text{Å}$. Neste caso t_G aumenta muito e, de fato, para esses materiais, é possível verificar os efeitos das flutuações próximo ao ponto de transição.

8.4 Sumário da teoria de Landau-Ginzburg

- Flutuações transversais (modos de Goldstone) destroem ordem de longo alcance para $d \leq d_L = 2$ em sistemas com simetria contínua ($n > 1$). Em sistemas com simetria discreta (ou, genericamente, $n = 1$), não existe ordem de longo alcance somente para $d \leq d_L = 1$.
- A aproximação de campo médio (negligenciando flutuações) é exata para $d \geq 4$. Neste caso os expoentes críticos são bem conhecidos ($\alpha = 0$, $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$, $\delta = 3$, $\nu = 1/2$).
- Quando $d_L < d < 4$, há ordem de longo alcance e portanto há transição de fase crítica, mas a teoria de campo médio falha suficientemente próximo ao ponto crítico. É necessário uma outra abordagem para determinar os expoentes críticos.

9 Hipótese de homogeneidade – identidades entre expoentes crítico e auto-similaridade

Apesar da teoria de Landau-Ginzburg ser um bom ponto de partida para o estudo de fenômenos críticos, para $d < 4$ ela não fornece previsões corretas em sua forma mais simples, ou seja, na solução de campo médio dentro da aproximação de ponto de sela. É portanto necessário buscar um método ou abordagem alternativos que leve em conta de forma apropriada as flutuações descartadas na solução de campo médio.

Antes de nos embrenharmos em métodos sofisticados ou em teorias matemáticas complicadas, vamos tentar reforçar mais alguns aspectos relativos à criticalidade que nos passaram de certa forma despercebidos até agora. Em cima dessas observações, vamos então construir uma maneira alternativa de abordar o problema da determinação dos expoentes críticos. Vamos inicialmente somente usar bom-senso, intuição e um pouco de termodinâmica.

O ponto de partida é a observação de que a solução de campo médio fornece uma energia livre que depende somente de forma algébrica (lei de potência) dos parâmetros da hamiltoniana efetiva (t, h, u , etc.). Fixando u , por exemplo,

$$\begin{aligned} f(t, h) &= \frac{F(t, h)}{L^d} = \min \left\{ \frac{t}{2} m^2 + u m^4 - \vec{h} \cdot \vec{m} \right\} \\ &\approx \begin{cases} -t^2/4u, & t < 0, h = 0, \\ h^{4/3}/u^{1/3}, & h > 0, t = 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (1)$$

A parte singular da função $f(t, h)$ segue um comportamento de leis de potência (algébrico) próximo ao ponto crítico. Nós podemos tentar juntar tudo numa só expressão:

$$f(t, h) \sim t^2 g\left(\frac{h}{t^\Delta}\right), \quad (2)$$

sendo $g(\epsilon)$ uma função do tipo homogênea, tal que

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} g(\epsilon) = \text{const.} = \begin{cases} 1/u, & t < 0, \\ 0, & t > 0, \end{cases} \quad (h = 0) \quad (3)$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow \infty} g(\epsilon) = \epsilon^{4/3}, \quad (t = 0), \quad (4)$$

sendo então necessário que $\Delta = 3/2$.

Vamos supor então que, genericamente, desde que estejamos suficientemente próximos a um ponto crítico, seja sempre possível escrever a parte singular da energia livre na forma

$$f(t, h) \sim t^{2-\alpha} g\left(\frac{h}{t^\Delta}\right), \quad (5)$$

sendo $g(\epsilon)$ alguma função homogênea de uma variável com propriedades semelhantes (mas não necessariamente iguais) àsquelas mostradas nas Eqs. (3) e (4). A quantidade Δ é chamada de expoente do hiato (“gap”). Essa é a chamada hipótese de homogeneidade das funções termodinâmicas. A idéia é que ela seja válida mesmo quando vamos além da solução de campo médio.

Vejamos então quais as suas conseqüências. A primeira coisa a fazer é investigar o aspecto de outras propriedades termodinâmicas que podem ser deduzidas de $f(t, h)$. Por exemplo, como

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} &\sim (2 - \alpha)t^{1-\alpha}g\left(\frac{h}{t^\Delta}\right) - \frac{\Delta t^{2-\alpha}h}{t^{\Delta+1}}g'\left(\frac{h}{t^\Delta}\right) \sim t^{1-\alpha}\left[(2 - \alpha)g\left(\frac{h}{t^\Delta}\right) - \frac{h}{t^\Delta}g'\left(\frac{h}{t^\Delta}\right)\right] \\ &\sim t^{1-\alpha}\bar{g}\left(\frac{h}{t^\Delta}\right),\end{aligned}\quad (6)$$

e

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} &\sim (1 - \alpha)t^{-\alpha}\bar{g}\left(\frac{h}{t^\Delta}\right) - \frac{\Delta t^{1-\alpha}h}{t^{\Delta+1}}\bar{g}'\left(\frac{h}{t^\Delta}\right) \sim t^{-\alpha}\left[(1 - \alpha)\bar{g}\left(\frac{h}{t^\Delta}\right) - \frac{h}{t^\Delta}\bar{g}'\left(\frac{h}{t^\Delta}\right)\right] \\ &\sim t^{-\alpha}\bar{\bar{g}}\left(\frac{h}{t^\Delta}\right),\end{aligned}\quad (7)$$

sendo $\bar{g}(\epsilon)$ e $\bar{\bar{g}}(\epsilon)$ também funções homogêneas, e

$$C \sim -\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}, \quad (8)$$

segue que o calor específico também é uma função homogênea da razão h/t^Δ próximo ao ponto crítico,

$$C \sim t^{-\alpha}g_c\left(\frac{h}{t^\Delta}\right). \quad (9)$$

O expoente α descreve a divergência do calor específico próximo ao ponto crítico ($t \rightarrow 0$) quando $h = 0$ (antecipando esse fato, foi utilizada a mesma letra que caracterizava esse comportamento em capítulos anteriores). No caso da magnetização, nós temos que

$$m = -\frac{\partial f}{\partial h} \sim t^{2-\alpha-\Delta}g_m\left(\frac{h}{t^\Delta}\right). \quad (10)$$

Fazendo $h = 0$ e lembrando que, neste caso, nós esperamos que $m \sim t^\beta$, conclui-se que⁸

$$\beta = 2 - \alpha - \Delta. \quad (11)$$

Por outro lado, se tomarmos $t \rightarrow 0$ antes de fazer $h = 0$, nós obtemos

$$m \sim t^{2-\alpha-\Delta}g_c\left(\frac{h}{t^\Delta}\right) \sim t^{2-\alpha-\Delta}\left(\frac{h}{t^\Delta}\right)^p \sim t^{2-\alpha-\Delta-p\Delta}h^p, \quad (12)$$

onde p é um número. Para determiná-lo, lembremos que como m é finito quando $t = 0$ e $h \neq 0$, necessariamente $2 - \alpha - \Delta - p\Delta = 0$ e, portanto, $p = (2 - \alpha)/\Delta - 1$. Como $m \sim h^{1/\delta}$, segue que

$$\delta = \frac{\Delta}{2 - \alpha - \Delta}, \quad (13)$$

ou, ainda, $\delta = \Delta/\beta$. De forma semelhante, nós podemos escrever o expoente crítico da susceptibilidade linear, γ , em termos de α e Δ :

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_{h=0} \sim t^{2-\alpha-2\Delta}g_\chi\left(\frac{h}{t^\Delta}\right)\Big|_{h=0} \sim t^{2-\alpha-2\Delta}. \quad (14)$$

⁸Note que não estamos sendo muito cuidadosos em separar situações em que t é positivo daquelas onde pode ser negativo. No caso acima, com $h = 0$, obviamente o expoente β é definido quando $t < 0$.

Conseqüentemente,

$$\gamma = 2\Delta + \alpha - 2. \quad (15)$$

Fica claro então que a partir da hipótese de homogeneidade, os expoentes críticos α , β , γ e δ não são independentes entre si. Por exemplo, podemos facilmente verificar a partir das relações acima que valem as identidades

$$\boxed{\alpha + 2\beta + \gamma = 2} \quad (\text{Rushbrooke}) \quad (16)$$

e

$$\boxed{\delta - 1 = \frac{\gamma}{\beta}} \quad (\text{Widom}). \quad (17)$$

Mas será que essas identidades são satisfeitas na prática, quando olhamos para os resultados experimentais? Verifique você mesmo usando a tabela abaixo, onde são mostrados expoentes críticos de diferentes classes de sistemas.

d	n	α	β	γ	δ	ν
3	1	0.12	0.31	1.25	5	0.64
	2	0.00	0.33	1.33	5	0.66
	3	-0.14	0.35	1.4	5	0.7
2	1	0	1/8	7/4	15	1

Note que o acordo é muito bom! Isso dá força à hipótese de homogeneidade.

Além de estabelecer identidades entre expoentes, outra propriedade consequência importante da hipótese de homogeneidade é a independência dos expoentes em relação à maneira como o ponto crítico é alcançado. Para entender isso, vamos supor que, a princípio, $C \sim t^{-\alpha_{\pm}} g_{\pm}^{\pm}(h/t_{\pm}^{\Delta})$, onde \pm indicam dois sentidos possíveis ao longo de uma mesma trajetória (linha A) para se alcançar o ponto X na Fig. 24.

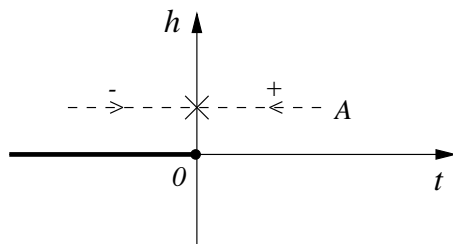


Figure 24: Trajetória no diagrama de fase.

A partir da função homogênea nós podemos obter a expansão

$$C_{\pm} \sim t^{-\alpha_{\pm}} \left[\left(\frac{h}{t^{\Delta_{\pm}}} \right)^{p_{\pm}} + (\text{coef.}) \left(\frac{h}{t^{\Delta_{\pm}}} \right)^{q_{\pm}} + \dots \right], \quad (18)$$

onde os coeficientes p_{\pm} e q_{\pm} são as potências dominantes quando $t \rightarrow 0$, formando uma série assintótica. Por outro lado, como para $h \neq 0$ a capacidade térmica é uma função analítica da temperatura, nós podemos também escrever que, para $t \rightarrow 0$,

$$C \sim C_h^{(0)} + t C_h^{(1)} + t^2 C_h^{(2)} + \dots, \quad (19)$$

onde cada coeficiente da expansão depende de h . Comparando as duas expansões, nós concluimos que $-\alpha_{\pm} + p_{\pm}\Delta_{\pm} = 0$ e $-\alpha_{\pm} - q_{\pm}\Delta_{\pm} = 1$, de modo que

$$C \sim h^{-\alpha_{\pm}/\Delta_{\pm}} + (\text{coef.}) t h^{-(\alpha_{\pm}+1)/\Delta_{\pm}} + \dots \quad (20)$$

Como o calor específico é uma função contínua, necessariamente nós temos que $\alpha_+ = \alpha_-$ e $\Delta_+ = \Delta_-$.

Assim, como a parta singular da energia livre e de outras quantidades termodinâmicas a ela relacionadas são funções homogêneas dos parâmetros t e h , vamos também assumir que o mesmo ocorre com o(s) comprimento(s) de correlação(ões) próximo ao ponto crítico:

$$\chi(t, h) \sim t^{-\nu} g_{\xi} \left(\frac{h}{t\Delta} \right). \quad (21)$$

De fato, essa propriedade é satisfeita pelo menos para a solução de campo médio da teoria de Landau-Ginzburg, onde

$$\xi(t, 0) \sim t^{-\nu}. \quad (22)$$

Da nossa hipótese, seguiria então que

$$\xi(0, h) \sim h^{-\nu/\Delta}. \quad (23)$$

Excetuando as escalas extrínsecas a (tamanho da granulação no sistema) e L (tamanho linear total do sistema), o único comprimento característico intrínseco ao sistema quando próximo ao ponto crítico é ξ . Assim é natural supor que quantidades adimensionais, mas extensivas, como $\ln Z$, possam ser escritas na forma

$$\ln Z \sim \left(\frac{L}{\xi} \right) \times \mathcal{A}, \quad (24)$$

sendo \mathcal{A} uma função de todos os outros parâmetros adimensionais relevantes. Claro que há também contribuições do tipo $(L/a)^d$, mas essas não são singulares e podem ser esquecidas por hora. Como

$$f = \frac{F}{L^d} \sim \frac{1}{L^d} \ln Z \sim \xi^{-d}, \quad (25)$$

para $h = 0$ nós concluimos que $t^{-\nu d} = t^{2-\alpha}$, ou seja,

$$\boxed{2 - \alpha = d\nu} \quad (\text{Josephson}). \quad (26)$$

Esta identidade é chamada também de lei de hiperescala. Ao contrário das anteriores, ela envolve explicitamente a dimensionalidade do sistema em questão. Um ponto que merece comentário é que os expoentes críticos da solução de campo médio obedecem às identidades de Rushbrooke e Widom, mas não satisfazem Josephson, a não ser no caso $d = 4$.

Ainda falta acharmos uma relação que envolva η , o expoente que aparece no decaimento espacial das flutuações do parâmetro de ordem ($\eta = 0$ em campo médio). Para tal, vamos lembrar que a função de correlação espacial do parâmetro de ordem tem um comportamento algébrico para distâncias menores que ξ ,

$$G(\vec{x}) = \langle \vec{m}(\vec{x}) \cdot \vec{m}(0) \rangle_c \sim \frac{1}{|\vec{x}|^{d-2+\eta}}, \quad (27)$$

decaimento rapidamente (exponencialmente) para distâncias maiores do que ξ . Usando então o teorema flutuação-dissipação, podemos escrever a susceptibilidade linear em termos de χ :

$$\chi \sim \int d^d x G(\vec{x}) \sim \int_a^\xi \frac{d^d x}{|\vec{x}|^{d-2+\eta}} \sim \xi^{2-\eta} \sim t^{-\nu(2-\eta)}. \quad (28)$$

Como $\chi \sim t^{-\gamma}$, segue que

$$\boxed{\gamma = (2 - \eta)\nu} \quad (\text{Fisher}). \quad (29)$$

Contando o número de expoentes críticos arrolados até o momento ($\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu$ e η : 6) e o número de identidades (4), concluímos que há somente dois expoentes independentes.

Uma outra consequência muito importante da hipótese de homogeneidade é a propriedade de auto-semelhança (do inglês “self-similarity”). Note que exatamente no ponto crítico $\xi = \infty$ (as flutuações do parâmetro de ordem em todos os pontos do sistema se encontram correlacionadas) e o sistema deixa de ter escalas intrínsecas de referência. Do ponto de vista formal, isso significa que as funções de correlação, perante transformações de escala, variam da seguinte forma,

$$G(ax) = a^p G(x), \quad (30)$$

sendo p alguma potência. O sistema tem invariância de escala de comprimento. Ou seja, flutuações a curta distância são estatisticamente equivalentes àsquelas a longas distâncias, sendo impossível distingui-las (não há escalas de referência!). Essa propriedade de auto-similaridade foi muito popularizada por Mandelbrot e suas figuras de fractais. Um exemplo trivial de como construir um conjunto fractal é o mapeamento mostrado na Fig. 25, onde em cada novo estágio todos os segmentos retos são substituídos por um degrau retangular.



Figure 25: Exemplo simples de um conjunto fractal.

Estruturas muito semelhantes abundam na natureza. Por exemplo, elas ocorrem em costas oceânicas, em nuvens, em redes de rios, etc.

Transformações do tipo mostrado na Eq. (30) são chamados de dilatações. Assim como as rotações e as translações, elas forma um grupo, no sentido matemático da palavra. Seria muito interessante se fosse possível construir uma hamiltoniana efetiva, no espírito de Landau, que fosse invariante não só a rotações e translações, mas também a dilatações. Ela seria extremamente apropriada para a descrição do comportamento do sistema sobre o ponto crítico e provavelmente os expoentes seriam muito simples de ser obtidos. Infelizmente isso só pode ser realizado em $d = 2$, onde a dilatação nada mais é do que uma transformação conforme. Ainda que válido somente para sistemas bidimensionais, teorias conformes são muito explorados não só para o entendimento de fenômenos críticos e transições de fase de 2^a ordem, mas também em outras áreas da Física.

Contudo, as ferramentas matemáticas são bastante complicadas para um curso deste nível, além de serem muito específicas e pouco úteis em $d > 2$. Portanto, nós vamos buscar uma abordagem alternativa, certamente muito mais geral, que é o chamado grupo de renormalização. Apesar do nome, não será necessário estudarmos a matemática dos grupos! Na realidade, o método pode ser construído de uma forma que apela muito à intuição, com base no que já estudamos até agora e em conceitos como granulação grosseira, invariância de escala, etc.

10 Grupo de renormalização

A hipótese de que as partes singulares da energia livre e de outras quantidades termodinâmicas sejam funções homogêneas nos levou a deduzir identidades entre expoentes críticos que estão em perfeito acordo com os dados experimentais. Essa mesma hipótese nos levou a considerar que, a distâncias menores do que ξ , o comprimento de correlação, as flutuações do parâmetro de ordem decaem algebricamente; nessas escalas de comprimento, o sistema exibe a propriedade de auto-similaridade. Quando o sistema se encontra exatamente sobre o ponto crítico, $\xi = \infty$ e desaparecem do sistema quaisquer referências a escalas intrínsecas de comprimento. Nessa situação, não importa com qual resolução espacial que analisemos as flutuações no sistema, elas serão estatisticamente equivalentes. A hamiltoniana efetiva do sistema deve então ser invariante por transformações de escala.

Vamos explorar esse fato mais profundamente. Quando o sistema está fora do ponto crítico e nos formos aplicando sucessivas granulações grosseiras (ou seja, suavizando flutuações através de médias locais), eventualmente atingiremos escalas de comprimento da ordem de ξ e então a estrutura espacial do parâmetro de ordem $\vec{m}(\vec{x})$ se parecerá muito diferente da inicial. Nesse caso, as teorias efetivas antes e depois de vários estágios de granulação grosseira não serão iguais – os coeficientes t , u , K , \vec{h} , etc., sofrerão modificações substanciais. Já na situação em que $\xi = \infty$, sobre o ponto crítico, as sucessivas granulações grosseiras não devem levar a nenhuma alteração na teoria efetiva e portanto os coeficientes t , u , K , \vec{h} , etc., serão sempre os mesmos.

Seguindo esse raciocínio, a idéia de L. Kadanoff, na década de 60, foi então construir um método prático de determinação das propriedades críticas do sistema, como expoentes, baseada nessa invariância a reescalamentos. Ou seja, ele criou um método que, partindo da fenomenologia descrita acima, fortemente calcada na hipótese de homogeneidade e auto-similaridade, usa a granulação grosseira para chegar ao comportamento singular do sistema próximo ao ponto crítico.

