UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA MATEMÁTICA

PAREDES DE DOMÍNIOS EM FERROMAGNETISMO

RUDNEI DE OLIVEIRA RAMOS

Dissertação de Mestrado submetida ao
Instituto de Física da USP para a obten-
ção do título de Mestre em Ciências.

[Handwritten signatures and initials]

SÃO PAULO

MARÇO 1989

Data da Defesa 3/3/89

SBI-IFUSP

305M810T1511

FICHA CATALOGRÁFICA

Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Ramos, Rudnei de Oliveira
Paredes de domínios em ferromagnetismo. São Paulo, 1989.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Departamento de Física Matemática.

Área de Concentração: Física de Partículas Elementares e Campos.

Orientador: Prof. Dr. Gil da Costa Marques

Unitermos: 1. Transições de fase e fenômenos críticos; 2. Teoria de campo à temperatura finita; 3. Paredes de domínios; 4. Ferromagnetismo e fenomenologia.

USP/IF/SBI - 05/89

AGRADECIMENTOS

Meus agradecimentos ao prof. Gil da Costa Marques pela sugestão do tema deste trabalho e pela orientação dada no transcorrer do mesmo, aos colegas do Instituto de Física que deram sua contribuição na elucidação de muitas de minhas dúvidas, ao departamento de Física Matematica pelas facilidades oferecidas e à Fundação de Amparo à Pesquisa no Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro, sem o qual nada poderia ter sido realizado.

RESUMO

Determinamos a tensão superficial de um defeito do tipo parede de domínio, utilizando a aproximação semiclássica no contexto da teoria de campos à temperatura finita para o modelo $\lambda(\phi^2)^2$ com interação invariante por simetria $O(N)$, obtendo em seguida a temperatura crítica T_c de transição de fase e cálculo dos expoentes críticos α e ν , aplicando então os resultados obtidos para a descrição de um modelo fenomenológico descrevendo o ferromagnetismo.

ABSTRACT

We determine the surface tension of a domain wall defect by using the semiclassical approach in the context of field theory at finite temperature for the $\lambda(\phi^2)^2$ model with $O(N)$ invariant interaction obtaining the critical temperature T_c of phase transition and the calculation of the critical exponents α and ν applying then the obtained results to a description of a phenomenological model describing ferromagnetism.

ÍNDICE

I.	INTRODUÇÃO.....	1
II.	TRANSIÇÕES DE FASE, FENOMENOLOGIA E SISTEMAS DE SPINS...	6
II.1.	Fatos Básicos sobre Transições de Fase.....	6
II.2.	Comportamento dos Sistemas Próximos do Ponto Crítico.....	10
II.3.	A Interface : Teoria Fenomenológica.....	14
II.3.1.	A Tensão Superficial.....	14
II.3.2.	Teoria Clássica ou do Campo Médio.....	15
II.3.3.	Homogeneidade e Escala.....	19
II.4.	O Limite do Contínuo.....	23
III.	TEORIA DE CAMPOS À TEMPERATURA FINITA - O POTENCIAL EFETIVO.....	28
III.1.	A Função de Partição na Representação Funcional.....	28
III.2.	A Teoria $\lambda(\Phi^2)^2$ com Quebra Espontânea da Simetria $O(N)$	32
III.3.	O Método do Potencial Efetivo no Estudo das Transições de Fase em Teorias de Campos à Temperatura Finita.....	34
IV.	CÁLCULO DA TENSÃO SUPERFICIAL OU ENERGIA LIVRE DA INTERFACE.....	48
V.	EXPOENTES CRÍTICOS E A ESTRUTURA DE PAREDES E DOMÍNIOS FERROMAGNÉTICOS.....	52
V.1.	Cálculo dos Expoentes Críticos α e ν	52

V.2. Análise da Estrutura de Paredes e Domínios	
Ferromagnéticos.....	57
V.2.1. Determinação do Expoente β	62
V.2.2. Estimativas Numéricas dos Parâmetros	
μ e λ	65
VI. COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES.....	68
VII.REFERÊNCIAS.....	72