Eis então a chamada construção de Kadanoff, descrita em etapas:

1. Seja

$$P[\vec{m}(\vec{x})] \sim e^{-\beta\mathcal{H}[\vec{m}(\vec{x})]} \quad (1)$$

a distribuição de probabilidade de uma certa configuração $\vec{m}(\vec{x})$ do parâmetro de ordem, com

$$\beta\mathcal{H}[\vec{m}] = \int d^d x \left[\frac{t}{2} m^2 + u m^4 + \frac{K}{2} (\nabla \vec{m})^2 - \vec{h} \cdot \vec{m} + \dots \right]. \quad (2)$$

Começamos granulando grosseiramente o sistema, por um fator $b > 1$, de tal forma que, localmente, $\vec{m}(\vec{x})$ é substituído pela média

$$\vec{m}(\vec{x}) \longrightarrow \overline{\vec{m}(\vec{x})} = \frac{1}{(ab)^d} \int_{\vec{x} \pm b/2} d^d y \vec{m}(\vec{y}), \quad (3)$$

onde a é a constante de rede do sistema (resolução espacial antes de granulação) e a integral se faz sobre um cubo de lado b ao redor do ponto \vec{x} . Assim, necessariamente ocorre uma suavização em $\vec{m}(\vec{x})$.

2. Em seguida nós reescalamos todos os comprimentos no sistema pelo mesmo fator b :

$$\vec{x} \longrightarrow \vec{x}' = \vec{x}/b. \quad (4)$$

Graficamente, algo como mostrado na Fig. 26 acontece. As células unitárias voltam a ter o mesmo tamanho das originais, só que agora são em menor número (o que não chega a ser significativo, uma vez que trabalhamos no limite termodinâmico onde $L \rightarrow \infty$). O aspecto mais importante contudo é a suavização das flutuações. Isso quer dizer que haverá menos “ruído” em $\vec{m}(\vec{x})$, sendo que grandes picos ou vales profundos ficarão mais visíveis.

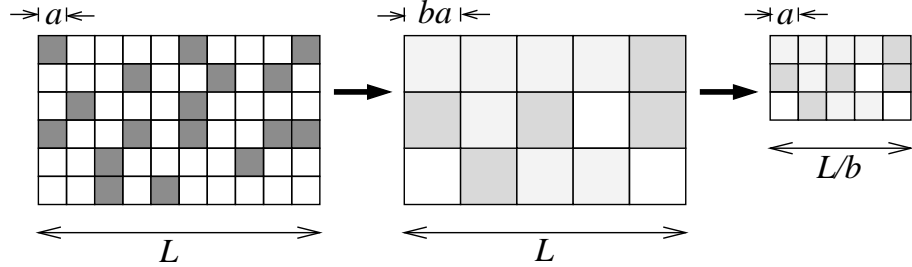


Figure 26: Granulação grosseira seguida de reescalamento de comprimentos.

3. A compensação vem através da renormalização de \vec{m} ,

$$\vec{m} \longrightarrow \vec{m}' = \vec{m}/\zeta, \quad (5)$$

onde ζ é um fator a ser ajustado posteriormente. Portanto, com resultado final, podemos escrever que

$$\vec{m}(\vec{x}) \longrightarrow \vec{m}'(\vec{x}') = \frac{1}{\zeta(ab)^d} \int_{\vec{x} \pm b/2} d^d y \vec{m}(\vec{y}). \quad (6)$$

Note que essa relação define um mapeamento (obviamente ele não é inversível). Associada ao novo, renormalizado, parâmetro \vec{m}' , que agora varia sobre distâncias reescaladas \vec{x}' , haverá uma nova hamiltoniana efetiva e, portanto, uma nova distribuição de probabilidade,

$$P'[\vec{m}'(\vec{x}')] \sim e^{-\beta\mathcal{H}'[\vec{m}']}. \quad (7)$$

4. A hipótese de Kadanoff é que, próximo ao ponto crítico, a nova hamiltoniana $\beta\mathcal{H}'$ obedecerá os mesmos princípios e simetrias que a antiga, $\beta\mathcal{H}$. Assim, funcionalmente elas serão iguais. A mudança ocorre somente nos coeficientes ou parâmetros da expansão,

$$\beta\mathcal{H}'[\vec{m}'] = \int d^d x' \left[\frac{t'}{2} m'^2 + u' m'^4 + \frac{K'}{2} (\nabla' \vec{m}')^2 - \vec{h}' \cdot \vec{m}' + \dots \right]. \quad (8)$$

Cada novo coeficiente será função dos todos os anteriores e dependerá também do fator de reescalamento b ,

$$t' = \mathcal{T}_b(t, u, K, \vec{h}, \dots), \quad (9)$$

$$u' = \mathcal{U}_b(t, u, K, \vec{h}, \dots), \quad (10)$$

$$K' = \mathcal{K}_b(t, u, K, \vec{h}, \dots), \quad (11)$$

$$\vec{h}' = \mathcal{I}_b(t, u, K, \vec{h}, \dots), \quad (12)$$

etc.. Como o mapeamento somente elimina graus de liberdade (flutuações) de comprimento de onda pequenos e mantém aquelas com grandes comprimentos de onda, os

novos coeficientes devem ser funções analíticas dos anteriores. Como a criticalidade é em geral controlada pelos parâmetros dos termos linear (“campo magnético externo”) e quadrático (“temperatura”), vamos nos concentrar em t e h , congelando u , K , etc.. Como o mapeamento sempre leva o $(0, 0, 0, \dots)$ nele mesmo, nós podemos escrever as expansões

$$t' = A_b t + B_b h + O(t^2, h^2) \quad (13)$$

e

$$h' = C_b h + D_b t + O(t^2, h^2) \quad (14)$$

sempre que o fator b não for muito maior de que a unidade (por hora, vamos deixar de lado o caráter vetorial de \vec{h}). Porém, note que a transformação $h \rightarrow -h$ implica em $\vec{m} \rightarrow -\vec{m}$, sem alteração da energia total ou das propriedades críticas do sistema. Assim, necessariamente nós temos que $C_b = B_b = 0$. Além disso, Como $A_1 = 1$ e $A_{b_1 b_2} = A_{b_1} A_{b_2}$ (idem para D_b), nós podemos reescrever as Eqs. (13) e (14) na forma

$$t' = b^{y_t} t \quad \text{e} \quad h' = b^{y_h} h, \quad (15)$$

onde y_t e y_h são dois expoentes característicos do sistema.

Quais são as conseqüências disso tudo? Em primeiro lugar, não é difícil mostrar que os expoentes críticos do sistema podem ser obtidos a partir do conhecimento de y_t e y_h (o que faremos logo a seguir). Outro aspecto fundamental é que o mapeamento preserva a norma da distribuição (ou seja, a função de partição),

$$Z = \int \mathcal{D}\vec{m}(\vec{x}) P[\vec{m}(\vec{x})] = \int \mathcal{D}\vec{m}'(\vec{x}') P'[\vec{m}'(\vec{x}')] = Z'. \quad (16)$$

Como $F \sim \ln Z$, segue então que $F' = F$ e $L^d f(t, h) = L'^d f(t', h')$. Como $L' = L/b$, nós concluímos que

$$f(t, h) = b^{-d} f(b^{y_t} t, b^{y_h} h). \quad (17)$$

Nós podemos escolher b de modo que fique explícita a homogeneidade da energia livre: se $b = t^{1/y_t}$, então

$$f(t, h) = t^{d/y_t} f(1, h/t^{y_h/y_t}). \quad (18)$$

Uma mera inspeção nos permite concluir que $\Delta = y_h/y_t$ e $2 - \alpha = d/y_t$.

Esse raciocínio de escala também pode ser aplicado ao comprimento de correlação. Como $\xi' = \xi/b$ e a dependência funcional de ξ com os coeficientes t e h é a mesma antes ou depois da granulação grosseira (já que funcionalmente a hamiltoniana efetiva não muda), segue que

$$\xi(t, h) = b \xi(b^{y_t} t, b^{y_h} h). \quad (19)$$

Novamente escolhendo $b^{y_t} t = 1$, nós chegamos à conclusão que $\nu = 1/y_t$. Algo semelhante pode ser feito em relação à “magnetização” espontânea, \vec{m}_0 :

$$m_0 = -\frac{\partial f}{\partial h} = -\frac{1}{L^d} \frac{\partial \ln Z}{\partial h} = \frac{b^{y_h-d}}{L^d} \frac{\partial \ln Z'}{\partial h'} = b^{y_h-d} m'_0. \quad (20)$$

Ou seja,

$$m_0(t, h) = b^{y_h-d} m(b^{y_t} t, b^{y_h} h). \quad (21)$$

Fazendo $b^{y_t} t = 1$, obtemos $\beta = (d - y_h)/y_t$.

Nós acabamos de verificar que a hipótese de homogeneidade é perfeitamente consistente com a construção das funções termodinâmicas pelo grupo de renormalização (GR) de Kadanoff. Os expoentes críticos podem ser escritos com termos dos expoentes de escala da temperatura reduzida t e do “campo magnético” h , y_t e y_h , respectivamente.

Apesar da proposta de Kadanoff ser atraente, ela ainda não foi apresentada de forma completamente operacional. Vamos agora tentar fazer isso, formalizando um pouco mais cada uma das etapas e construindo uma espécie de receita geral.

1. Escrever a hamiltoniana efetiva do problema, no espírito da teoria de Landau,

$$\beta\mathcal{H} = \int d^d x \left[\frac{t}{2} m^2 + u m^4 + v m^6 + \dots + \frac{K}{2} (\nabla \vec{m})^2 + \frac{L}{2} (\nabla^2 \vec{m})^2 + \dots - \vec{h} \cdot \vec{m} \right], \quad (22)$$

identificando o conjunto de coeficientes apropriados: $\mu = (t, u, v, \dots, K, L, \dots, h)$.

2. Aplicar o grupo de renormalização de Kadanoff:

- (a) granulação grosseira por um fator b .
- (b) reescalonamento $x' = x/b$.
- (c) renormalização $m' = m/\zeta$.

3. Reescrever a distribuição de probabilidade usando a mesma estrutura funcional para a hamiltoniana efetiva, mas com um novo conjunto de coeficientes: $\beta\mathcal{H} \rightarrow (\beta\mathcal{H})'$, com

$$(\beta\mathcal{H})' = \int d^d x' \left[\frac{t'}{2} m'^2 + u' m'^4 + v' m'^6 + \dots + \frac{K'}{2} (\nabla' \vec{m}')^2 + \frac{L'}{2} (\nabla'^2 \vec{m}')^2 + \dots - \vec{h}' \cdot \vec{m}' \right], \quad (23)$$

ou seja, $\mu \rightarrow \mu' = (t', u', v', \dots, K', L', \dots, h')$. Portanto, deve haver uma transformação não-singular (analítica) que leve μ a μ' : $R_b(\mu) = \mu'$.

4. Determine os pontos fixos da transformação, ou seja, aqueles que são levados a si mesmos ($\mu = \mu' = \mu^*$), de modo que $\xi = \xi(\mu) = \xi(\mu') = \xi'$. Nesse caso, como $\xi = \xi/b$ e $b \neq 1$, necessariamente ou $\xi = \infty$, ou então $\xi = 0$. Os pontos fixos correspondentes a transições de fase são aqueles em que o comprimento de correlação diverge.
5. Linearize a transformação na vizinhança de μ^* ,

$$R_b(\mu^* + \delta\mu) = \mu^* + \delta\mu', \quad (24)$$

de forma que seja possível definir a matriz

$$R_b^{ij} = \left(\frac{\partial \delta \mu'_i}{\partial \delta \mu_j} \right)_{\mu^*}, \quad (25)$$

onde $\mu_1 = t$, $\mu_2 = u$, \dots , etc..

6. Ache os autovetores $\theta_\alpha(b)$ e autovalores $\lambda_\alpha(b)$ da matriz \hat{R}_b ,

$$\hat{R}_b \theta_\alpha(b) = \lambda_\alpha(b) \theta_\alpha(b). \quad (26)$$

Note que, como $\hat{R}_{b_1} \hat{R}_{b_2} = \hat{R}_{b_1 b_2}$, nós temos que $\lambda_\alpha(b_1) \lambda_\alpha(b_2) = \lambda_\alpha(b_1 b_2)$ e, portanto, $\lambda_\alpha(b) = b^{y_\alpha}$. Os vetores θ_α definem direções no espaço formado pelos coeficientes da hamiltoniana efetiva e são chamados de operadores de escala com dimensão y_α . Os expoentes y_α são chamados de dimensões a anômalas. Quando $y_\alpha > 0$ o operador é dito relevante; ele é irrelevante quando $y_\alpha < 0$. No caso $y_\alpha = 0$ o operador é marginal, indicando que precisamos ir além da linearização da transformação para podermos entender o comportamento do sistema naquela direção do espaço de coeficientes. Graficamente, próximo ao ponto fixo, nós podemos ter algo como mostrado na Fig. 27.

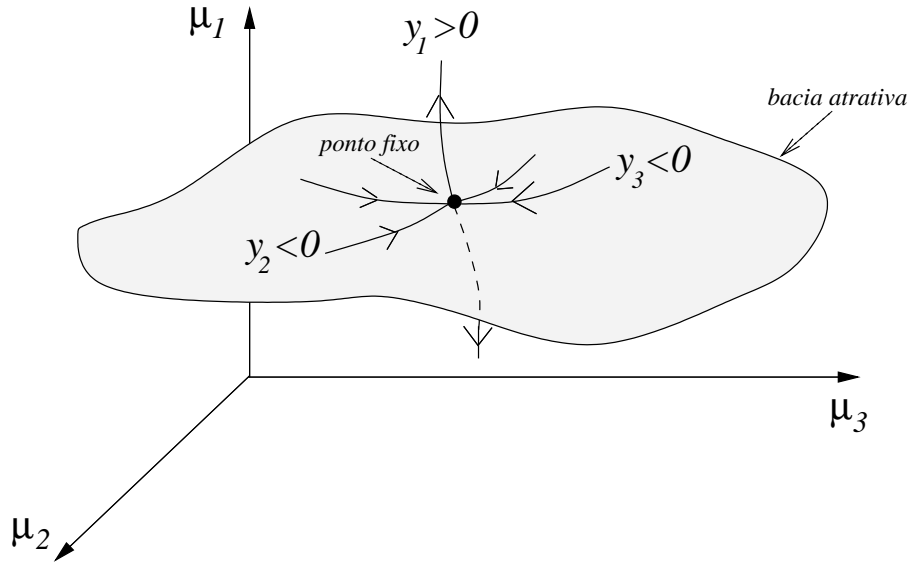


Figure 27: Estrutura ao redor de um ponto fixo com duas direções estáveis e uma instável.

O lugar geométrico dos pontos no quais, uma vez iniciado o processo do GR, flue-se para o ponto fixo é chamado de bacia atrativa. Fora da bacia atrativa, o GR nos leva a regiões cada vez mais distantes do ponto fixo (e portanto longe daquela específica transição). Matematicamente, na vizinhança do ponto fixo, valem as relações

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \sum_{\alpha} \delta\mu_{\alpha} \hat{\theta}_{\alpha} \longrightarrow \vec{\mu}' = \vec{\mu}^* + \sum_{\alpha} \delta\mu_{\alpha} b^{y_{\alpha}} \hat{\theta}_{\alpha}. \quad (27)$$

7. A partir do conjunto de expoentes, $\{y_{\alpha}\}$, determine os expoentes críticos do sistema através das relações termodinâmicas e das identidades de Rushbrooke, Widom, Josephson, Fisher, etc.. Por exemplo, próximo ao ponto crítico, $\mu_i = \mu_i^* + \delta\mu_i$, de modo que

$$\xi(\delta\mu_1, \delta\mu_2, \dots) = b \xi(b^{y_1} \delta\mu_1, b^{y_2} \delta\mu_2, \dots). \quad (28)$$

escolhendo $b = (\delta\mu_1)^{-1/y_1}$, segue que

$$\xi(\delta\mu_1, \delta\mu_2, \dots) = (\delta\mu_1)^{-1/y_1} \xi(1, \delta\mu_2 / (\delta\mu_1)^{y_2/y_1}, \dots). \quad (29)$$

Portanto, para $t = \delta\mu_1$ e $h = \delta\mu_2$, nós obtemos $\nu = 1/g_1$ e $\Delta = y_2/y_1$.

As principais dificuldades desse método estão na determinação da transformação R_b , uma vez que, a princípio, ela opera num espaço de dimensão muito grande (ou mesmo infinita, a rigor). Não há regra geral e sistemática para obtê-la. Outro problema é que nada garante que a estrutura de pontos fixos (pode haver mais de um) seja tão simples a ponto de ser descrita por uma expansão linear. Não obstante, vamos tentar ilustrar a construção de Kadanoff a partir de um exemplo suficientemente simples, onde tudo possa ser obtido sem grande esforço.

10.1 Modelo Gaussiano ($u = 0$).

Seja a hamiltoniana efetiva

$$\beta\mathcal{H} = \int d^d x \left[\frac{t}{2} m^2 + \frac{K}{2} (\nabla \vec{m})^2 - \vec{h} \cdot \vec{m} \right]. \quad (30)$$

Neste caso, obviamente, $t > 0$. Note que como a hamiltoniana é quadrática em \vec{m} , a integral funcional correspondente à função de partição será gaussiana e, portanto, exatamente solúvel. Então, antes de proceder com o GR, vamos obter os expoentes críticos em sua forma exata. Posteriormente, poderemos comparar esses resultados com aqueles obtidos via GR.