I. INTRODUÇÃO

Há algum tempo que estudos do comportamento das simetrias de sistemas submetidos a um banho térmico vem sendo realizados. Trabalhos em teorias de campos relativística desenvolvidos por Kizhnits e Linde (1976), Weinberg (1974) e Dolan e Jackiw (1974) tiveram como objetivo a análise de sistemas cujas simetrias espontaneamente quebradas à temperatura zero, poderiam ter restauração de simetria à altas temperaturas, calculando então a temperatura na qual tal transição ocorreria, ou seja, a temperatura crítica de transição de fase. Tal idéia em teoria quântica de campos, apesar de parecer nova, já era longamente conhecida em física do estado sólido e estatística quântica aplicada a teorias de ferromagnetismo e supercondutividade, etc, os quais apresentam o fenômeno de quebra espontânea-restauração de simetria, dependendo da temperatura em que se encontra o sistema. O método comumente utilizado é o do cálculo do potencial efetivo utilizando a teoria $\lambda\phi^4$ com massa tachionica ($m^2 < 0$) à temperatura finita ($T \neq 0$). Neste sistema podemos identificar um parâmetro de ordem, análogo ao da física estatística, dado pelo valor esperado do campo ϕ , $\langle \phi \rangle_T$, cujo comportamento em função da temperatura, distingue as fases do sistema: a fase caracterizada pela quebra espontânea de simetria à $T \neq 0$, i.e., $\langle \phi \rangle_T \neq 0$, e a fase de simetria restaurada acima de uma determinada temperatura crítica T_c , i.e., $\langle \phi \rangle = 0$ para $T >$

T_c . Tipicamente o potencial efetivo é obtido fazendo-se uma aproximação via expansões semiclássicas em torno de um campo de "background" uniforme, i.e., $\phi_{cl} = \bar{\phi}$ e expansão em altas temperaturas com aproximação de 1-loop (Dolan e Jackiw 1974). Entretanto pode-se verificar que o potencial efetivo à temperatura finita na aproximação de 1-loop, calculado via uma expansão em torno de um campo de "background" uniforme, numa região próxima do ponto de transição, tanto abaixo como acima de T_c , torna-se imaginário (Aragão et al 1986), ou seja, isso faz com que tal método não seja confiável na descrição da transição de fase, uma vez que temos a indicação de instabilidade nesta região, das configurações de campo uniformes utilizadas. Em face disso, recentemente os autores Ventura (1981), Bazeia et al (1983) e Aragão et al (1986), propuseram um método diferente de análise da transição de fase, baseando-se também numa aproximação semiclássica mas, em vez de se utilizar uma configuração de campo uniforme, utilizou-se uma configuração do tipo Kink (Rajaraman 1975), calculando-se então a tensão superficial ou energia livre de interface por unidade de área associada à configuração do tipo Kink, sendo que esta configuração é nada mais que uma estrutura do tipo parede de Bloch, interpolando regiões do espaço onde residem valores do campo de Higgs com sinais contrários. A temperatura na qual a tensão superficial se anula é exatamente a temperatura crítica de transição de fase T_c (Lebowitz e Pfister 1981). Para ilustrar tal idéia, podemos tomar, por exemplo, um ferromagneto a campo magnético nulo em que abaixo da

temperatura crítica T_c , é esperado a coexistência de duas fases caracterizadas por magnetizações espontâneas positiva e negativa . As fases são separadas espacialmente por uma interface a qual se associa uma energia livre de interface (ou tensão superficial) positiva (para garantir estabilidade) . Se a temperatura aumenta além de T_c , a magnetização vai para zero , ao mesmo tempo a energia livre interfacial vai à zero à temperatura T_c . À esta temperatura e acima de T_c , não deve existir energia livre interfacial porque existirá somente uma fase (desordenada) homogênea e o estado termodinâmico é único . Neste exemplo , não é difícil ver que tais interfaces são nada mais que as paredes de domínios ou paredes de Bloch . Temos então um método de cálculo da tensão superficial de paredes de domínios . Se então tomarmos o modelo utilizado, em 3 dimensões espaciais à temperatura finita como sendo a versão do contínuo do modelo de Ising 3D , descrição esta válida pelo menos próximo do ponto crítico (temperaturas próximas de T_c) , onde variações na escala de espaçamento interpartículas não devem ser importantes pois as escalas de comprimento de interesse (comprimento de correlação por exemplo) , tornam-se grandes comparadas com escalas de comprimento microscópicas (espaçamento da rede por exemplo) , motiva-nos a tomarmos tal método para uma aplicação imediata . Neste trabalho procuramos então explorar o procedimento desenvolvido pelos autores Ventura (1981) , Bazeia et al (1983) e Aragão et al (1986) , utilizando-o para o cálculo da tensão superficial para um modelo $\lambda(\phi^2)^2$ de N campos escala-