Como o sistema é homogêneo, é útil passar para a representação no espaço de Fourier,

$$\vec{m}(\vec{x}) = \frac{1}{L^d} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \vec{m}_{\vec{q}}, \quad (31)$$

onde, supondo o sistema como uma caixa d dimensional de lado L com condições de contorno periódicas, $q_i = 2\pi n_i/L$, $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, com $i = 1, 2, \dots, d$. Com um pouco de álgebra, não é difícil escrever a função de partição na forma

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}\vec{m}_{\vec{q}} \exp \left\{ - \sum_{\vec{q}} \left[\frac{(t + Kq^2)}{2L^d} |\vec{m}_{\vec{q}}|^2 - \vec{h} \cdot \vec{m}_{\vec{q}} \delta_{\vec{q},0} \right] \right\} \\ &= \int \prod_{\vec{q}} \vec{m}_{\vec{q}} \exp \left[- \frac{(t + Kq^2)}{2L^d} |\vec{m}_{\vec{q}}|^2 + \vec{h} \cdot \vec{m}_{\vec{q}} \delta_{\vec{q},0} \right]. \end{aligned} \quad (32)$$

Para $\vec{q} \neq 0$, nós temos que

$$\int d\vec{m}_{\vec{q}} e^{-\frac{(t+Kq^2)}{2L^d} |\vec{m}_{\vec{q}}|^2} = \left(\frac{2\pi L^d}{t + Kq^2} \right)^{n/2} \sim e^{-\frac{n}{2} \ln(t+Kq^2)}, \quad (33)$$

enquanto que, para $\vec{q} = 0$,

$$\int d\vec{m}_0 e^{-\frac{t}{2L^d} |\vec{m}_0|^2} = \left(\frac{2\pi L^d}{t} \right)^{n/2} e^{\frac{L^d h^2}{2t}}. \quad (34)$$

Juntando tudo, nós obtemos

$$Z \sim e^{-\frac{n}{2} \sum_{\vec{q}} \ln(t+Kq^2) + \frac{L^d h^2}{2t}}, \quad (35)$$

o que nos leva à seguinte energia livre por unidade de volume,

$$f(t, h) \sim -\frac{\ln Z}{L^d} \sim -\frac{n}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln(t + Kq^2) - \frac{h^2}{2t} \quad (36)$$

(tomando o limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$). Nós já nos deparamos com integrais semelhante a essa anteriormente. Lembrando, num sistema periódico (rede), o limite superior de \vec{q} é o tamanho linear da zona de Brillouin ($\Lambda \sim 1/a$, onde a é a constante de rede). Se aproximarmos a zona de Brillouin por uma hipersfera de raio Λ , nós temos que

$$\begin{aligned}
\int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln(t + Kq^2) &= \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_0^\Lambda dq q^{d-1} \ln(t + Kq^2) \\
&= \frac{S_d}{(2\pi)^d} \left[\frac{q^d}{d} \ln(t + Kq^2) \right]_0^\Lambda - \frac{2K}{d} \int_0^\Lambda \frac{dq q^{d+1}}{t + Kq^2} \\
&\approx \text{const.} + (\#) \frac{t^{d/2}}{dK^{d/2}}, \tag{37}
\end{aligned}$$

onde $(\#)$ é número que depende de Λ , t e K de forma não crítica. Assim, nós chegamos a conclusão que a parte singular da energia livre pode ser escrita na forma

$$f(t, h) \sim t^{d/2} \times \left(\text{const.} + \frac{h^2}{t^{1+d/2}} \right). \tag{38}$$

Portanto, $\alpha = 2 - d/2$ e $\Delta = (1 + d/2)/2$. Usando as identidades entre expoentes críticos, nós chegaríamos a $\beta = -1/2 + d/2$. Contudo, a nossa teoria só se aplica a $t > 0$, de forma que β não é bem definido. O mesmo não ocorre com a susceptibilidade, de modo que $\gamma = 1$ (sempre do lado $t > 0$). Além disso, nós também temos $\nu = 1/2$ e $\eta = 0$. Esses são resultados exatos para o modelo gaussiano.

Vamos agora proceder com a construção de Kadanoff. Por etapas:

1. Granulação grosseira – ela corresponde a eliminar flutuações com pequenos comprimentos de onda, ou seja, grande momento linear. Sendo Λ o limite superior dos momentos, nós devemos então retirar da nossa teoria efetiva as flutuações cujos momentos lineares recaiam na faixa $\Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda$ (ou equivalentemente, com comprimentos de onda no intervalo $a < \lambda < ba$, onde $a \sim 1/\Lambda$). Vamos dividir os momentos lineares em dois setores, com $\vec{q}_<$ atuando no intervalo $[0; \Lambda/b]$ e $\vec{q}_>$ correndo sobre $[\Lambda/b; \Lambda]$. Da mesma forma, as flutuações do parâmetro de ordem serão definidas em lentas e rápidas, respectivamente, sendo que nós desejamos eliminar estas últimas. Isto pode ser feito diretamente na função de partição, uma vez que modos lentos e rápidos não se acoplam,

$$\begin{aligned}
Z &= \int_{0 < q < \Lambda} \mathcal{D}\vec{m}_{\vec{q}} e^{-\beta\mathcal{H}[\vec{m}]} \\
&= \int_{0 < q < \Lambda/b} \mathcal{D}\vec{m}_{\vec{q}_<} \int_{\Lambda/b < q < \Lambda} \mathcal{D}\vec{m}_{\vec{q}_>} e^{-\beta\mathcal{H}[\vec{m}]} \\
&= \int_{\Lambda/b < q < \Lambda} \mathcal{D}\vec{m}_{\vec{q}_>} \exp \left[- \int_{\Lambda/b}^\Lambda \frac{d^d q_>}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq_>^2)}{2} |\vec{m}_{\vec{q}_>}|^2 \right] \\
&\quad \times \int_{0 < q < \Lambda/b} \mathcal{D}\vec{m}_{\vec{q}_<} \exp \left[- \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_<}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq_<^2)}{2} |\vec{m}_{\vec{q}_<}|^2 + \vec{h} \cdot \vec{m}_0 \right]. \tag{39}
\end{aligned}$$

A primeira integral funcional envolve somente as flutuações de pequeno comprimento

de onda e pode ser calculada exatamente,

$$\int_{\Lambda/b < q < \Lambda} \mathcal{D}\vec{m}_{\vec{q}} \exp \left[- \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{t + Kq^2}{2} |\vec{m}_{\vec{q}}|^2 \right] = \exp \left[- \frac{nL^d}{2} \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln(t + Kq^2) \right]. \quad (40)$$

De qualquer forma, ela não contribui para as propriedades críticas do sistema. Nós temos que nos concentrar na outra integral funcional, a qual envolve as flutuações com grandes comprimentos de onda.

2. O reescalonamento no espaço real, $x' = x/b$, tem seu análogo no espaço de momentos: $q' = qb$. Assim fazendo, nós obtemos

$$Z_{\text{singular}} = \int \mathcal{D}\vec{m}_{\vec{q}'} \exp \left[- \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kb^{-2}q'^2)}{2b^{-d}} |\vec{m}_{\vec{q}'}|^2 + \vec{h} \cdot \vec{m}_0 \right]. \quad (41)$$

3. A renormalização das componentes de Fourier do parâmetro de ordem é simplesmente $\vec{m}' = \vec{m}/\bar{\zeta}$. Note que $\bar{\zeta}$ não é igual ao fator de renormalização ζ do parâmetro de ordem no espaço real. O resultado final é

$$Z_{\text{singular}} = \int \mathcal{D}\vec{m}'_{\vec{q}'} \exp \left[- \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kb^{-2}q'^2)}{2b^{-d}\bar{\zeta}^{-2}} |\vec{m}'_{\vec{q}'}|^2 + \bar{\zeta}\vec{h} \cdot \vec{m}'_0 \right], \quad (42)$$

de onde podemos observar que

$$t' = \bar{\zeta}^2 b^{-d} t, \quad (43)$$

$$K' = \bar{\zeta}^2 b^{-d-2} K, \quad (44)$$

e

$$h' = \bar{\zeta} h. \quad (45)$$

4. Pontos fixos: de antemão nós sabemos que $t = 0$ e $h = 0$ é um ponto singular da teoria, onde ocorreria uma transição de fase caso houvesse um termo adicional (quártico) na hamiltoniana efetiva. Ele certamente é um ponto fixo, desde que escolhamos $\bar{\zeta}$ de tal modo que $K = K'$: $\bar{\zeta} = b^{(d+2)/2}$. De imediato, podemos verificar que $y_t = 2$ e $y_h = 1 + d/2$. Como $\Delta = y_h/y_t = (1 + d/2)/2$ e $\alpha = 2 - d/y_t = 2 - d/2$, nós obtemos os mesmos expoentes críticos da solução exata. As duas direções t e h são relevantes, uma vez que $y_h > 0$ e $y_t > 0$. A direção K , por sua vez, é marginal. Vale a pena notar que a hamiltoniana efetiva sobre o ponto fixo $t^* = h^* = 0$ ganha a forma

$$(\beta\mathcal{H})^* = \frac{K}{2} \int d^d x (\nabla \vec{m})^2. \quad (46)$$

De fato, ao reescalornamos os comprimentos por b e renormalizarmos o parâmetro de ordem por ζ , somos levados a

$$(\beta\mathcal{H})^* = \frac{K'}{2} \int d^d x' (\nabla \vec{m}')^2, \quad (47)$$

onde $K' = \zeta^2 b^{d-2} K$. Para que $K = K'$, é necessário que $\zeta = b^{1-d/2}$.

O que acontece quando acrescentamos à hamiltoniana efetiva gaussiana pequenas perturbações do tipo

$$u_n \int d^d x [\vec{m}(\vec{x})]^n ? \quad (48)$$

Vamos partir do ponto fixo $t^* = h^* = 0$ com $\zeta = b^{1-d/2}$. Após o reescalonamento e renormalização, esse termo é levado a um novo, com o mesmo aspecto funcional,

$$u'_n \int d^d x' [\vec{m}'(\vec{x}')]^n, \quad (49)$$

onde $u'_n = b^{y-n} u_n$ e

$$y_n = n - \frac{d}{2}(n-2). \quad (50)$$

Numa seqüência crescente de n , nós teríamos

$$y_1 = 1 + \frac{d}{2} = y_h, \quad (51)$$

$$y_2 = 2 = y_t, \quad (52)$$

$$y_4 = 4 - d, \quad (53)$$

$$y_6 = 6 - 2d, \quad (54)$$

etc.. Para $d \leq 3$, $y_4 > 0$ e a perturbação imposta pelo termo quártico é relevante, enquanto que $y_6 = 0$ (marginal) e $y_n < 0$ para $n > 6$) e as respectivas perturbações são irrelevantes. Para dimensões espaciais maiores, os termos de ordem maior ou igual a 4 vão deixando de ser relevantes. Portanto, a teoria gaussiana é muito boa nessas situações, uma vez que perturbações de ordem mais alta que quadrática não alteram as propriedades críticas do sistema. Contudo, para dimensões espaciais menores ou igual a 3, é necessário pelo menos inserir o termo quártico para obter uma descrição justa do comportamento crítico do sistema. Como então fazer isso? Esse será o assunto dos capítulos seguintes.

11 Teoria de perturbação – correção quártica ao modelo Gaussiano

No capítulo anterior, ao acrescentar os termos de ordem m^n nós supusemos de forma implícita que eles não alteravam o ponto fixo. A partir daí, nós obtivemos as respectivas dimensões anômalas próximo ao ponto fixo mediante uma análise dimensional. Para $d < 4$, o termo quártico se mostrou uma perturbação relevante. Portanto, neste caso, deveríamos reavaliar os resultados do modelo Gaussiano, levando em conta de forma mais completa o termo quártico. Uma maneira de fazer isso é supor que ele, inicialmente, fornece uma pequena perturbação á hamiltoniana quadrática do modelo Gaussiano. A pergunta seguinte então é determinar, em ordem mais baixa, o seu efeito sobre o ponto fixo (pode ser que ele altera a posição do mesmo) e sobre os expoentes críticos. Será que ele modifica radicalmente os resultados do modelo Gaussiano?

Vamos responder a essa questão desenvolvendo a resposta em teoria de perturbação. Vamos tentar ser suficientemente gerais para poder posteriormente aproveitar alguns trechos desse desenvolvimento, quando estivermos tratando o grupo de renormalização de Wilson.

Seja $(\beta\mathcal{H})_0$ a hamiltoniana não-perturbada e U a perturbação, de modo que a hamiltoniana total seja $(\beta\mathcal{H}) = (\beta\mathcal{H})_0 + U$ No caso em questão,

$$(\beta\mathcal{H})_0 = \int d^d x \left\{ \frac{t}{2} [\vec{m}(\vec{x})]^2 + \frac{K}{2} [\nabla^2 \vec{m}(\vec{x})]^2 \right\} \quad (1)$$

e

$$U = u \int d^d x [\vec{m}(\vec{x})]^4. \quad (2)$$

(Vamos momentaneamente deixar de lado o termo linear relativo ao acoplamento com um campo externo.) Passando para a representação de Fourier (momento),

$$(\beta\mathcal{H})_0 = \frac{1}{L^d} \sum_{\vec{q}} \frac{t + Kq^2}{2} |\vec{m}_{\vec{q}}|^2 \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq^2)}{2} |\vec{m}_{\vec{q}}|^2 \quad (3)$$

e

$$U = \frac{u}{L^d} \sum_{\vec{q}_1} \sum_{\vec{q}_2} \sum_{\vec{q}_3} \sum_{\vec{q}_4} \delta_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4, 0} (\vec{m}_{\vec{q}_1} \cdot \vec{m}_{\vec{q}_2}) (\vec{m}_{\vec{q}_3} \cdot \vec{m}_{\vec{q}_4}). \quad (4)$$

Antes de nos lançarmos ao cálculo da média térmica de qualquer quantidade ou observável específico, vamos sistematizar a expansão perturbativa para uma quantidade genérica. Seja O essa quantidade, sendo que $O = O[\vec{m}(\vec{x})]$. Então,

$$\langle O \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\vec{m}(\vec{x}) O[\vec{m}(\vec{x})] e^{-(\beta\mathcal{H})[\vec{m}]}}{\int \mathcal{D}\vec{m}(\vec{x}) e^{-(\beta\mathcal{H})[\vec{m}]}}. \quad (5)$$

Expandindo em U : $e^{-U} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} U^n$, nós obtemos

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \frac{\int \mathcal{D}\vec{m}(\vec{x}) e^{-(\beta\mathcal{H})_0} O (1 - U + U^2/2! - \dots)}{\int \mathcal{D}\vec{m}(\vec{x}) e^{-(\beta\mathcal{H})_0} (1 - U + U^2/2! - \dots)} \\ &= \frac{Z_0 (\langle O \rangle_0 - \langle OU \rangle_0 + \langle OU^2 \rangle_0/2 + \dots)}{Z_0 (1 - \langle U \rangle_0 + \langle U^2 \rangle_0 + \dots)}, \end{aligned} \quad (6)$$

onde $Z_0 = \int \mathcal{D}\vec{m}(\vec{x}) e^{-(\beta\mathcal{H})_0}$ e

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\vec{m}(\vec{x}) \langle \dots \rangle e^{-(\beta\mathcal{H})_0}. \quad (7)$$

Expandindo o denominador da última linha da Eq. (6), nós obtemos

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \left[\langle O \rangle_0 - \langle OU \rangle_0 + \langle OU^2 \rangle_0/2 + \dots \right] \left[1 + \langle U \rangle_0 + \langle U \rangle_0^2 - \langle U^2 \rangle_0/2 + \dots \right] \\ &= \langle O \rangle_0 + \langle O \rangle_0 \langle U \rangle_0 - \langle OU \rangle_0 + \frac{1}{2} \langle OU^2 \rangle_0/2 - \langle OU \rangle_0 \langle U \rangle_0 - \langle O \rangle_0 \langle U^2 \rangle_0/2 + \langle O \rangle_0 \langle U \rangle_0^2 \\ &\quad + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \langle O \rangle^{(n)} \end{aligned} \quad (8)$$

onde

$$\langle O \rangle^{(0)} = \langle O \rangle_0, \quad (9)$$

$$\langle O \rangle^{(1)} = \langle OU \rangle_0 - \langle O \rangle_0 \langle U \rangle_0, \quad (10)$$

$$\langle O \rangle^{(2)} = \langle OU^2 \rangle_0 - 2\langle OU \rangle_0 \langle U \rangle_0 - \langle O \rangle_0 \langle U^2 \rangle_0 + 2\langle O \rangle_0 \langle U \rangle_0^2, \quad (11)$$

etc. Apesar de parecerem complicadas, essas expressões são bastante úteis. Elas nos dizem que se soubermos calcular valores esperados gaussianos (não perturbados), podemos sistematicamente determinar as correções em $\langle O \rangle$ até uma dada ordem no termo quártico.

Existe uma simplificação adicional que só vale pelo fato da hamiltoniana não perturbada ser quadrática e, portanto, a distribuição de probabilidade ser gaussiana. Seja $P[m_i]$ uma distribuição gaussiana nas variáveis $\{m_i\}$. Vale então que

$$\left\langle e^{\sum_i a_i m_i} \right\rangle_0 = e^{\frac{1}{2} \sum_{i,j} a_i a_j \langle m_i m_j \rangle}. \quad (12)$$

As desenvolvermos em série de Taylor as exponenciais em ambos os lados da equação acima e igualarmos os termos de mesma ordem em m (já que a igualdade vale para coeficientes $\{a_i\}$ arbitrários), nós obtemos

$$\langle m_i \rangle_0 = 0 \quad (13)$$

$$\langle m_i m_j m_k \rangle_0 = 0 \quad (14)$$

$$\langle m_i m_j m_k m_l \rangle_0 = \langle m_i m_j \rangle_0 \langle m_k m_l \rangle_0 + \langle m_i m_k \rangle_0 \langle m_j m_l \rangle_0 + \langle m_i m_l \rangle_0 \langle m_j m_k \rangle_0, \quad (15)$$

e assim por diante. Ou seja, médias de um número ímpar de fatores m_i é sempre nula, enquanto que se o número de fatores for par, devemos contrair os fatores em pares e somar sobre todas possíveis combinações. (Este resultado vem de um outro, mas geral, válido para teorias não gaussianas e denominado teorema de Wick.) Por exemplo, para o correlator $\langle \vec{m}(x) \cdot \vec{m}(y) \rangle$ nós temos que, até primeira ordem em u ,

$$\begin{aligned} \langle \vec{m}(x) \cdot \vec{m}(y) \rangle &= \langle \vec{m}(x) \cdot \vec{m}(y) \rangle_0 - u \int d^d z \left\{ \langle \vec{m}(x) \cdot \vec{m}(y) [\vec{m}(z)]^4 \rangle_0 \right. \\ &\quad \left. - \langle \vec{m}(x) \cdot \vec{m}(y) \rangle_0 \langle [\vec{m}(z)]^4 \rangle_0 \right\} + \dots \end{aligned} \quad (16)$$

Vamos desenvolver explicitamente o termo de primeira ordem que envolve a média sobre seis fatores \vec{m} :

$$\begin{aligned} \left\langle \vec{m}(x) \cdot \vec{m}(y) [\vec{m}(z)]^4 \right\rangle_0 &= \langle \vec{m}(x) \cdot \vec{m}(y) \rangle_0 \left\langle [\vec{m}(z)]^4 \right\rangle_0 \\ &+ 4 \sum_{\alpha, \beta} \langle m_\alpha(x) m_\beta(z) \rangle_0 \langle m_\alpha(y) m_\beta(z) \rangle_0 \langle \vec{m}(z) \cdot \vec{m}(z) \rangle_0 \\ &+ 8 \sum_{\alpha, \beta, \gamma} \langle m_\alpha(x) m_\beta(z) \rangle_0 \langle m_\alpha(y) m_\gamma(z) \rangle_0 \langle m_\beta(z) m_\gamma(z) \rangle_0. \end{aligned} \quad (17)$$

Note algo importante: os termos onde a perturbação (representada pelo fator $[\vec{m}(z)]^4$) se desacopla da quantidade $\vec{m}(x) \cdot \vec{m}(y)$ se cancelam exatamente. Somente termos onde há cruzamento entre a perturbação e o obserável são preservados. Ou seja,

$$\langle O \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \langle O \rangle^{(n)} \Big|_{\text{termos conexos}}. \quad (18)$$

Vamos voltar ao exemplo acima, do correlator. Será mais útil reformular o cálculo para a representação de momento, ou seja, determinar

$$\langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}) \rangle. \quad (19)$$

A partir desse termo podemos obter correções à susceptibilidade provenientes do termo quártico. Em primeira ordem, temos que determinar todos os termos conexos que entram em médias de seis fatores do tipo

$$\left\langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') m_i(\vec{q}_1) m_i(\vec{q}_2) m_j(\vec{q}_3) m_j(\vec{q}_4) \right\rangle_0. \quad (20)$$

Alguns desses termos são:

$$\langle m_\alpha(\vec{q}) m_i(\vec{q}_1) \rangle_0 \langle m_\beta(\vec{q}') m_i(\vec{q}_2) \rangle_0 \langle m_j(\vec{q}_3) m_j(\vec{q}_4) \rangle_0, \quad (21)$$

$$\langle m_\alpha(\vec{q}) m_i(\vec{q}_1) \rangle_0 \langle m_\beta(\vec{q}') m_j(\vec{q}_3) \rangle_0 \langle m_i(\vec{q}_2) m_j(\vec{q}_4) \rangle_0, \quad (22)$$

$$\langle m_\alpha(\vec{q}) m_i(\vec{q}_1) \rangle_0 \langle m_\beta(\vec{q}') m_j(\vec{q}_4) \rangle_0 \langle m_i(\vec{q}_2) m_j(\vec{q}_3) \rangle_0, \quad (23)$$

etc. O termo (21), por exemplo, dá a contribuição

$$\begin{aligned} &\int \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_2}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_3}{(2\pi)^d} \sum_{i,j} \delta_{\alpha,i} \delta_{\beta,i} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}_1) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}' + \vec{q}_2) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2) \\ &\times \frac{1}{(t + Kq^2)} \frac{1}{(t + Kq'^2)} \frac{1}{(t + Kq_3^2)} = (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}') \frac{n \delta_{\alpha,\beta}}{(t + Kq^2)^2} \int \frac{d^d q_3}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kq_3^2)}. \end{aligned} \quad (24)$$

(Não é difícil verificar que há três outros termos que dão exatamente a mesma contribuição em primeira ordem.) Já o termo (22) fornece

$$\begin{aligned} &\int \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_2}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_3}{(2\pi)^d} \sum_{i,j} \delta_{\alpha,i} \delta_{\beta,i} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}_1) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}' + \vec{q}_3) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}') \\ &\times \frac{1}{(t + Kq^2)} \frac{1}{(t + Kq'^2)} \frac{1}{(t + Kq_2^2)} = (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}') \frac{\delta_{\alpha,\beta}}{(t + Kq^2)^2} \int \frac{d^d q_2}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kq_2^2)}. \end{aligned} \quad (25)$$

(Novamente é fácil se convencer de que todo os outros sete termos restantes recaem em contribuições iguais a essa.) Juntando esses dois resultados, nós podemos escrever que

$$\begin{aligned} \langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle &= (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}') \delta_{\alpha,\beta} \left[\frac{1}{(t + Kq^2)} - \frac{4u(n+2)}{(t + Kq^2)^2} \int \frac{d^d q''}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kq''^2)} \right] \\ &+ \mathcal{O}(u^2). \end{aligned} \quad (26)$$

11.1 Representação diagramática

Não é difícil perceber que os cálculos ficariam bastante complicados se partíssemos para termos de segunda ordem. Na realidade, o procedimento de contração em pares se torna extremamente tedioso. Existe uma técnica muito mais interessante e eficiente para lidar com esse problema. Ela lança mão de uma representação diagramática (pictórica) dos vários elementos que compõem a expansão perturbativa. Em geral, é muito mais simples organizar a série desta maneira (visualmente) do que analiticamente, combinando contrações. A cada termo da série se associa um determinado diagrama (gráfico). A maneira como os diagramas são formados segue regras bastante simples e sistemáticas. Contudo, essa técnica não facilita necessariamente o cálculo matemático de cada termo em si, já que não “resolve” as integrais!

Vamos então tomar como ponto de partida a hamiltoniana não perturbada na representação de espaço de momento,

$$(\beta\mathcal{H})_0 = \int_0^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq^2)}{2} |\vec{m}_{\vec{q}}|^2, \quad (27)$$

e a perturbação

$$\begin{aligned} U &= \int d^d x [\vec{m}(\vec{x}) \cdot \vec{m}(\vec{x})]^2 \\ &= u \int \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_2}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_3}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4) \\ &\quad \times \sum_{i,j} m_i(\vec{q}_1) m_i(\vec{q}_2) m_j(\vec{q}_3) m_j(\vec{q}_4). \end{aligned} \quad (28)$$

Vamos lembrar que o valor esperado de uma certa quantidade O , expressa em termos do parâmetro de ordem $\vec{m}_{\vec{q}}$, pode ser expressa perturbativamente em termos de termos conexos [Eq. (18)]. Por exemplo, seja $O = \prod_{\alpha=1}^l m_{i_\alpha}(\vec{q}_\alpha)$. Nós podemos determinar *todos* os termos que contribuem em uma certa ordem p para $\langle O \rangle$ seguindo as regras abaixo:

1. Deseje l pontos externos, cada um especificado pelo par $(\vec{q}_\alpha, i_\alpha)$, e p vértices (veja definição abaixo), sendo que cada vértice também carrega o seu conjunto de momentos lineares e índices. Enquanto que por “ponto externo” entendemos literalmente pontos, os vértices são a representação gráfica do termo de perturbação da hamiltoniana, como mostra a Fig. 28. Eles têm quatro pernas terminadas em pontos. As pernas formam dois pares distintos interligados por uma linha tracejada.

Ou seja, de um lado temos os pontos externos e de outro lado os vértices (Fig. 29).

2. Usando linhas, junte os l pontos externos aos extremos dos p vértices de todas as formas possíveis que sejam topologicamente distintas. Vale juntar pontos externos uns aos outros, assim como fechar extremos das pernas dos vértices entre si.

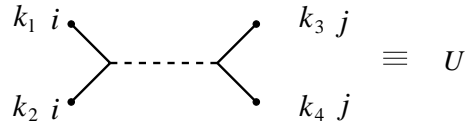


Figure 28: Vértice que representa a interação quártica.

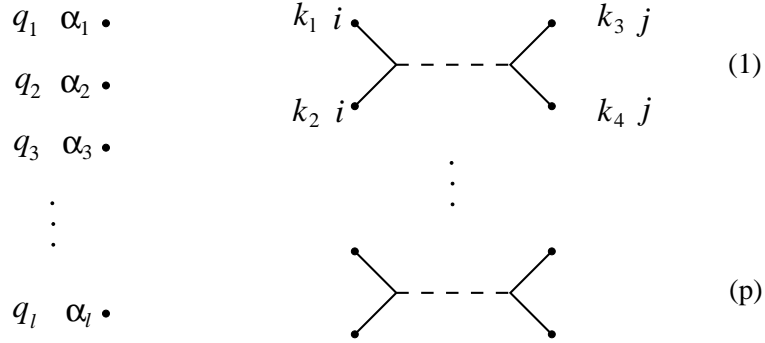


Figure 29: l pontos externos e p vértices.

3. Num dado diagrama, cada linha conectando dois pontos com índices e momentos (\vec{q}, i) e (\vec{q}', j) contribuindo com um fator

$$\frac{\delta_{i,j} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}')}{(t + Kq^2)}, \quad (30)$$

como mostra a Fig. 30. Esse elemento gráfico é usualmente chamado de propagador “nú” (por não conter em si nada relativo à perturbação).

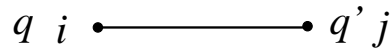


Figure 30: Propagador nú.

4. Cada vértice com a estrutura daquele mostrado na Fig. 28 contribue com um fator

$$u (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 + \vec{k}_4). \quad (31)$$

5. Cada diagrama leva um prefator numérico $(-1)^p \mathcal{N}/p!$, onde \mathcal{N} é o número de formas distintas de ligar pontos externos e vértices que produzem a mesma topologia (essa é, em geral, a etapa mais difícil em qualquer cálculo diagramático).
6. Integre sobre todos os $4p$ momentos lineares e índices internos e some sobre todos os $2p$ índices internos.
7. Somente considere diagramas conexos (em uma peça só).

Como ilustração, vamos trabalhar o valor esperado do correlator (propagador vestido)

$$\langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle. \quad (32)$$

Em ordem zero, esse correlator é exatamente igual ao propagador nú da Eq. (30). Em ordens superiores, insere-se vértices na linha conectando os dois extremos do propagador de todas as maneiras possíveis, como nos mostra a representação diagramática da Fig. 31.

$$\begin{aligned}
\overline{\overline{q\alpha}} \quad q'\beta &= \overline{q\alpha} \quad q'\beta && \text{(termo de ordem zero)} \\
+ & \begin{array}{c} k_2 i \quad k_3 j \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ k_1 i \quad k_4 j \end{array} && \text{(termo de ordem um)} \\
+ & \begin{array}{c} k_3 j \quad k_4 j \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ q\alpha \quad q'\beta \\ k_1 i \quad k_2 i \end{array} && \text{(termo de ordem um)} \\
+ & \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} && \text{(termo desconexo)} \\
+ & \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} && \text{(termo desconexo)} \\
+ & \mathcal{O}(u^2)
\end{aligned}$$

Figure 31: Série perturbativa para o propagador até primeira ordem.

Seguindo uma correspondência um-a-um com essa figura, nós temos que

$$\begin{aligned}
\langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle &= \frac{\delta_{\alpha,\beta} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}')}{(t + Kq^2)} \\
&+ (-8) \sum_{i,j} \int \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k_3}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k_4}{(2\pi)^d} \\
&u \times (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 + \vec{k}_4) \frac{\delta_{\alpha,i} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{k}_1)}{(t + Kq^2)} \\
&\times \frac{\delta_{i,j} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k}_2 + \vec{k}_3)}{(t + Kk_2^2)} \frac{\delta_{j,\beta} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k}_4 + \vec{q}')}{(t + Kq'^2)} \\
&+ (-4) \sum_{i,j} \int \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k_3}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k_4}{(2\pi)^d}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_3 + \vec{k}_4) \frac{\delta_{\alpha,i} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{k}_1)}{(t + Kq^2)} \\
& \times \frac{\delta_{j,j} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k}_3 + \vec{k}_4)}{(t + Kk_3^2)} \frac{\delta_{i,\beta} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k}_2 + \vec{q}')}{(t + Kq'^2)} \\
& + O(u^2). \tag{33}
\end{aligned}$$

Do lado direito da equação acima, o primeiro termo corresponde ao propagador nú (termo de ordem zero); os segundo e terceiro termos corresponde aos dois únicos diagramas conexos em primeira ordem. Levando as integrais e somas adiante os dois termos de primeira ordem, n'os conseguimos reduzi-los à mesma expressão (salvo por prefatores diferentes). O resultado final é

$$\begin{aligned}
\langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle &= \delta_{\alpha,\beta} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}') \left[\frac{1}{(t + Kq^2)} - \frac{4u(n+2)}{(t + Kq^2)^2} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)} \right. \\
& \left. + O(u^2) \right]. \tag{34}
\end{aligned}$$

Compare este resultado com aquele obtido de forma analítica, Eq. (26), desenvolvendo as contrações de todos os termos de valores esperados de produtos de m 's. São exatamente iguais.

Note como o fator $(2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}')$ é comum tanto à contribuição de ordem zero, como de primeira ordem. De fato, ele deve aparecer em todos as ordens pelo simples fato de ser uma manifestação da invariância de translação no sistema. Para entender isso, vamos reescrever o correlator em termos de sua forma no espaço real,

$$\langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle = \int d^d x \int d^d x' e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} e^{-i\vec{q}'\cdot\vec{x}'} \langle m_\alpha(\vec{x}) m_\beta(\vec{x}') \rangle. \tag{35}$$

Como $\langle m_\alpha(\vec{x}) m_\beta(\vec{x}') \rangle = f_{\alpha\beta}(\vec{x} - \vec{x}')$ somente, nós podemos fazer a mudança de variáveis $\vec{x} \equiv \vec{X} - \vec{s}/2$ e $\vec{x}' \equiv \vec{X} + \vec{s}/2$. Segue então que

$$\begin{aligned}
\langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle &= \int d^d X e^{-i\vec{X}\cdot(\vec{q}+\vec{q}')} \int d^d s f_{\alpha\beta}(\vec{s}) e^{-i\vec{s}\cdot(\vec{q}-\vec{q}')/2} \\
&= (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}') \int d^d s f_{\alpha\beta}(\vec{s}) e^{-i\vec{s}\cdot\vec{q}}. \tag{36}
\end{aligned}$$

Além disso, como em geral o sistema também é isotrópico, segue que $f_{\alpha\beta}(\vec{s}) = \delta_{\alpha,\beta} f(\vec{s})$.

Vamos agora utilizar esses resultados para determinar a correção em primeira ordem à susceptibilidade linear devido ao termo quártico. Lembrando que, pelo teorema flutuação-dissipação,

$$\begin{aligned}
\chi_{\alpha\beta} &= \int d^d x \langle m_\alpha(\vec{y} + \vec{x}) m_\beta(\vec{y}) \rangle \\
&= \int d^d x e^{i\vec{q}\cdot(\vec{y}+\vec{x})} e^{i\vec{q}'\cdot\vec{y}} \langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle \\
&= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} \delta^{(d)}(\vec{q}) \langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle. \tag{37}
\end{aligned}$$

Chamando

$$\langle m_\alpha(\vec{q}) m_\beta(\vec{q}') \rangle = (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q} + \vec{q}') \delta_{\alpha,\beta} \tilde{\chi}(\vec{q}), \quad (38)$$

nós temos que $\chi_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha,\beta} \tilde{\chi}(0)$, onde a susceptibilidade dependente do momento é igual a

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}(\vec{q}) &= \frac{1}{t + Kq^2} \left[1 - \frac{4u(n+2)}{t + Kq^2} \int \frac{d^d q''}{(2\pi)^d} \frac{1}{t + Kq''^2} \right] \\ &\approx \left[t + Kq^2 + 4u(n+2) \int \frac{d^d q''}{(2\pi)^d} \frac{1}{t + Kq''^2} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (39)$$

usando o fato de que u é pequeno e negligenciando erros em ordem $\mathcal{O}(u^2)$. Note que

$$[\tilde{\chi}(0)]^{-1} \approx t + 4u(n+2) \int \frac{d^d q''}{(2\pi)^d} \frac{1}{t + Kq''^2}, \quad (40)$$

sendo que a integral em momento é igual a outras encontradas em capítulos anteriores,

$$\int \frac{d^d q''}{(2\pi)^d} \frac{1}{t + Kq''^2} = \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_0^\Lambda \frac{dq q^{d-1}}{t + Kq^2}. \quad (41)$$

Para $t=0$, nós obtemos

$$[\tilde{\chi}(0)]^{-1} \approx \frac{4u(n+2)S_d}{(2\pi)^d K} \int_0^\Lambda dq q^{d-3} = \frac{4u(n+2)S_d}{(2\pi)^d K} \left(\frac{\Lambda^{d-2}}{d-2} \right). \quad (42)$$

Onde queremos chegar com isso? Simples: a inclusão da perturbação quártica em primeira ordem retirou a divergência na susceptibilidade em $t = 0$ que ocorria anteriormente no limite termodinâmico ($d > 3$). Em outras palavras, $t = 0$ não assinala mais a temperatura crítica. Nós podemos determinar onde está a nova temperatura crítica, t_c , impondo que $[\tilde{\chi}(0)]^{-1} = 0$. Obviamente, resultado, em primeira ordem, é

$$t_c = -\frac{4u(n+2)S_d}{(2\pi)^d K} \left(\frac{\Lambda^{d-2}}{d-2} \right) \quad (43)$$

para $d > 2$. Um dos efeitos da inclusão do termo quártico é, em primeira ordem, baixar a temperatura crítica. Haveria algum outro efeito? Vamos determinar como a susceptibilidade diverge próximo à nova temperatura crítica:

$$\begin{aligned} \delta\tilde{\chi}^{-1}(0) &= [\tilde{\chi}(0)]^{-1} \Big|_t - [\tilde{\chi}(0)]^{-1} \Big|_{t_c} \\ &= t - t_c + 4u(n+2) \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[\frac{1}{t + Kq^2} - \frac{1}{t_c + Kq^2} \right] + \mathcal{O}(u^2) \\ &= (t - t_c) \left[1 - 4u(n+2) \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t_c + Kq^2)(t + Kq^2)} \right] + \mathcal{O}(u^2) \\ &\approx (t - t_c) \left[1 - \frac{4u(n+2)}{K^2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2(q^2 + \xi^{-2})} \right] + \mathcal{O}(u^2), \end{aligned} \quad (44)$$

onde $\xi^{-2} = t/K \approx (t - t_c)/K$. A integral em q remanescente pode facilmente ser calculada:

$$\begin{aligned} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2(q^2 + \xi^{-2})} &= \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_{2\pi/L}^{\Lambda} \frac{dq q^{d-3}}{q^2 + \xi^{-2}} \\ &= \begin{cases} \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_{\xi^{-1}}^{\Lambda} dq q^{d-5} \approx \frac{S_d}{(2\pi)^d} \frac{\Lambda^{d-4}}{(d-4)} \sim a^{4-d}, & (d > 4) \\ \frac{S_d}{(2\pi)^d} \int_0^{\infty} \frac{dq q^{d-3}}{q^2 + \xi^{-2}} \sim \xi^{d-4} \sim t^{(d-4)/2}, & (2 < d < 4) \end{cases} \end{aligned} \quad (45)$$

Assim, nós concluímos que, se por um lado, quando $d > 4$, há somente uma renormalização da amplitude na divergência da susceptibilidade (continua valendo $\gamma = 1$), algo mais drástico ocorre em $d < 4$,

$$\delta\tilde{\chi}^{-1}(0) = (t - t_c) \left[1 - u(t - t_c)^{(d-4)/2} \right] + \mathcal{O}(u^2). \quad (46)$$

Suficientemente próximo à transição, o termo perturbativo cresce e eventualmente supera o termo de ordem zero! Nessas situações, a expansão perturbativa deixa de ter sentido e nós temos que repensar o problema. Ou seja, aparentemente a nossa teoria de perturbação indica que, a dimensões menores do que 4, o termo quártico pode alterar substancialmente os resultados obtidos no modelo Gaussiano. A própria expansão perturbativa deixa de ter sentido quando estamos muito próximos à transição. Aparentemente não evoluímos muito e voltamos a encontrar problemas, se bem que um tanto formais, num certo sentido similares àqueles já vistos na aproximação de ponto de sela da teoria de Landau-Ginzburg.

Na realidade essa nova divergência poderia ser antecipada por um simples argumento de escala. Toda teoria de perturbação é baseada na existência de algum parâmetro adimensional pequeno sobre o qual podem ser feitas expansões. No nosso caso, deve haver alguma combinação entre os coeficientes da hamiltoniana efetiva (u , t e K) que desempenha esse papel de pequeno parâmetro. Certamente ele deve ser proporcional a u , uma vez que é o termo quártico que faz o papel de perturbação. A idéia então é combinar a u juntamente t e K de modo a formar um parâmetro adimensional (que chamaremos de \tilde{u}). Um bom candidato é

$$\tilde{u} = u t^x K^y, \quad (47)$$

onde x e y são expoentes a serem determinados. Como \tilde{u} é um número puro, ele não pode ser afetado pelo processo de renormalização. Assim, como $t' = b^d \zeta^2 t$, $K' = b^{d-2} \zeta^2 K$ e $u' = b^d \zeta^4 u$, nós necessariamente temos que

$$x = \frac{d-4}{2} \quad \text{e} \quad y = -\frac{d}{2}. \quad (48)$$

Portanto,

$$\tilde{u} = u t^{(d-4)/2} K^{-d/2}. \quad (49)$$

Note que para $d < 4$ o parâmetro adimensional de expansão diverge quando $t \rightarrow 0$. Como \tilde{u} deixa de ser “pequeno”, a própria teoria de perturbação não faz mais sentido.