res (simetria $O(N)$) à temperatura finita e considerando tal método como sendo a versão no contínuo (mediante a tomada de limites apropriados) de um sistema de spins ($N=1$ para Ising e $N=3$ para o de Heisenberg) e através da tensão superficial obter expoentes críticos importantes, estudando a criticalidade na interface (Jasnow 1984) e desenvolver uma fenomenologia para domínios ferromagnéticos (Kittel 1949). É claro que os resultados obtidos não são esperados descrever um ferromagneto real, principalmente pelo fato de experimentos eliminarem a simples formulação da interface como sendo uma solução do tipo utilizada aqui (nas conclusões e comentários finais voltaremos a este ponto), entretanto a formulação desenvolvida nos permite tirar dados sobre a transição de fase e da própria estrutura de domínios, fornecendo uma maneira simples de descrever toda uma fenomenologia para um modelo ferromagnético.

Este trabalho está organizado da seguinte forma : no capítulo II fazemos uma breve revisão sobre o estudo de transições de fase, expoentes críticos e propriedades que serão relevantes no transcorrer deste trabalho; no capítulo III fazemos também uma breve revisão do formalismo de teorias de campos à temperatura finita, calculando como exemplo o potencial efetivo e aproveitando para indicar as dificuldades com o mesmo para a descrição da transição de fase; no capítulo IV tratamos do método alternativo de análise da transição de fase, desenvolvendo o cálculo da tensão superficial e da temperatura crítica; no capítulo V desenvolvemos toda a fenome-

nologia para um sistema ferromagnético através da tensão superficial e temperatura crítica obtidos no capítulo anterior ,calculando expoentes críticos e estudo da estrutura de paredes e domínios ferromagnéticos;no capítulo VI são apresentadas as conclusões e observações de interesse.

II. TRANSIÇÕES DE FASE, FENOMENOLOGIA E SISTEMAS DE SPINS

II.1. Fatos Básicos sobre Transições de Fase-

Varios fenômenos físicos para os quais o formalismo da mecânica estatística tem sido aplicados podem, em geral, ser divididos em duas categorias. Na primeira categoria, os constituintes microscópicos de um dado sistema são vistos como praticamente não-interagentes, como resultado, as funções termodinâmicas do sistema macroscópico surgem diretamente do conhecimento dos níveis de energia dos constituintes individuais microscópicos. Como exemplo, temos a distribuição espectral do corpo negro, o paramagnetismo, etc. A mais importante característica dos fenômenos que caem nesta categoria é que, com a exceção da condensação de Bose-Einstein (onde a derivada do calor específico é encontrada ser descontínua em T_c), as funções termodinâmicas dos sistemas envolvidos são suaves e contínuas.

Na segunda categoria, entretanto, os fenômenos apresentam-se numa situação muito diferente. Em muitos casos nós encontramos discontinuidades analíticas ou singularidades nas funções termodinâmicas de um dado sistema, o que corresponde à ocorrência de varios tipos de transições de fase. Exemplos de fenômenos nesta categoria são a condensação de gases, fenômenos de ferromagnetismo, etc. As interações interpartículas nestes sistemas não podem ser "removidas" por meio de uma transformação das coordenadas do problema, nem os níveis de energia do sistema total, de modo simples, ser

relacionados aos níveis de energia dos constituintes microscópicos. Na verdade o que se tem é que, sob condições favoráveis, um grande número de constituintes microscópicos do sistema tem a tendência de interagir um com o outro de uma forma intensa e cooperativa. Este comportamento cooperativo assume importância macroscópica a uma dada temperatura T_c , conhecida como a temperatura de transição ou temperatura crítica do sistema e dá origem aos tipos de fenômenos acima.