Como resolver esse problema e finalmente chegar a uma formulação que nos livre desse tipo de problema? Esse será o assunto do próximo capítulo.

12 Grupo de Renormalização de Wilson – expansão em ϵ

O problema básico da teoria de perturbação apresentada no capítulo anterior é que ela na verdade não levava em conta o procedimento do grupo de renormalização. Ou seja, graus de liberdade relativos a flutuações em curtas distâncias, espúrios ao comportamento crítico no limite termodinâmico, não foram sistematicamente retirados. Os termos provenientes da expansão perturbativa não foram submetidos aos processos de granulação grosseira, reescalonamento espacial e renormalização da magnitude do parâmetro de ordem.

Combinar o procedimento padrão do grupo de renormalização à teoria de perturbação de forma consistente evita as divergências encontradas no capítulo anterior em $d < 4$. Vamos então nos lançar a essa empreitada!

12.1 Granulação grosseira

Vamos separar as componentes rápidas (comprimentos de onda pequenos) das flutuações do parâmetro de ordem daquelas lentas (comprimentos de onda longos):

$$\vec{m}(\vec{q}) = \vec{\tilde{m}}(\vec{q}) + \vec{\sigma}(\vec{q}), \quad (1)$$

sendo que

$$\vec{\tilde{m}}(\vec{q}) = \begin{cases} \vec{m}(\vec{q}), & 0 < |\vec{q}| < \Lambda/b, \\ 0, & \Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda \end{cases} \quad (2)$$

e

$$\vec{\sigma}(\vec{q}) = \begin{cases} 0, & 0 < |\vec{q}| < \Lambda/b, \\ \vec{m}(\vec{q}), & \Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda. \end{cases} \quad (3)$$

A idéia agora é eliminar da teoria efetiva do problema os graus de liberdade rápidos, $\vec{\sigma}$. Em espaço real, isso significa substituir o parâmetro de ordem num dado ponto pela sua média local numa vizinhança de largura ab , onde $b > 1$ (fator de reescalonamento) e $a = \pi/\Lambda$ é a resolução espacial inicial da teoria. Escrevendo a função de partição em termos de $\vec{\tilde{m}}$ e $\vec{\sigma}$, nós temos

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}\vec{\tilde{m}}(\vec{q}) \int \mathcal{D}\vec{\sigma}(\vec{q}) \exp \left\{ - \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq^2)}{2} |\vec{\tilde{m}}(\vec{q})|^2 - \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq^2)}{2} |\vec{\sigma}(\vec{q})|^2 \right. \\ &\quad \left. - U[\vec{\tilde{m}}, \vec{\sigma}] \right\} \\ &= e^{-L^d \delta f_b(t)} \int \mathcal{D}\vec{\tilde{m}}(\vec{q}) \exp \left\{ - \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq^2)}{2} |\vec{\tilde{m}}(\vec{q})|^2 \right\} \langle e^{-U[\vec{\tilde{m}}, \vec{\sigma}]} \rangle_{\sigma}, \end{aligned} \quad (4)$$

onde

$$e^{-L^d \delta f_b(t)} = \int \mathcal{D}\vec{\sigma}(\vec{q}) \exp \left\{ - \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq^2)}{2} |\vec{\sigma}(\vec{q})|^2 \right\} = e^{-\frac{L^d n}{2} \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \ln(t + Kq^2)} \quad (5)$$

e

$$\langle O \rangle_{\sigma} = e^{L^d \delta f_b(t)} \int \mathcal{D}\vec{\sigma}(\vec{q}) O \exp \left\{ - \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq^2)}{2} |\vec{\sigma}(\vec{q})|^2 \right\}. \quad (6)$$

Nós podemos agora embutir os graus de liberdade rápidos numa redefinição da hamiltoniana efetiva do problema, onde só há menção explícita aos graus de liberdade lentos,

$$Z = \int \mathcal{D}\vec{m} e^{-(\beta\tilde{H})[\vec{m}]}, \quad (7)$$

onde

$$(\beta\tilde{H})[\vec{m}] = \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(t + Kq^2)}{2} |\vec{m}(\vec{q})|^2 - \ln \langle e^{-U[\vec{m}, \vec{\sigma}]} \rangle_\sigma + L^d \delta f_b(t). \quad (8)$$

Note que a interação quártica acopla graus de liberdade rápidos e lentos, ao contrário do termo quadrático, onde eles aparecem desacoplados. Vamos expandir o termo proveniente da interação quártica em série de potências em U ,

$$\begin{aligned} \ln \langle e^{-U} \rangle_\sigma &= \ln \left\langle 1 - U + \frac{1}{2!} U^2 - \frac{1}{3!} U^3 + \dots \right\rangle_\sigma \\ &= \ln \left[1 - \langle U \rangle_\sigma + \frac{1}{2!} \langle U^2 \rangle_\sigma - \frac{1}{3!} \langle U^3 \rangle_\sigma + \dots \right] \\ &= -\langle U \rangle_\sigma + \frac{1}{2} \langle U^2 \rangle_\sigma - \frac{1}{2} \langle U \rangle_\sigma^2 - \frac{1}{6} \langle U^3 \rangle_\sigma + \frac{1}{2} \langle U \rangle_\sigma \langle U^2 \rangle_\sigma - \frac{1}{6} \langle U \rangle_\sigma^3 + \dots \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l!} \langle U^l \rangle_\sigma \Big|_{\text{cum.}}, \end{aligned} \quad (9)$$

onde os cumulantes, em ordem crescente, são definidos como

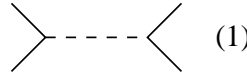
$$\langle U \rangle_\sigma \Big|_{\text{cum.}} = \langle U \rangle_\sigma, \quad (10)$$

$$\langle U^2 \rangle_\sigma \Big|_{\text{cum.}} = \langle U^2 \rangle_\sigma - \langle U \rangle_\sigma^2, \quad (11)$$

$$\langle U^3 \rangle_\sigma \Big|_{\text{cum.}} = \langle U^3 \rangle_\sigma - 3\langle U \rangle_\sigma \langle U^2 \rangle_\sigma + 2\langle U \rangle_\sigma^3, \quad (12)$$

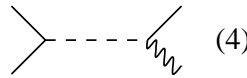
e assim por diante. Organizando a série dessa forma nós passamos a ter que determinar valores esperados (médias em σ) de potências da perturbação, algo muito semelhante ao que fizemos no capítulo anterior. A diferença agora está no fato de que os valores esperados são calculados somente com relação aos graus de liberdade rápidos (σ). Para sistematizar as coisas, vamos introduzir uma representação diagramática da série. Estaremos então interessados em fazer contrações que envolvam somente os campos “rápidos” σ . Para tal, será importante distinguir graficamente os propagadores de \tilde{m} (linhas retas) daqueles de σ (linhas onduladas). Obviamente, teremos também um número maior de possibilidades para os vértices:

$$1. \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4)$$



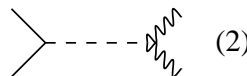
(1)

$$2. \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{\sigma}(\vec{q}_4)$$



(4)

$$3. \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{\sigma}(\vec{q}_3) \cdot \vec{\sigma}(\vec{q}_4)$$



(2)

$$\begin{aligned}
4. \quad & \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{\sigma}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{\sigma}(\vec{q}_4) && \begin{array}{c} \diagup \text{---} \text{---} \diagdown \\ \text{wavy} \text{---} \text{---} \text{wavy} \end{array} \quad (4) \\
5. \quad & \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{\sigma}(\vec{q}_2) \vec{\sigma}(\vec{q}_3) \cdot \vec{\sigma}(\vec{q}_4) && \begin{array}{c} \diagup \text{---} \text{---} \text{wavy} \\ \text{wavy} \text{---} \text{---} \text{wavy} \end{array} \quad (4) \\
6. \quad & \vec{\sigma}(\vec{q}_1) \cdot \vec{\sigma}(\vec{q}_2) \vec{\sigma}(\vec{q}_3) \cdot \vec{\sigma}(\vec{q}_4) && \begin{array}{c} \text{wavy} \text{---} \text{---} \text{wavy} \\ \text{wavy} \text{---} \text{---} \text{wavy} \end{array} \quad (1)
\end{aligned}$$

O número entre parênteses indica a multiplicidade de cada diagrama. Como os diagramas 2. e 5. contêm um número ímpar de σ 's, eles não contribuem para o valor médio:

$$\begin{aligned}
1. \quad & \langle \text{---} \text{---} \rangle_{\sigma} = U[\vec{m}, 0] \\
2. \quad & \langle \text{---} \text{---} \rangle_{\sigma} = 0 \\
3. \quad & \langle \text{---} \text{---} \rangle_{\sigma} = \text{---} \text{---} \text{---} \\
4. \quad & \langle \text{---} \text{---} \rangle_{\sigma} = \text{---} \text{---} \text{---} \\
5. \quad & \langle \text{---} \text{---} \rangle_{\sigma} = 0 \\
6. \quad & \langle \text{---} \text{---} \rangle_{\sigma} = \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} = -u L^d \delta f_b^{(1)}(t)
\end{aligned}$$

Os diagramas 3. e 4. fornecem, respectivamente, as seguintes contribuições:

$$-2nu \int \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_2}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_3}{(2\pi)^d} \frac{(2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2)}{(t + K q_3^2)} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \quad (13)$$

e

$$-4u \int \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_2}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d q_3}{(2\pi)^d} \frac{(2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_3)}{(t + K q_2^2)} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_3). \quad (14)$$

Juntando tudo, podemos então escrever que

$$(\beta\tilde{H})[\vec{m}] = L^d \left[\delta f^{(0)} + u \delta f^{(1)} \right] + \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{(\tilde{t} + Kq^2)}{2} |\vec{m}(\vec{q})|^2 - U[\vec{m}, 0] + O(u^2), \quad (15)$$

onde \tilde{t} absorveu as contribuições provenientes do diagrama 1. (de ordem zero, o próprio parâmetro t) e dos diagramas 3. e 4.,

$$\tilde{t} = t + 2u(n+2) \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kq^2)}. \quad (16)$$

É importante salientar que esse “deslocamento” (redefinição) de t devido à retirada de graus de liberdade rápidos (pequenos comprimentos de onda) não havia sido levando em conta no cálculo perturbativo do capítulo anterior.

12.2 Reescalamento

Vamos agora reescalonar comprimentos (distâncias) e momentos lineares pelo fator $b > 1$,

$$|\vec{x}| \longrightarrow |\vec{x}'| = |\vec{x}|/b \quad (17)$$

e

$$|\vec{q}| \longrightarrow |\vec{q}'| = b|\vec{q}|, \quad (18)$$

de tal forma que, para os modos lentos, nós passamos a ter \vec{q} tal que $|\vec{q}| < \Lambda$. Assim,

$$\begin{aligned} (\beta\tilde{H})[\vec{m}] &= L^d \left[\delta f^{(0)} + u \delta f^{(1)} \right] + \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} \frac{(b^{-d}\tilde{t} + b^{-d-2}Kq'^2)}{2} |\vec{m}(\vec{q}')|^2 - b^{-3d}U[\vec{m}, 0] \\ &\quad + O(u^2). \end{aligned} \quad (19)$$

12.3 Renormalização

Passamos agora para a renormalização da magnitude do parâmetro de ordem,

$$|\vec{m}| \longrightarrow |\vec{m}'| = |\vec{m}|/\bar{\zeta}, \quad (20)$$

de tal forma que

$$\begin{aligned} (\beta\mathcal{H})'[\vec{m}'] &= L^d \left[\delta f^{(0)} + u \delta f^{(1)} \right] + \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} \frac{(t' + K'q'^2)}{2} |\vec{m}'(\vec{q}')|^2 \\ &\quad - u' \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'_1}{(2\pi)^d} \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'_2}{(2\pi)^d} \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'_3}{(2\pi)^d} \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'_4}{(2\pi)^d} (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}'_1 + \vec{q}'_2 + \vec{q}'_3 + \vec{q}'_4) \\ &\quad \times [\vec{m}'(\vec{q}'_1) \cdot \vec{m}'(\vec{q}'_2)] [\vec{m}'(\vec{q}'_3) \cdot \vec{m}'(\vec{q}'_4)] + O(u^2), \end{aligned} \quad (21)$$

onde

$$t' = \bar{\zeta}^2 b^{-d} \tilde{t} \quad (22)$$

$$K' = \bar{\zeta}^2 b^{-d-2} K \quad (23)$$

$$u' = \bar{\zeta}^4 b^{-3d} u. \quad (24)$$

Vamos agora escolher $\bar{\zeta}$ de modo que $K' = K$ (à semelhança do que fizemos anteriormente no modelo gaussiano). Segue então que $\bar{\zeta} = b^{1+d/2}$ e

$$t' = b^2 \left[t + 4u(n+2) \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{t + Kq^2} \right] \quad (25)$$

$$u' = b^{4-d} u. \quad (26)$$

Estas relações definem um novo mapeamento entre parâmetros da teoria antes e depois da aplicação do grupo de renormalização. Veja como elas têm uma estrutura mais intrincada do que no caso puramente gaussiano (não perturbado). Para destrinchar o que se passa, vamos supor que as transformações sejam na realidade infinitesimais: $b = 1 + l \approx e^l$, com $0 < l \ll 1$. Podemos reescrever as equações acima na forma

$$t' = t(l) = t(0) + l \left(\frac{dt}{dl} \right)_{l=0} + \dots \quad (27)$$

$$u' = u(l) = u(0) + l \left(\frac{du}{dl} \right)_{l=0} + \dots, \quad (28)$$

onde $t(0) = t$, $u(0) = u$ e

$$t + l \left(\frac{dt}{dl} \right)_{l=0} = e^{2l} \left[t + 4u(n+2) \frac{S_d \Lambda^d l}{(2\pi)^d (t + K \Lambda^2)} \right] \quad (29)$$

$$u + l \left(\frac{du}{dl} \right)_{l=0} = e^{(4-d)l} u. \quad (30)$$

Nas equações acima nós substituímos a integral sobre a casca esférica de raio Λ e espessura (infinitesimal) $l\Lambda$ pelo integrando (calculado no ponto $q = \Lambda$) vezes o volume da casca. Nós podemos em seguida expandir o lado direito das Eqs. (29) e (30) e, usando as Eqs. (27) e (28), obter, próximo a $t = u = 0$,

$$\frac{dt}{dl} = 2t + \frac{4u(n+2)S_d \Lambda^{d-2}}{(2\pi)^d K} \quad (31)$$

$$\frac{du}{dl} = (4-d)u. \quad (32)$$

Estas equações são usualmente denominados equações de fluxo do grupo de renormalização (pense nelas como se l fosse uma espécie de tempo). Nesta formulação fica claro que há problemas quando $d < 4$, pois nesse caso o parâmetro que controla a perturbação, u , cresce a cada nova iteração do grupo de renormalização ($du/dl > 0$). O ponto ($t = 0, u = 0$) continua sendo um ponto fixo da teoria. Vamos estudar o que acontece em sua vizinhança linearizando as equações de fluxo em torno dele e determinando as direções principais (se relevantes ou irrelevantes):

$$\frac{d}{dl} \begin{pmatrix} t \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & A \\ 0 & 4-d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ u \end{pmatrix}, \quad (33)$$

onde $A = 4(n+2)S_d \Lambda^{d-2}/(2\pi)^d K$. Os autovalores da matriz de transformação são $\lambda_1 = 2$ e $\lambda_2 = 4-d$ e os seus respectivos autovetores (ortonormalizados) são

$$\theta_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \theta_2 = \frac{1}{\sqrt{A^2 + (2-d)^2}} \begin{pmatrix} 2-d \\ A \end{pmatrix}. \quad (34)$$

É bastante útil e usual representar essas direções e as linhas de fluxo relativas às Eqs. (31) e (32) graficamente como na Fig. 32.

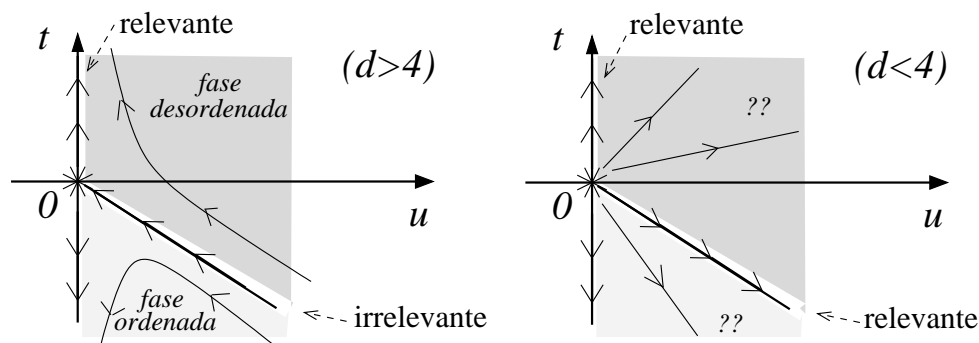


Figure 32: Diagrama de fluxo do grupo de renormalização para o modelo gaussiano na presença de uma perturbação quártica (resultado em primeira ordem).

No caso em que $d > 4$, o ponto fixo $t^* = u^* = 0$ (gaussiano) controla completamente o comportamento crítico e os expoentes podem ser identificados a partir do resultado $y_t = \lambda_1 = 2 > 0$ (relevante) e $y_u = \lambda_2 = 4 - d < 0$ (irrelevante).

Já no caso em que $d < 4$, a direção θ_2 também é relevante ($\lambda_2 > 0$). Nada pode então ser dito a respeito da transição. Além do ponto fixo gaussiano localizado na origem, é possível que exista um segundo ponto fixo, com $t^* \neq 0$ e $u^* \neq 0$ que controle de fato o comportamento crítico do sistema sempre que iniciarmos o procedimento do grupo de renormalização a partir de uma situação em que $u \neq 0$. Ao redor desse novo ponto fixo os expoentes poderão diferir daqueles obtidos para o ponto fixo gaussiano.

Para determinar se existe ou não esse segundo ponto fixo, precisamos ir além do termo de primeira ordem na nossa expansão perturbativa. Com sorte, já em segunda ordem conseguiremos obter um novo conjunto de equações de fluxo em que haja uma solução estacionária (ponto fixo) além do gaussiano. Claro, pode ser que isso não funcione (felizmente não será o nosso caso aqui!) e tenhamos que seguir calculando termos de terceira, quarta ordem, etc. Outra preocupação que devemos ter em mente é que esse novo ponto fixo (t^*, u^*) deverá estar localizado dentro da região no espaço tu coberta pelo raio de convergência da série perturbativa. Em outras palavras, t^* e u^* devem ser suficientemente pequenos de forma que sejam alcançáveis perturbativamente a partir de $(0, 0)$.