Um grande número de sistemas físicos-químicos os quais desenvolvem transições de fase, podem ser representados, em vários graus de precisão, por um arranjo discreto de pontos com interação entre os vizinhos mais próximos que dependem da forma de ocupação dos pontos vizinhos. Tomemos como exemplo, um sistema magnético geral, tal que este consista de momentos magnéticos elementares (spins S_n) situados nos vértices de uma rede cristalina periódica. Neste sistema podemos identificar um parâmetro de ordem (que distingue as fases do sistema), a magnetização, que é diferente de zero para $T < T_c$ e vai continuamente à zero quando $T \rightarrow T_c$. O sistema exibe então uma magnetização espontânea em $T < T_c$.

A forma mais simplificada possível de descrever as interações entre os spins S_n é através do modelo de Ising (Brush 1967, como revisão). O modelo tem servido como uma descrição possível do ferromagnetismo mas provavelmente também constitui um modelo de teoria de campos (Kogut 1979). Considerando uma rede cúbica de pontos, $n = (n_1, n_2, n_3)$ em três dimensões, por exemplo, e atado a cada ponto da rede uma varia-

vel de spin S_n . Suponhamos que S_n toma somente os valores discretos ± 1 , com a rede consistindo de N pontos, isto é, o sistema possui 2^N possíveis estados. Cada uma destas configurações de spin poderiam ter uma particular energia. Se somente as interações vizinhas mais próximas spin-spin são permitidas, a Hamiltoniana é:

$$H = -J \sum_n \sum_{\hat{i}} S_n S_{n+\hat{i}} \quad (\text{II.1})$$

onde $\{\hat{i}\}$ são vetores unitários para cada eixo na rede.

Fig.II.1- Rede bidimensional com vetores unitários para cada eixo.

Duas importantes propriedades do modelo são: (a) somente os spins vizinhos mais próximos são acoplados. A Hamiltoniana é tão local quanto possível; (b) o modelo tem simetria global. Se todos os spins são invertidos, H permanece inalterada.

As propriedades estatísticas do modelo vem da hipótese que a probabilidade para uma particular configuração de spin é proporcional a :

$$P = \exp(-\beta H) \quad (\text{II.2})$$

onde $\beta = 1/k_B T$. A termodinâmica do sistema pode ser obtida da função de partição :

$$Z = \sum_{\{\text{config.}\}} \exp(-\beta H) \quad (\text{II.3})$$

onde a soma é sobre todas as possíveis configurações de spin (numa rede de N pontos , existem 2^N de tais configurações). A energia livre de Helmholtz é dada por :

$$F = -k_B T \ln Z \quad (\text{II.4})$$

A magnetização média por ponto da rede, pode ser expressa como :

$$M = \langle (1/N) \sum_n S_n \rangle = \frac{\sum_{\{\text{config.}\}} \left[(1/N) \sum_n S_n \right] e^{-\beta H}}{Z} \quad (\text{II.5})$$

O modelo de Ising, em duas ou mais dimensões, pode desenvolver magnetização espontânea. Seja a rede imersa num campo magnético externo B. À temperatura fixa, se removermos o campo externo, e a magnetização M permanecer não-nula, o sistema é dito possuir magnetização espontânea. Por exemplo, isto ocorre se à temperatura zero o estado de menor energia do sistema tem todos os spins alinhados. Espera-se $M=1$ à temperatura zero, mas $M=0$ à temperatura infinita, onde a energia térmica sobrepõe as interações spin-spin. Sómente para temperaturas me-

nóres que um valor crítico T_c , magnetização espontânea ocorre, indicando que o estado de equilíbrio do sistema não possui a simetria global "up-down" da Hamiltoniana, ou seja, abaixo de T_c a simetria é espontaneamente quebrada. A magnetização espontânea está também intimamente relacionada ao comportamento da função de correlação spin-spin definida por

$$\Gamma_n = \frac{\langle S_n S_0 \exp(-\beta H) \rangle}{\langle \exp(-\beta H) \rangle} \quad (II.6)$$