12.4 Cálculo em segunda ordem

Devemos agora levar em conta as contribuições provenientes do termo

$$\frac{(-1)^2}{2!} \langle U^2 \rangle_{\sigma} \Big|_{\text{cum.}} . \quad (35)$$

Na linguagem diagramática, as únicas contribuições relevantes são aqueles onde existem dois vértices (segunda ordem em u) ligados numa só peça (diagramas conexos). As linhas onduladas, relativas ao campo “rápido” $\vec{\sigma}(\vec{q})$, devem estar contraídas, enquanto que as linhas retas, correspondentes ao campo “lento” $\vec{m}(\vec{q})$, devem estar livres (abertas externamente). A maneira mais fácil de levantar todas as possibilidades é cruzando vértices numa tabela (matrix) 6×6 , como mostra a figura a seguir.

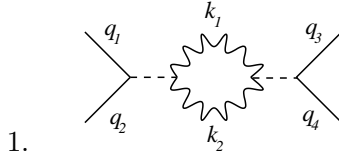
	desconexo	desconexo (0)	desconexo	desconexo	desconexo (0)	desconexo
	desconexo (0)	 (m^6)	0	0	 	0
	desconexo	0	 $2 \times 2 \times 2 \times n$ (m^4)	 $4 \times 2 \times 2$ (m^4)	0	 (m^2)
	desconexo	0	 $4 \times 2 \times 2$ (m^4)	 $4 \times 4 \times 2$ (m^4)	0	 (m^2)
	desconexo (0)	 	0	0	 (m^2)	0
	desconexo	0	 (m^2)	 (m^2)	0	 $u^2 \delta f_b^{(2)}(t)$

Figure 33: Tabela contendo todas as possibilidades de contração entre dois vértices da perturbação quártica.

Note os seguintes aspectos:

1. a tabela é simétrica;
2. há uma linha e uma coluna inteiras de diagramas desconexos;
3. quando o número total de linhas onduladas é ímpar, as contrações em σ dão zero;
4. aparece um termo proporcional a \tilde{m}^6 que não existia na hamiltoniana original;
5. há um termo que contribui com uma constante (independente de \tilde{m}).

Vamos nos concentrar nas contribuições de ordem quártica inicialmente (ou seja, proporcionais a \tilde{m}^4). Elas são:

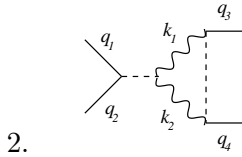


$$\begin{aligned}
&= \frac{u^2}{2} 8n \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4) \\
&\quad \times \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk_1^2)} \frac{1}{(t + Kk_2^2)} \\
&\quad \times (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_3 + \vec{q}_4 + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \\
&= 4nu^2 \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4) \\
&\quad \times \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)} \frac{1}{[t + K(\vec{k} + \vec{q}_1 + \vec{q}_2)^2]}. \tag{36}
\end{aligned}$$

Note que, como, tipicamente, $|\vec{k}| \gg |\vec{q}_1 + \vec{q}_2|$, nós podemos fazer usar a aproximação

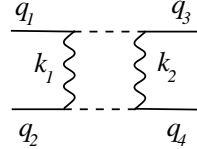
$$\frac{1}{[t + K(\vec{k} + \vec{q}_1 + \vec{q}_2)^2]} \approx \frac{1}{(t + Kk^2)} - \frac{2\vec{k} \cdot (\vec{q}_1 + \vec{q}_2)}{(t + Kk^2)^2} + O(q^2). \tag{37}$$

O termo linear em q desaparece após a integração. Daqui por diante, vamos desprezar contribuições de ordem $O(q^2)$ ao termo quártico.



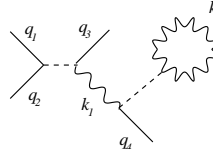
$$\begin{aligned}
&= \frac{u^2}{2} 16 \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4) \\
&\quad \times \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk_1^2)} \frac{1}{(t + Kk_2^2)} \\
&\quad \times (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_3 + \vec{q}_4 + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \\
&= 8u^2 \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4) \\
&\quad \times \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)} \frac{1}{[t + K(\vec{k} + \vec{q}_1 + \vec{q}_2)^2]}. \tag{38}
\end{aligned}$$

Este termo é igual ao anterior, a menos do prefator.

3. 

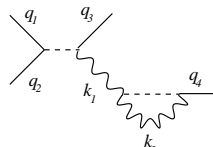
$$\begin{aligned}
&= \frac{u^2}{2} 32 \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4) \\
&\quad \times \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk_1^2)} \frac{1}{(t + Kk_2^2)} \\
&\quad \times (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_3 + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_2 + \vec{q}_4 + \vec{k}_1 + \vec{k}_2) \\
&= 16u^2 \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4) \\
&\quad \times \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)} \frac{1}{[t + K(\vec{k} + \vec{q}_1 + \vec{q}_3)^2]}. \tag{39}
\end{aligned}$$

Este termo não é exatamente igual aos anteriores. Contudo, ao expandirmos o integrando em \vec{k} em potências crescentes de $\vec{q}_1 + \vec{q}_3$ e mantermos somente a contribuição de ordem zero, o resultado é uma expressão igual às anteriores, a menos novamente do prefator numérico.

4. 

$$\begin{aligned}
&= \frac{u^2}{2} 16n \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4) \\
&\quad \times \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk_1^2)} \frac{1}{(t + Kk_2^2)} \\
&\quad \times (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}_1 + \vec{q}_3 + \vec{q}_3 + \vec{k}_1) (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{k}_1 + \vec{q}_4) \\
&= 0, \tag{40}
\end{aligned}$$

uma vez que $|\vec{k}_1| > \Lambda/b$, mas $|\vec{q}_4| < \Lambda/b$ (ou seja, a menos de um conjunto de medida nula em d dimensões, o argumento da última função delta é sempre não nulo).

5. 

$$= 0, \tag{41}$$

em analogia ao item anterior.

São muitos os diagramas que contribuem em segunda ordem para o termo quadrático (\tilde{m}^2). Para nós, bastará dizer que eles podem ser aglutinados e representados por um único termo,

$$\frac{u^2}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} |\vec{m}(\vec{q})|^2 B_b(t, K, q), \quad (42)$$

onde $B_b(t, K, q)$ é uma (possivelmente complicada) função dos coeficientes t e K e do momento \vec{q} .

Vamos agora juntar tudo e escrever a hamiltoniana efetiva resultante da granulação grosseira (eliminação dos graus de liberdade “rápidos”), mantendo somente os termos semelhantes aos originais, i.e., desprezando termos do tipo \tilde{m}^6 , $\tilde{m}^2(\nabla\vec{m})^2$, etc.. Obtemos então

$$\begin{aligned} (\beta\tilde{\mathcal{H}}) &= L^d \left[\delta f_b^{(0)}(t) + \delta f_b^{(1)}(t) + \delta f_b^{(2)}(t) \right] \\ &+ \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \left[\frac{t + Kq^2}{2} + 2u(n+2) \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)} - \frac{u^2}{2} B_b(t, K, q) \right] \\ &+ \left[u - 4(n+8)u^2 \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)^2} \right] \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda/b} \frac{d^d q_4}{(2\pi)^d} \\ &\times \vec{m}(\vec{q}_1) \cdot \vec{m}(\vec{q}_2) \vec{m}(\vec{q}_3) \cdot \vec{m}(\vec{q}_4) + O(u^3, u^2\tilde{m}^6, u^2q^2\tilde{m}^4, \text{etc.}). \end{aligned} \quad (43)$$

Seguindo o procedimento usual do grupo de renormalização, devemos reescalonar \vec{q} e renormalizar \tilde{m} , de modo que

$$\vec{q} \longrightarrow \vec{q}' = \vec{q}/b \quad (44)$$

e

$$\tilde{m} \longrightarrow m' = \tilde{m}/\bar{\zeta}. \quad (45)$$

Passamos então a ter a seguinte hamiltoniana efetiva renormalizada

$$\begin{aligned} (\beta\mathcal{H})' &= L^d \left[\delta f_b^{(0)}(t) + \delta f_b^{(1)}(t) + \delta f_b^{(2)}(t) \right] + \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'}{(2\pi)^d} \frac{(t' + K'q'^2)}{2} |\vec{m}'(\vec{q}')|^2 \\ &+ u' \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'_1}{(2\pi)^d} \cdots \int_0^{\Lambda} \frac{d^d q'_4}{(2\pi)^d} \vec{m}'(\vec{q}'_1) \cdot \vec{m}'(\vec{q}'_2) \vec{m}'(\vec{q}'_3) \cdot \vec{m}'(\vec{q}'_4) \\ &+ O(u^3, \text{etc.}), \end{aligned} \quad (46)$$

onde, nas proximidades do ponto fixo gaussiano $t = u = 0$, nós podemos escrever

$$\begin{aligned} t' &= b^{-d} \bar{\zeta}^2 \left[t + 4u(n+2) \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)} - u^2 B_b(0, 0, 0) + O(u^3) \right], \\ K' &= b^{-d} \bar{\zeta}^2 \left[K - u^2 \frac{\partial B_b}{\partial q^2}(0, 0, 0) + O(u^3) \right], \\ u' &= b^{-3d} \bar{\zeta}^4 \left[u - 4u^2(n+8) \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)^2} + O(u^3) \right]. \end{aligned} \quad (47)$$

Novamente, vamos escolher $\bar{\zeta}$ tal que $K' = K$. Para tal,

$$b^{d+2} \bar{\zeta}^4 = 1 - \frac{u^2}{K} \frac{\partial B_b}{\partial q^2}(0, 0, 0), \quad (48)$$

o que fornece

$$\bar{\zeta}^2 = b^{d+2+O(u^2)}. \quad (49)$$

Introduzindo esse resultado nas relações de recursão entre os restantes coeficientes da hamiltoniana efetiva, nós obtemos

$$t' = b^{2+O(u^2)} \left[t + 4u(n+2) \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)} - u^2 B_b(0, 0, 0) \right], \quad (50)$$

$$u' = b^{4-d+O(u^2)} \left[u - 4u^2(n+8) \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(t + Kk^2)^2} + O(u^3) \right]. \quad (51)$$

Vamos agora supor que $b = 1 + l$, com $l \ll q$, para facilitar a análise dessas relações de recorrência. Expandindo as equações em potências de l e mantendo somente termos lineares, nós obtemos, próximo ao ponto fixo gaussiano,

$$\frac{dt}{dl} = 2t + \frac{4u(n+2)S_d\Lambda^d}{(2\pi)^d(t + K\Lambda^2)} - O(u^2), \quad (52)$$

$$\frac{du}{dl} = (4-d)u - \frac{4(n+8)u^2S_d\Lambda^d}{(2\pi)^d(t + L\Lambda^2)^2}. \quad (53)$$

Os pontos fixos desse sistema de equações são aqueles em que $du/dl = 0$ e $dt/dl = 0$. Não é difícil verificar que há duas possibilidades:

1.

$$t^* = 0 \quad (54)$$

$$u^* = 0 \quad (55)$$

(trivial – recupera o ponto fixo gaussiano);

2.

$$t^* = -\frac{2u^*(n+2)S_d\Lambda^d}{(2\pi)^d(t^* + K\Lambda^2)} \quad (56)$$

$$u^* = \frac{(4-d)(2\pi)^d(t^* + K\Lambda^2)^2}{4(n+8)S_d\Lambda^d}, \quad (57)$$

este sim um novo, não-trivial, ponto fixo!

Para simplificar um pouco mais as equações, vamos ainda supor que Λ é suficientemente grande, de modo que $K\Lambda^2 \gg t^*$. Resolvendo-as para t^* e u^* nessa aproximação e chamando $\epsilon = 4 - d$, chegamos a, no segundo caso,

$$t^* = -\epsilon \frac{K\Lambda^2(n+2)}{2(n+8)} < 0 \quad (58)$$

$$u^* = \epsilon \frac{(2\pi)^d K^2 \Lambda^{4-d}}{4S_d(n+8)} > 0 \quad (59)$$

quando $\epsilon > 0$. Note que para $d > 4$ esse novo ponto fixo é inalcançável, pois a região $u < 0$ não é definida. O que muda nesse novo ponto fixo em relação ao anterior, gaussiano? Para

determinar as direções principais e as respectivas dimensões anômalas, vamos linearizar as relações de recorrência ao redor do novo ponto fixo: chamando $\delta t = t - t^*$ e $\delta u = u - u^*$, nós temos que

$$\frac{d}{dl} \begin{pmatrix} \delta t \\ \delta u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \epsilon \frac{n+2}{n+8} & \frac{4(n+2)S_d}{K\Lambda^{2-d}(2\pi)^d} - O(u^*) \\ \frac{\epsilon^2(2\pi)^d K}{2S_d\Lambda^{d-2}(n+8)} & -\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta t \\ \delta u \end{pmatrix}. \quad (60)$$

Note que tanto t^* quanto u^* são proporcionais a ϵ . Como queremos que a expansão perturbativa faç sentido, devemos requerer que $\epsilon \ll 1$.⁹ Isso parece um tanto estranho, uma vez que, no fundo, todo nosso esforço tem como objetivo a determinação dos expoentes críticos em $d = 3$, onde $\epsilon = 1$.

Na verdade, ao fazermos a expansão, verificamos que ela só faz sentido matematicamente quando ϵ é pequeno. Devemos então fazer uma abstração e imaginar a dimensão do problema como algo que possa variar continuamente. Ao passarmos de $d = 4$ (teoria de campo médio – ponto fixo gaussiano) para $d < 4$, esperamos capturar, pelo menos qualitativamente, os aspectos mais relevantes do comportamento crítico do sistema em $d = 3$. Ou seja, fazemos os cálculos para $d = 3.99$ ($\epsilon = 0.01$) e supomos que os expoentes críticos podem ser sucessivamente melhorados ao introduzirmos termos em ordem mais alta em ϵ . Ou ainda, usamos as expressões obtidas em teoria de perturbação de segunda ordem (ou alguma ordem superior) com $\epsilon = 1$. Isso nós dá uma estimativa (esperemos que boa!) dos verdadeiros expoentes críticos em $d = 3$.

Nesse espírito, vamos por hora manter a nossa expansão até segunda ordem em u e usar somente termos de primeira ordem em ϵ que sejam fundamentais:

$$\frac{d}{dl} \begin{pmatrix} \delta t \\ \delta u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - \epsilon \frac{n+2}{n+8} & A - O(\epsilon) \\ O(\epsilon^2) & -\epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta t \\ \delta u \end{pmatrix}, \quad (61)$$

onde $A = 4(n+2)S_d\Lambda^{d-2}/(2\pi)^d K$. Os expoentes anômalos podem ser lidos diretamente da matriz acima,

$$\lambda_1 = 2 - \epsilon \left(\frac{n+2}{n+8} \right) \quad \text{e} \quad \lambda_2 = -\epsilon, \quad (62)$$

com as respectivas direções principais dadas por

$$\theta_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \theta_2 = \frac{1}{\sqrt{A^2 + 4}} \begin{pmatrix} -2 \\ A \end{pmatrix}. \quad (63)$$

[Compare estas direções com aquelas obtidas anteriormente, em primeira ordem, Eq. (34).] Enquanto que a direção $\theta_1 = \theta_t$ é relevante ($\lambda_1 = y_t > 0$), a direção θ_2 é irrelevante ($\lambda_2 = y_u < 0$ para $d < 4$). Contudo, o fato mais importante é que ambos expoentes *independem* de especificidades do sistema, ou seja, são completamente determinados a partir da dimensionalidade e simetria do sistema. Todos os detalhes relativos ao tipo particular de matéria em estudo desaparecem e pode-se definir *classes de universalidade* para o comportamento de sistemas críticos. O fluxo do grupo de renormalização próximo ao novo ponto fixo é mostrado na Fig. 34.

Vale relembrar que os expoentes y_t e y_u determinam todos os expoentes críticos mais comuns. Portanto, estes últimos também serão universais e classificáveis em classes caracterizadas unicamente por d e n . Por exemplo:

⁹Alternativamente, poderíamos também supor que $n \gg 1$, de modo que u^* fosse garantidamente pequeno. Vamos voltar a esse ponto no final do capítulo.

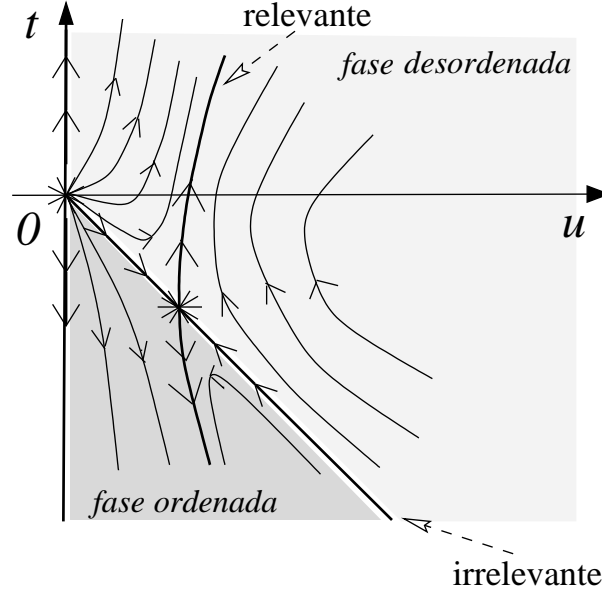


Figure 34: Estrutura dos pontos fixos da hamiltoniana com termo quártico em $d < 4$.

1. comprimento de correlação

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad \nu = 1/y_t \quad \longrightarrow \quad \nu = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{(n+2)\epsilon}{2(n+8)} \right] + O(\epsilon^2); \quad (64)$$

2. capacidade térmica

$$C \sim |t|^{-\alpha}, \quad \alpha = 2 - d\nu \quad \longrightarrow \quad \alpha = \frac{(4-n)\epsilon}{2(n+8)} + O(\epsilon^2); \quad (65)$$

3. magnetização

$$m \sim (-t)^\beta, \quad \beta = ? \quad (66)$$

Para determinar β nós introduzimos na hamiltoniana efetiva o termo

$$-\vec{h} \cdot \int d^d x \vec{m}(\vec{x}) = -\vec{h} \cdot \vec{m}(q \vec{=} 0).$$

Após reescalonamento e renormalização,

$$h \longrightarrow h' = \bar{\zeta} h = b^{1+d/2+O(u^2)} h.$$

Portanto, $y_h = 1 + (4 - \epsilon)/2 = 3 - \epsilon/2 + O(\epsilon^2)$. Lembrando que $\beta = (d - y_h)/y_t$, nós finalmente obtemos $\beta = 1/2 - 3\epsilon/2(n+8) + O(\epsilon^2)$.

4. susceptibilidade

$$\chi \sim |t|^{-\gamma}, \quad \gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} \quad \longrightarrow \quad \gamma = 1 + \frac{(n+2)\epsilon}{2(n+8)} + O(\epsilon^2). \quad (67)$$

Note como os expoentes críticos mais comuns recuperam seus valores obtidos na aproximação de campo médio quando $\epsilon = 0$.

	n=1	n=2	n=3	n=4
$\alpha(\epsilon = 1)$	0.17	0.10	0.05	0
α_{real}	0.10	-0.02	-0.14	-

Table 1: Tabela comparativa entre resultados exatos e perturbativos.

12.5 Comparação com valores reais

Vamos usar as expressões obtidas no cálculo perturbativo em segunda ordem para calcular os expoentes críticos e comparar esses resultados teóricos com os valores exatos.