II.2. Comportamento dos Sistemas próximos do Ponto Crítico-

Considerando a função de correlação definida acima, à temperatura zero, quando todos os spins apontam para cima, Γ_n é unitária, independente de n . Entretanto quando $T \rightarrow \infty$, excitações térmicas destroem as correlações spin-spin, tal que Γ_n é diferente de zero somente na origem. É esperado que à altas temperaturas, flutuações térmicas dominem a tendência de spins distantes de alinharem-se e correlacionarem-se. De fato Γ_n cai exponencialmente com a distancia entre os spins para alguma temperatura $T > T_c$:

$$\Gamma_n \sim \exp[-|n|/\xi(T)] \quad (II.7)$$

onde $\xi(T)$ é o "comprimento de correlação" do sistema. $\xi(T)$ dá a medida do tamanho do conjunto de spins correlacionados no sistema. A função de correlação à $T = T_c$ é esperada cair como uma potência de n e, por convenção, é escrita na

forma :

$$\Gamma_n \sim \frac{1}{\ln |d-2+\eta|} \quad (T = T_c) \quad (II.8)$$

onde d é a dimensionalidade do sistema e η (>0) é definido como sendo um expoente crítico. Para que as equações II.7 e II.8 sejam compatíveis, é necessário que $\xi(T)$ divergirá quando T aproxima de T_c por cima :

$$\xi(T) \sim (T - T_c)^{-\nu} \quad (T \rightarrow T_c^+) \quad (II.9)$$

onde ν (>0) é um outro expoente crítico padrão, o expoente crítico do comprimento de correlação. Uma outra quantidade de interesse é o calor específico :

$$C = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \quad (II.10)$$

onde F é a energia livre de Helmholtz. O calor específico próximo da temperatura crítica é divergente :

$$C \sim (T - T_c)^{-\alpha} \quad (T \rightarrow T_c^+) \quad (II.11)$$

onde α (>0) é o expoente crítico do calor específico.

Na região logo abaixo do ponto crítico, a magnetização é bem aproximada por :

$$M \sim (T_c - T)^\beta \quad (T \rightarrow T_c^-) \quad (II.12)$$

onde β (>0) é o expoente crítico do parâmetro de ordem ou da magnetização.

Na tabela I resumimos os principais expoentes críticos com os valores experimentais e teóricos.

TABELA I- Principais expoentes críticos e seus valores experimentais e teóricos (Hankey e Stanley 1972, Wilson e Kogut 1974)

Expoente	Nome	Definição	Valores Experimentais	Modelo de Ising $d=3$	Modelo de Heisenberg $d=3$
d (d')	calor específico	$H=0, M=0$ $C \sim \bar{z}^{-d}, T > T_c$ $C \sim (-\bar{z})^{-d'}, T < T_c$	$0 - 0,1$	$0,125$	$-0,1$
β	Parâmetro de Ordem	$H=0$ $M \sim (-\bar{z})^\beta$	$0,33 \pm 0,03$	$0,31$	$0,35$
γ (γ')	Função de Resposta Isotérmica	$H=0, M=0$ (susceptibilidade) $\chi_T \sim \bar{z}^{-\gamma}, T > T_c$ $\chi_T \sim (-\bar{z})^{-\gamma'}, T < T_c$	$\sim 1,33 \pm 0,3$ $\sim 1,24$	$1,25$	$1,4$
δ	Isoterma crítica	$T = T_c$ $H \sim M^\delta$	$4,4 \pm 0,4$	$5,15$	5
ν (ν')	Comprimento de correlação	$H=0, M=0$ $\xi \sim \bar{z}^{-\nu}, T > T_c$ $\xi \sim (-\bar{z})^{-\nu'}, T < T_c$	$0,65 \pm 0,3$	$0,64$	—
η	Função de correlação (d =dimens)	$T = T_c, H=0$ $M=0$ $\Gamma_n \sim \ln$ $-(d-2+\eta)$	$0,07 \pm 0,07$	$0,056$	muito pequeno

H = campo magnético externo

$\bar{z}$ = temperatura reduzida : $\bar{z} = \frac{T-T_c}{T_c}$

(*) Modelo de Heisenberg : $H = -J \sum_{n,i} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+i}, \vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$