1. Para o caso de $n = 1$ (classe de universalidade do modelo de Ising), nós temos que

$$\nu = \frac{1}{2} + \frac{\epsilon}{12} \quad \text{e} \quad \beta = \frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{6}, \quad (68)$$

o que fornece, lembrando que $\epsilon = 4 - d$,

$$\nu \approx \begin{cases} 0.58(0.64), & d = 3 \\ 0.63(1.00), & d = 2 \end{cases} \quad \text{e} \quad \beta \approx \begin{cases} 0.33(0.32), & d = 3 \\ 0.17(0.125), & d = 2, \end{cases} \quad (69)$$

onde, entre parênteses, estão indicados os valores exatos (obtidos via solução exata ou simulação numérica). Note que, apesar de termos utilizadas relações que, a princípio, são válidas somente quando $\epsilon \ll 1$, o resultado obtido para os expoentes ν e β fazendo $\epsilon = 1$ não é ruim. O desacordo é obviamente pior em $d = 2$ do que em $d = 3$.

2. Para o coeficiente da capacidade térmica em $d = 3$,

$$\alpha = \frac{4 - n}{2(n + 8)}, \quad (70)$$

o que nos permite montar a tabela 1. Note como o desacordo é pior neste caso, sendo que há até mesmo uma inversão de sinal em $n = 2$ não captada pelo resultado perturbativo.

12.6 Observações finais

1. A hamiltoniana efetiva, expressa no ponto fixo (t^*, u^*) , tem a forma

$$(\beta\mathcal{H})^* = \frac{K}{2} \int d^d x \left[(\nabla \vec{m})^2 - \frac{\epsilon \Lambda^2 (n + 2)}{2(n + 8)} m^2 + \frac{\epsilon (2\pi)^d K \Lambda^{d-4}}{4S_d(n + 8)} m^4 \right] + O(\epsilon^2). \quad (71)$$

Note que todos os termos têm rigorosamente a mesma dimensão em unidades de comprimento. Contudo, apesar do termo $(\nabla \vec{m})^2$ ser completamente invariante a transformações do grupo de renormalização, o mesmo não acontece com os outros termos. O que ocorre com esses termos é o seguinte. Ao eliminarmos graus de liberdade de curto alcance (ditos “rápidos”) via granulação grosseira, nós acabamos gerando termos novos, como m^6 , $m^2(\nabla \vec{m})^2$, etc., que não existiam na hamiltoniana original. Isso significa que, na realidade, esses termos deveriam ter sido incluídos desde o início se quiséssemos ser completamente consistentes. E, pior: ao irmos até 3^a ordem, acabamos gerando outros novos termos, como m^8 , etc. Ou seja, a rigor, a hamiltoniana efetiva deveria conter

todos os termos permitidos pela simetria do problema; eventualmente, todos eles apareceriam na expressão da hamiltoniana efetiva do problema sobre o ponto fixo não trivial (somente no caso do ponto fixo gaussiano é que todos menos um são eliminados).

A pergunta que se faz a seguir então é: seriam todos esses termos adicionais realmente necessários para a descrição do comportamento crítico do sistema? A resposta é não. É possível mostrar que ao redor do ponto fixo não-trivial há somente uma direção relevante (t); todas as outras são irrelevantes, formando uma imensa bacia atrativa. Isso vale pelo menos em teoria de perturbação em ϵ . Portanto, entenda-se o alto grau de universalidade dos expoentes críticos como o resultado da irrelevância desse conjunto enorme de parâmetros da hamiltoniana efetiva. Como essa propriedade de universalidade é consistente com a realidade experimental, acredita-se que o cálculo perturbativo da expansão em ϵ de Wilson, mesmo com as suas limitações, capture a essência da física do problema.

- Existem outros métodos de proceder com o grupo de renormalização que evitam alguns aspectos negativos da expansão em ϵ aqui adotada.¹⁰ Neste curso, porém, não vamos abordar essas alternativas. Contudo, vale a pena comentar que, na prática, são esses outros métodos os mais usados para a determinação dos expoentes críticos analiticamente, além das simulações numéricas do tipo Monte Carlo.

Tipicamente, obtém-se séries do tipo (no caso, $n = 1$)

$$2\nu = 1 + 0.167\epsilon + 0.04\epsilon^2 - 0.16\epsilon^3 + 0.77\epsilon^4 - 0.2\epsilon^5 + 0.67\epsilon^6 - 2.5\epsilon^7 + 10.3\epsilon^8 + \dots \quad (72)$$

Note que a série é alternada. Enquanto os coeficientes dos termos até 6^a ordem se mantêm relativamente pequenos, há um súbito salto a partir do termo de 7^a ordem. Este é um exemplo de uma série assintótica. Com elas, em geral, consegue-se boas estimativas utilizando somente os primeiros termos, mas é pouco claro se o resultado melhora ao incorporarmos no cálculo termos de ordem mais alta. Isso não significa necessariamente que a série seja divergente. Algumas séries assintóticas podem ser ressomadas através de técnicas especiais.

- Vamos voltar a uma observação já feita anteriormente. Note que

$$u^* = \frac{\epsilon(2\pi)^d(t^* + K\Lambda^2)}{4S_d(n+8)\Lambda^d} \quad (73)$$

tende a zero quando $n \rightarrow \infty$. Desta forma, para fins de determinação dos expoentes críticos, poderíamos explorar esse limite ao invés de fazer $\epsilon \ll 1$ para garantir que u^* se mantivesse pequeno. Ou seja, poderíamos utilizar $1/n$ como o parâmetro de controle da expansão ao invés de ϵ . Por exemplo, no caso do expoente ν , como $\nu = 1/y_t$ e

$$y_t = 2 - \left(\frac{n+2}{n+8}\right) (4-d) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} d-2, \quad (74)$$

segue que $\nu = 1/(d-2)$. Esse resultado é exato em $2 < d < 4$ quando $n \rightarrow \infty$.

¹⁰Um aspecto pouco agradável é que precisaríamos manter explicitamente o limite superior Λ ao longo do cálculo, mesmo sabendo que ele não influencia os expoentes críticos

13 Grupo de Renormalização em espaço real

A aplicação mais natural do processo de renormalização da maneira inicialmente proposta por Kadanoff (Cap. 10) se dá em modelos microscópicos de sistemas interagentes definidos no espaço real. Tipicamente, esses modelos são construídos sobre uma rede regular, como no caso do modelo de Ising. Em muitos casos, é mais fácil e rápido obter os expoentes críticos diretamente da versão discreta e espacial do que via teoria efetiva de Landau-Ginzburg (contínua) e renormalização de Wilson. A desvantagem é que, obviamente, não existe uma abordagem geral e sistemática para o grupo de renormalização em espaço real. Vejamos então a seguir alguns exemplos dos modelos mais importantes e das técnicas mais utilizadas.

13.1 Modelos na rede

1. Modelo de Ising:

$$\mathcal{H}(\{\sigma_i\}) = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_i H_i \sigma_i, \quad (1)$$

onde $\sigma_i = \pm 1$ e i corre sobre os N sítios da rede. No caso de interações de curto alcance e para campos externos uniformes,

$$\mathcal{H}(\{\sigma_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (2)$$

onde $\langle ij \rangle$ denota soma sobre pares de primeiros vizinhos. $J > 0$ ($J < 0$) implica em ordenamento ferromagnético (antiferromagnético) do estado fundamental. Usualmente se escreve a função de partição na forma

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i}, \quad (3)$$

onde $K \equiv J/k_B T$ e $h \equiv H/k_B T$. Note que quando $h = 0$ e $K \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$ com $J > 0$), o estado fundamental tem todos spins alinhados numa certa direção e é duplamente degenerado. Sabe-se que para $d > 1$ esse ordenamento persiste até uma certa temperatura crítica T_c ($K_c \equiv J/k_B T_c$), quando há uma transição de segunda ordem ($h = 0$) para uma fase desordenada. O comportamento crítico nesse ponto pertence à classe de universalidade de $n = 1$ da teoria de Landau-Ginzburg.

2. Modelo $O(n)$:

$$-\beta\mathcal{H} = K \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j + \vec{H} \cdot \sum_i \vec{s}_i, \quad (4)$$

onde \vec{s}_i é um vetor unitário de n componentes e módulo unitário,

$$\sum_{\alpha=1}^n [s_i^{(\alpha)}]^2 = 1. \quad (5)$$

Ele coincide com o modelo de Ising quando $n = 1$. Para $n = 2$ é chamado de modelo XY , enquanto que com $n = 3$ é conhecido como modelo de Heisenberg (aqui estamos nos restringindo às suas versões clássicas).

3. Modelo de Potts:

$$-\beta\mathcal{H} = K \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{s_i, s_j} + h \sum_i \delta_{s_i, 1}, \quad (6)$$

onde $s_i = 1, 2, \dots, q$. Ele é uma generalização do modelo de Ising (com o qual coincide quando $q = 2$). Note que o estado fundamental é degenerado por um fator q . Ele é usado, por exemplo, para $q = 3$, no modelamento da adsorção de átomos de criptônio (Kr) em grafite.

13.2 Listagem das principais técnicas teóricas

1. Grupo de renormalização de Kadanoff em espaço real.
2. Expansões em séries (altas e baixas temperaturas).
3. Soluções exatas. Elas sempre são possíveis em $d = 1$; em certos casos, também existem para $d = 2$.
4. Simulações computacionais pelo método de Monte Carlo.

Vamos estudar brevemente o caso unidimensional, onde é possível aplicar diversas técnicas e obter os expoentes críticos de forma exata. Lembre-se que em $d = 1$ só há ordenamento quando $T = 0$ (a dimensão crítica inferior é 1, como veremos a seguir).

13.3 Grupo de renormalização em $d = 1$

Seja a hamiltoniana definida na rede

$$-\beta\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle} B(\sigma_i, \sigma_j), \quad (7)$$

com $\sigma_i = \pm 1$. O grupo de renormalização de Kadanoff pressupõe uma média local sobre spins. Nós poderíamos então agrupá-los dois a dois ($b = 2$), como ilustra a Fig 35.

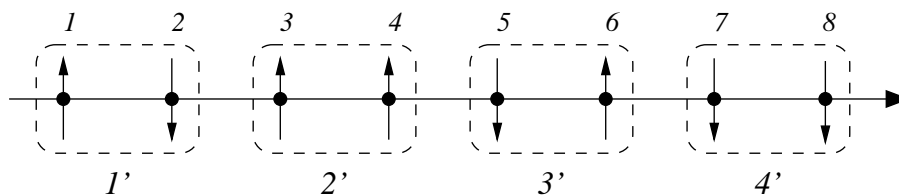


Figure 35: Granulação grosseira ($b = 2$).

Porém, como fazer a média? Note que há uma certa dubiedade no caso em que a soma de dois spins produz zero. Uma alternativa é fazer uma decimação do sistema. Separa-se os spins em dois conjuntos alternados e soma-se sobre os graus de liberdade correspondentes somente a

um desses conjuntos. Obtendo-se uma nova hamiltoniana, supostamente igual à inicial, mas com coeficientes renormalizados:

$$\begin{aligned}
Z &= \sum_{\{\sigma_i\}_N} \exp \left\{ \sum_{i=1}^{N-1} B(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \right\} \\
&= \sum_{\{\sigma'_i\}_{N/2}} \sum_{\{s_i\}_{N/2}} \exp \left\{ \sum_{i=1}^{N/2} [B(\sigma'_i, s_i) + B(s_i, \sigma'_{i+1})] \right\} \\
&= \sum_{\{\sigma'_i\}_{N/2}} \exp \left\{ \sum_{i=1}^{N/2} B'(\sigma'_i, \sigma'_{i+1}) \right\}, \tag{8}
\end{aligned}$$

com $\sigma'_i = \sigma_{2i-1}$, enquanto que $s_i = \sigma_{2i}$ (veja Fig. 13.3).¹¹

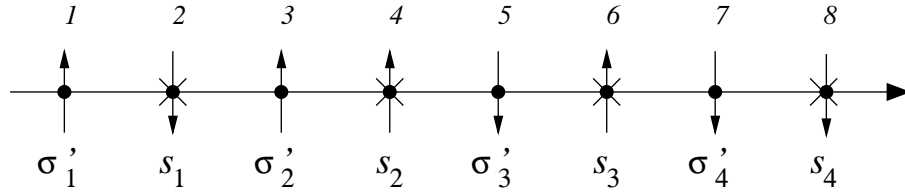


Figure 36: Separação dos spins em dois conjuntos.

O que se faz ao substituir $B(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ por $B'(\sigma'_i, \sigma'_{i+1})$ pode ser visualizado na Fig. 37.



Figure 37: Processo de decimação em uma dimensão.

Note que, como $\sigma_i^2 = 1$, a forma mais geral possível tanto para B quanto para B' é

$$K \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}) + g.$$

Qualquer outro termo pode ser reabsorvido por um dos três acima. A diferença entre B e B' está unicamente nos coeficientes. Ou seja, a hamiltoniana antes e depois da decimação tem o mesmo aspecto funcional, sendo a única mudança o valor dos coeficientes K , h e g . Isso é sempre verdade em $d = 1$, mas, como veremos a seguir, não necessariamente ocorre em dimensões mais altas. Nós podemos agora determinar a relação de recorrência entre (K, h, g) e (K', h', g') implementando a decimação para um dado par de spins σ'_1, σ'_2 :

$$\begin{aligned}
e^{K' \sigma'_1 \sigma'_2 + \frac{h'}{2}(\sigma'_1 + \sigma'_2) + g'} &= \sum_{s_1 = \pm 1} e^{K s_1 (\sigma_1 + \sigma_2) + \frac{h}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) + h s_1 + 2g} \\
&= e^{K \sigma_1} e^{K \sigma_2} e^{\frac{h}{2} \sigma_1} e^{\frac{h}{2} \sigma_2} e^{\frac{h}{2}} e^{2g} + e^{-K \sigma_1} e^{-K \sigma_2} e^{\frac{h}{2} \sigma_1} e^{-\frac{h}{2} \sigma_2} e^{\frac{h}{2}} e^{2g}. \tag{9}
\end{aligned}$$

¹¹A decimação é uma técnica bastante fácil de implementar recursivamente quando N é uma potência de 2.

1. Para $\sigma_1 = \sigma_2 = +1$,

$$e^{K'} e^{h'} e^{g'} = e^{2K} e^{\frac{3}{2}h} e^{2g} + e^{-2K} e^{\frac{1}{2}h} e^{2g}.$$

2. Para $\sigma_1 = \sigma_2 = -1$

$$e^{-K'} e^{-h'} e^{g'} = e^{-2K} e^{-\frac{1}{2}h} e^{2g} + e^{2K} e^{-\frac{3}{2}h} e^{2g}.$$

3. Para $\sigma_1 = -\sigma_2 = \pm 1$

$$e^{-K'} e^{g'} = e^{\frac{1}{2}h} e^{2g} + e^{-\frac{1}{2}h} e^{2g}.$$

Temos três equações independentes e três incógnitas, $e^{K'}$, $e^{h'}$ e $e^{g'}$. Com um pouco de álgebra, não é difícil obter as seguintes equações

$$\begin{aligned} (e^{g'})^4 &= (e^g)^8 \left[(e^K)^2 (e^h) + (e^K)^{-2} (e^h)^{-1} \right] \left[(e^K)^{-2} (e^h) + (e^K)^2 (e^h)^{-1} \right] \\ &\quad \times \left[(e^h) + (e^h)^{-1} \right]^2, \end{aligned} \quad (10)$$

$$(e^{h'}) = (e^h)^2 \left[(e^K)^2 (e^h) + (e^K)^{-2} (e^h)^{-1} \right] \left[(e^K)^{-2} (e^h) + (e^K)^2 (e^h)^{-1} \right]^{-1}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} (e^{K'})^4 &= \left[(e^K)^2 (e^h) + (e^K)^{-2} (e^h)^{-1} \right] \left[(e^K)^{-2} (e^h) + (e^K)^2 (e^h)^{-1} \right] \\ &\quad \times \left[(e^h) + (e^h)^{-1} \right]^{-2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Ou ainda,

$$g' = 2g + \delta g(K, h) \quad (13)$$

$$h' = h + \delta h(K, h) \quad (14)$$

$$K' = K'(K, h). \quad (15)$$

Note como g não participa das relações de recorrência envolvendo h e K (o que é um bom sinal, dado que g é meramente uma constante aditiva). Nós podemos resolver essas equações para K e h :

1. Seja $h = 0$. Segue então que

$$\begin{aligned} e^{4K'} &= \frac{(e^{2K} + e^{-2K})^2}{4} \\ e^{2h'} &= e^{2h}. \end{aligned} \quad (16)$$

Portanto, $h' = 0$ e

$$K' = \frac{1}{2} \ln[\cosh(2K)]. \quad (17)$$

Há somente dois pontos fixos,

- $K^* = 0$, com $K' \approx K^2$ (alta temperaturas),
- $K^* = \infty$, com $K' \approx K - \ln \sqrt{2}$ (baixa temperaturas).

O resultado é ilustrado na Fig. 38. Não havendo nenhum ponto fixo intermediário, o fluxo do grupo de renormalização segue continuamente do ponto fixo de baixa temperatura até alcançar o de alta temperatura. Ou seja, o ponto fixo de baixa temperatura é instável, indicando que o ordenamento só existe para $T = 0$ (estado fundamental). Esse ordenamento é imediatamente destruído quando $T > 0$. Para qualquer ponto $T > 0$, o grupo de renormalização flui para o ponto fixo de alta temperatura (desordenado).

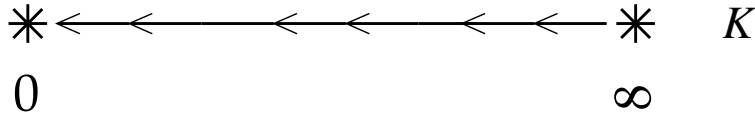


Figure 38: Fluxo do grupo de renormalização a $h = 0$.

2. Para $h \neq 0$, nada de drástico acontece, valendo o mesmo comportamento do caso anterior. Tudo pode ser reunido então no diagrama da Fig. 39.

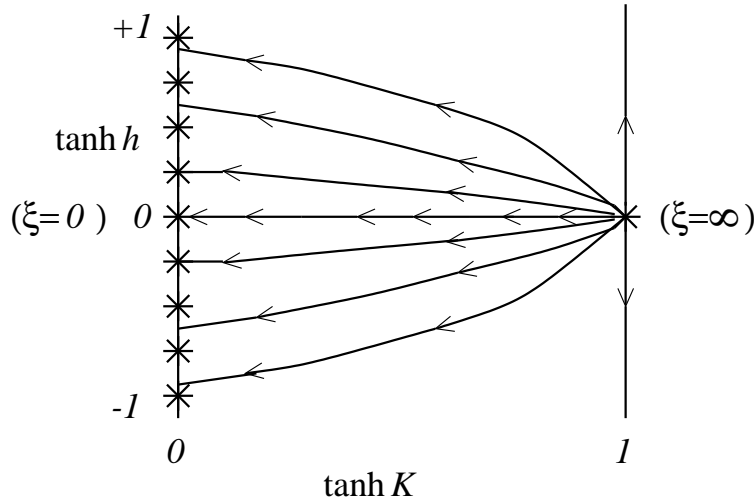


Figure 39: Diagrama completo do fluxo do grupo de renormalização.

O ponto fixo em $K^* = \infty$ é instável, sendo que a ele só estão relacionadas direções principais relevantes. Para entender melhor o que se passa ao seu redor, vamos linearizar as relações de recorrência em torno dele,

$$(e^{K'})^4 = \frac{1}{4} (e^K)^4 + O(h^2) \quad (18)$$

$$(e^{h'})^2 = (e^h)^4 + O(e^{-K}), \quad (19)$$

de onde segue que

$$e^{-K'} = \sqrt{2} e^{-K} \quad (20)$$

$$h' = 2h. \quad (21)$$

Agora nós podemos obter o comportamento crítico do sistema a partir da hipótese de homogeneidade das funções termodinâmicas. Partindo do comprimento de correlação e lembrando

que a nossa decimação tinha $b = 2$, nós temos que $\xi' = \xi/2$. Assim,

$$\xi(e^{-K}, h) = 2\xi(\sqrt{2}e^{-K}, 2h), \quad (22)$$

uma vez que $\xi'(e^{-K'}, h') = \xi(e^{-K'}, h')$. Após l decimações sucessivas,

$$\xi(e^{-K}, h) = 2^l \xi(2^{l/2}e^{-K}, 2^l h). \quad (23)$$

Para continuar próximo ao ponto fixo ($K^* = \infty$ e $h^* = 0$), o número de decimações não deve exceder um certo limite, $2^{l_{\max}/2}e^{-K} \sim O(1)$. Assim,

$$\xi(e^{-K}, h) \approx e^{2K} g\left(\frac{h}{e^{-2K}}\right). \quad (24)$$

Lembrando que a energia livre por unidade de volume $f(e^{-K}, h) \sim \xi^{-d}$, nós obtemos

$$f(e^{-K}, h) \sim e^{-2K} g_f\left(\frac{h}{e^{-2K}}\right). \quad (25)$$

Como $\chi \sim \partial^2 f / \partial h^2$, segue que a susceptibilidade varia como

$$\chi(e^{-K}, h) \sim e^{2K} g_\chi\left(\frac{h}{e^{-2K}}\right). \quad (26)$$

Portanto nós podemos deduzir que $\eta = 1$, uma vez que $\chi \sim \xi^{2-\eta}$. Lembre-se que η é o expoente que aparece nas funções de correlação,

$$\langle \sigma_0 \sigma_x \rangle \sim \frac{e^{-x/\xi}}{x^{d-2+\eta}}. \quad (27)$$

No caso em questão, como $d = 1$ e $\eta = 1$, as funções de correlação fora do ponto fixo tem $\xi < \infty$ e portanto decaem exponencialmente. Com comentário final, vale a pena dizer que, em teoria de campo médio, $\eta = 0$.

13.4 Grupo de renormalização em $d > 1$

A facilidade que tivemos em resolver o problema unidimensional não se repete aqui. Para entender onde aparecem as complicações, vejamos o exemplo do modelo de Ising em duas dimensões (rede quadrada) com interações somente entre primeiros vizinhos. A decimação neste caso segue o processo indicado na Fig. 40.

Porém, agora,

$$\sum_{\sigma_0=\pm 1} e^{K\sigma_0(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} \neq e^{g'+K'(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\sigma_3\sigma_4+\sigma_4\sigma_1)}. \quad (28)$$

A eliminação do spin no sítio 0 introduz não só interações dois-a-dois entre primeiros vizinhos, mas também termos do tipo $\sigma_1\sigma_3$ (interações entre segundos vizinhos) e $\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4$ (interações de quatro spins). E, pior: uma vez introduzidos esses novos termos, uma segunda decimação produz outras novas variedades na hamiltoniana efetiva. Assim, o tamanho do espaço de parâmetros vai se tornando cada vez maior, inviabilizando qualquer solução exata, ou mesmo complicando em muito a análise das equações de fluxo.

A solução é partir para métodos aproximados que capturem o essencial da física do comportamento crítico do modelo em questão. Vamos estudar duas técnicas distintas a seguir.

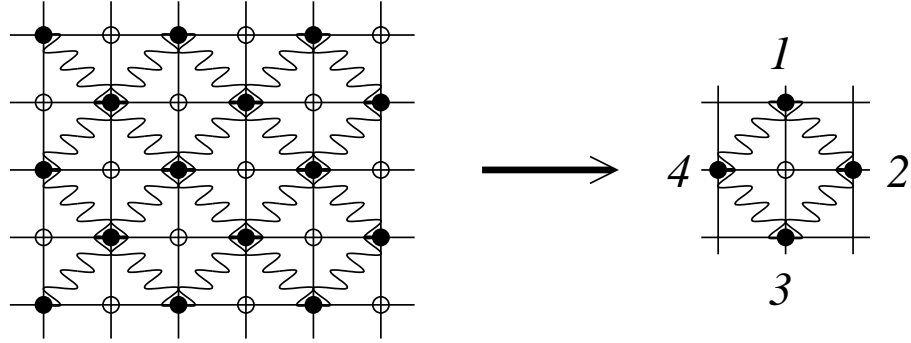


Figure 40: Decimação hipotética em $d = 2$.

13.4.1 Expansão em cumulantes de Niemeijer e van Leeuwen

Este método é particularmente simples para uma rede triangular em duas dimensões, como ilustraremos abaixo. Ele é de fácil generalização quando o número de coordenação é ímpar. Os passos são os seguintes (veja ilustração na Fig. 41):

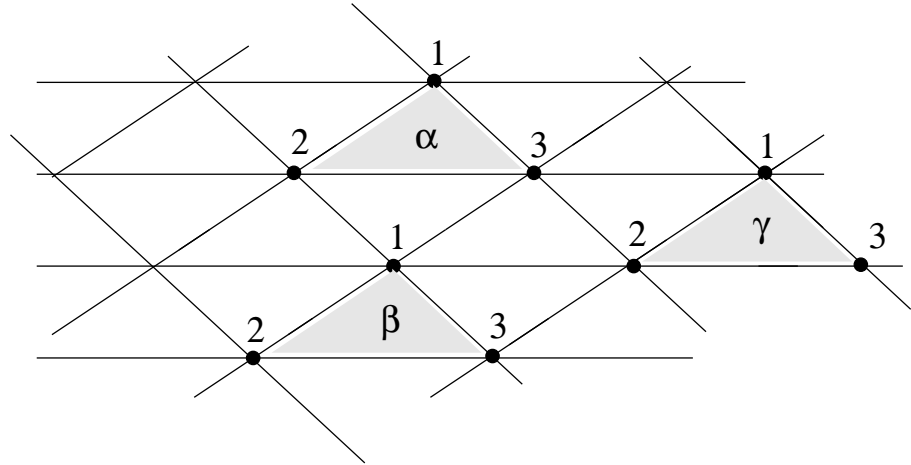


Figure 41: Rede bidimensional triangular.

1. defina células α , cada qual com 3 spins σ_i^α ;
2. defina o novo spin da célula α pela regra da maioria, $\sigma'_\alpha = \text{sgn}(\sigma_1^\alpha + \sigma_2^\alpha + \sigma_3^\alpha)$;
3. reescreva a hamiltoniana em termos de $\{\sigma'_\alpha\}$,

$$e^{-\beta\mathcal{H}'[\sigma'_\alpha]} = \sum_{\sigma_i^\alpha \rightarrow \sigma'_\alpha} e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma_i^\alpha]} \quad (29)$$

(obviamente, nesse processo serão gerados termos inicialmente inexistentes na hamiltoniana original);

4. trunque a hamiltoniana efetiva de forma perturbativa,

$$\beta\mathcal{H} = \beta\mathcal{H}_0 + U, \quad (30)$$

onde $\beta\mathcal{H}_0$ contém interações intracelulares,

$$-\beta\mathcal{H}_0 = K \sum_{\alpha} (\sigma_{\alpha}^1 \sigma_{\alpha}^2 + \sigma_{\alpha}^1 \sigma_{\alpha}^3 + \sigma_{\alpha}^2), \quad (31)$$

ao passo que U contém interações intercelulares,

$$-U = K \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} (\sigma_{\beta}^{(1)} \sigma_{\alpha}^{(2)} + \sigma_{\beta}^{(1)} \sigma_{\alpha}^{(3)}), \quad (32)$$

onde a soma somente abrange células vizinhas conectadas por duas ligações;

5. a hamiltoniana efetiva é obtida via teoria de perturbação,

$$e^{-\beta\mathcal{H}'[\sigma'_{\alpha}]} = \sum_{\sigma_i^{\alpha} \rightarrow \sigma'_{\alpha}} e^{-\beta\mathcal{H}[\sigma_i^{\alpha}]} \left[1 - U + \frac{1}{2}U^2 - \dots \right], \quad (33)$$

de forma que

$$\beta\mathcal{H}'[\sigma'_{\alpha}] = -\ln \left\{ \sum_{\sigma_i^{\alpha} \rightarrow \sigma'_{\alpha}} e^{-\beta\mathcal{H}_0[\sigma_i^{\alpha}]} \right\} + \langle U \rangle_0 - \frac{1}{2} [\langle U^2 \rangle_0 - \langle U \rangle_0^2] + \dots \quad (34)$$

(ou seja, fazemos a expansão em cumulantes).

Vamos implementar esse procedimento até primeira ordem.

$$\begin{aligned} Z_0 &= \sum_{\sigma_i^{\alpha} \rightarrow \sigma'_{\alpha}} e^{-\beta\mathcal{H}_0[\sigma_i^{\alpha}]} \\ &= \prod_{\alpha} \sum_{\sigma_i^{\alpha} | \sigma'_{\alpha}} e^{K(\sigma_1^{\alpha} \sigma_2^{\alpha} + \sigma_1^{\alpha} \sigma_3^{\alpha} + \sigma_2^{\alpha} \sigma_3^{\alpha})} \end{aligned} \quad (35)$$

(note a soma condicional). Como os spins α são desacoplados, basta fazer a contabilidade das várias possíveis configurações de $(\sigma_1^{\alpha}, \sigma_2^{\alpha}, \sigma_3^{\alpha})$ que produzem um dado valor de σ'_{α} . O resultado para a função de partição é

$$Z_0 = \prod_{\alpha} \sum_{\sigma'_{\alpha}} (e^{3K} + 3e^{-K}) = [2(e^{3K} + 3e^{-K})]^{N/3}. \quad (36)$$

Para o termo perturbativo,

$$\begin{aligned} -\langle U \rangle_0 &= K \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} \langle \sigma_{\beta}^{(1)} \sigma_{\alpha}^{(2)} + \sigma_{\beta}^{(1)} \sigma_{\alpha}^{(3)} \rangle \\ &= K \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} \left[\langle \sigma_{\beta}^{(1)} \rangle_0 \langle \sigma_{\alpha}^{(2)} \rangle_0 + \langle \sigma_{\beta}^{(1)} \rangle_0 \langle \sigma_{\alpha}^{(3)} \rangle_0 \right], \end{aligned} \quad (37)$$

onde, para um dado conjunto σ'_{α} ,

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i^{\alpha} \rangle_0 &= \begin{cases} \frac{e^{3K} + 2e^{-K} - e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}}, & \sigma'_{\alpha} = +1 \\ \frac{e^{-K} - 2e^{-K} - e^{3K}}{e^{3K} + 3e^{-K}}, & \sigma'_{\alpha} = -1 \end{cases} \\ &= \sigma'_{\alpha} \left(\frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} \right). \end{aligned} \quad (38)$$

Assim,

$$\begin{aligned}
-\beta\mathcal{H}'[\sigma'_\alpha] &= \frac{N}{3} \ln[2(e^{3K} + 3e^{-K})] + 2K \left(\frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} \right)^2 \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} \sigma'_\alpha \sigma'_\beta + \dots \\
&= \text{const.} + K' \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} \sigma'_\alpha \sigma'_\beta + O(U^2).
\end{aligned} \tag{39}$$

Segue então que, em primeira ordem, a relação de recorrência é igual a

$$K' = 2K \left(\frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} \right)^2. \tag{40}$$

Os pontos fixos são três, como ilustrado na Fig. 42:

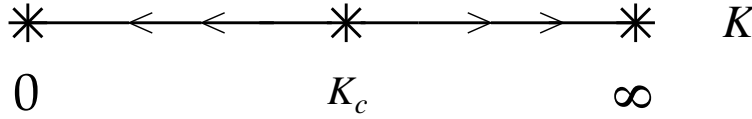


Figure 42: Rede bidimensional triangular.

- $K^* = 0$, com $K' \approx K/2$ (altas temperaturas – estável);
- $K^* = \infty$, com $K' \approx 2K$ (baixas temperaturas – estável);
- $K^* = K_c$, com $K_c = \frac{1}{4} \ln \left(\frac{3-\sqrt{2}}{\sqrt{2}-1} \right) \approx 0.3356$ (não trivial – transição de fase ordem/desordem).

Com um pouco de álgebra, não é difícil mostrar que

$$\left(\frac{dK'}{dK} \right)_{K_c} \approx 1.624 > 1. \tag{41}$$

Portanto, o ponto fixo não-trivial é instável. Como, neste caso, $b = \sqrt{3}$ (já que a decimação remove um a cada 3 spins e o sistema é bidimensional),

$$b^{y_K} = \left(\frac{dK'}{dK} \right)_{K_c} \longrightarrow y_K = y_t \approx 0.883. \tag{42}$$

Compare estes resultados com os valores exatos, $K_c = 0.2747$ e $y_t = 1$ (em comparação, a teoria de campo médio fornece $K_c = 1/3$ e $y_t = 2$). Para obter y_h e, por conseguinte, os expoentes críticos, mais comuns, basta adicionar à hamiltoniana um segundo termo perturbativo do tipo

$$-V = h \sum_i \sigma_i = h \sum_\alpha (\sigma_1^\alpha + \sigma_2^\alpha + \sigma_3^\alpha). \tag{43}$$

Em primeira ordem, nós obtemos

$$\langle -V \rangle_0 = 3h \sum_\alpha \langle \sigma_1^\alpha \rangle = 3h \left(\frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} \right) \sum_\alpha \sigma'_\alpha. \tag{44}$$

Portanto,

$$h' = 3h \left(\frac{e^{3K} + e^{-K}}{e^{3K} + 3e^{-K}} \right) \quad (45)$$

e

$$\left(\frac{dh'}{dh} \right)_{K_c} = \frac{3}{\sqrt{2}} \quad \longrightarrow \quad y_h \approx 1.37, \quad (46)$$

enquanto que o valor exato é 1.875 e o valor da teoria de campo médio é 2.

13.4.2 Aproximação de Migdal-Kadanoff

Nós vimos que a decimação do modelo de Ising numa rede bidimensional quadrada introduz termos de interação que vão além de primeiros vizinhos. Para evitar esse problema, pode-se simplesmente cancelar as ligações extras entre vizinhos distantes geradas na decimação, mas simultaneamente aumentar a intensidade das ligações entre os primeiros vizinhos, como forma de compensação. Isso é ilustrado na Fig. 43 para o caso de $b = 2$.

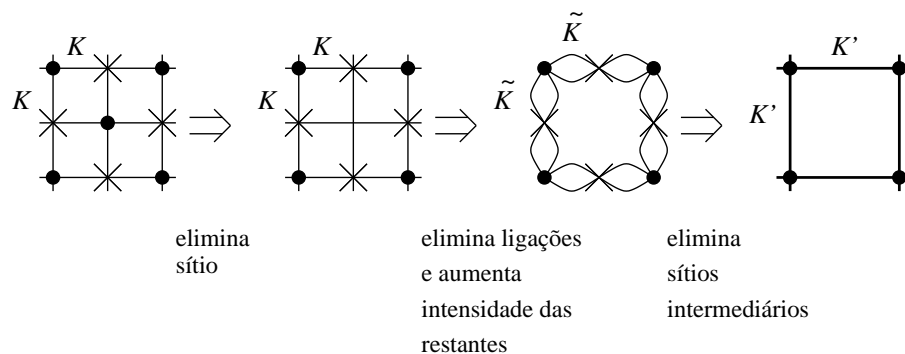


Figure 43: Decimação aproximada de Migdal-Kadanoff em $d = 2$.

No exemplo acima, substitui-se quatro plaquetas (células) por uma. Note que a última etapa envolve uma decimação unidimensional, do tipo já estudada [Eq. (17)]. Portanto,

$$K' = \frac{1}{2} \ln[\cosh(2\tilde{K})]. \quad (47)$$

Como $\tilde{K} = 2K$, nós chegamos à relação de recorrência

$$K' = \frac{1}{2} \ln[\cosh(4K)]. \quad (48)$$

Neste caso, os pontos fixos passam a ser três:

- $K^* = 0$, com $K'4 \approx K^2$ (altas temperaturas – estável);
- $K^* = \infty$, com $K' \approx 2K$ (baixas temperaturas – estável);
- $K^* = K_c$, com $2K_c = \ln[\cosh(4K_c)]$, o que fornece $K_c \approx 0.305$ (não trivial – transição de fase ordem/desordem).

Compare com o valor exato: $K_c = 0.441$. A longo da direção K ,

$$\left(\frac{dK'}{dK}\right)_{K_c} = 2 \tanh(4K_c) \approx 1.6786 > 1 \quad \longrightarrow \quad \text{instável.} \quad (49)$$

O dimensão anômala associada é $y_K = y_t \approx 0.7472$ (enquanto que o valor exato é 1).¹²

Esse procedimento pode ser generalizado facilmente para uma rede hipercúbica em d dimensões, como mostra a Fig. 44 para o caso $d = 3$.

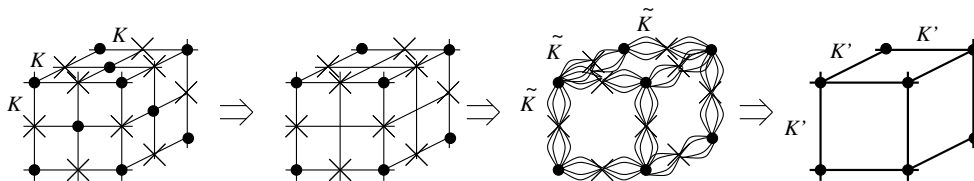


Figure 44: Decimação aproximada de Migdal-Kadanoff em $d = 3$.

A nova relação de recorrência passa a ser

$$K' = \frac{1}{2} \ln[\cosh(2^d K)], \quad (50)$$

uma vez que $K' = \frac{1}{2} \ln[\cosh(2\tilde{K})]$ e $\tilde{K} = 2^{d-1}K$. Para $d = 3$ acha-se $K_c = 0.065$, enquanto que o valor obtido a partir de simulações numéricas é 0.222. Para a dimensão anômala, $y_t \approx 0.934$, sendo o valor mais próximo do exato conhecido igual a 1.59.

A aproximação de Migdal-Kadanoff piora para dimensões mais altas, ao passo que ela é exata em $d = 1$. Quando associada a outras técnicas, como matrizes de transferência, fornece um jeito rápido de se estimar expoentes críticos em $d > 1$. Em certos casos, nas chamadas redes hierárquicas de Berker, essa técnica acaba permitindo a solução exata do problema, mesmo em $d > 1$.

¹²Apesar do valor de K_c depender do tipo de rede (se quadrada ou triangular), os expoentes críticos devem ser universais – só dependem de n e d .