Usando diferentes métodos, pode-se estabelecer que os expoentes críticos obedecem a uma série de inigualdades

(ou por hipótese de escala, tornarem-se igualdades (Kadanoff 1977)). Como exemplos podemos citar as relações:

$$\text{de Rushbrooke : } \alpha' + 2\beta + \delta' \geq 2 \quad (\text{II.13a})$$

$$\text{de Griffiths : } \alpha' + \beta(1+\delta) \geq 2 \quad (\text{II.13b})$$

$$\delta'(\delta+1) \geq (2-\alpha)(\delta-1) \quad (\text{II.13c})$$

$$\delta' \geq \beta(\delta-1) \quad (\text{II.13d})$$

$$\text{de Buckingham-Guntton: } d \frac{\delta-1}{\delta+1} \geq 2-\eta \quad (\text{II.13e})$$

Outro ponto importante à ser destacado a respeito dos índices críticos , é a de que muitos diferentes sistemas físicos possuem idênticos índices críticos. Sistemas próximos do ponto crítico podem ser caracterizados por um comprimento de correlação assintoticamente divergente :

$$\xi \sim |T-T_c|^{-\nu} \quad \text{para } T \rightarrow T_c \quad (\text{II.14})$$

o qual, suficientemente próximo da temperatura crítica T_c , é muito maior que comprimentos microscópicos típicos, tais como o espaçamento da rede ou o alcance das interações . Tal comportamento assintótico do sistema, quando $\xi \rightarrow \infty$, é largamente considerado como sendo imune aos detalhes das interações, isto é , os fenômenos críticos são universais (Kadanoff 1966, Fisher 1967) . Imagina-se então que os sistemas físicos podem ser organizados em "classes de universalidade" . Dentro de cada classe, cada substância tem comportamento crítico comum, com índices críticos idênticos. Estas classes são identificadas por : (1) a dimensão das variáveis locais na ação ;

(2) a simetria do parâmetro de ordem e (3) da dimensionalidade do sistema . O valor desta classificação é que ela nos diz o que nós podemos ignorar. Por exemplo, as características detalhadas da rede não são importantes, podendo afetar a temperatura crítica mas não as partes singulares das funções termodinâmicas na região crítica.

II.3. A Interface : Teoria Fenomenológica -

II.3.1. A Tensão Superficial :

Abaixo do ponto crítico em sistemas, como os magnéticos por exemplo, existe a possibilidade de duas fases homogêneas estáveis, as quais são caracterizadas por dois diferentes valores σ_+ e σ_- . Na linguagem magnética σ_+ corresponderia a uma fase magnetizada "para cima", enquanto que num fluido simples, poderia corresponder a fase líquida. Em sistemas simétricos, tais como magnetos, $\sigma_{\pm} = \pm M$, onde $M \sim |T - T_c|^\beta$ dá a forma da curva de coexistência e é referido como sendo o parâmetro de ordem.

Para discutir a coexistência de duas fases, nós podemos considerar o sistema dentro de um domínio cilíndrico $\mathcal{N}$ de comprimento $L(\mathcal{N})$ e "área" da secção transversal $A(\mathcal{N})$. Se os parâmetros termodinâmicos são ajustados tal que o sistema esteja sobre o contorno da fase (para um ferromagneto é a linha $T < T_c$, $H = 0$), uma fase termodinâmica específica pode ser estabelecida por meio de um campo externo acoplado ao parâmetro de ordem ou via uma apropriada série de paredes de

potencial W , as quais agem na vizinhança dos contornos (ou alternativamente, especificando condições de contorno que restringem o ensemble estatístico). Paredes de potencial podem ser escolhidas de modo a favorecer $\bar{\psi}^+$ na metade superior do domínio $\mathcal{N}$ e $\bar{\psi}^-$ na metade inferior. A configuração de paredes de potencial serão denotadas por W^{++} , claramente a fase uniforme $\bar{\psi}^-$ pode ser estabilizada por W^{--} . Paredes de potencial mistas W^{+-} ou W^{-+} , tenderão a produzir, intuitivamente falando, a uma inhomogeneidade localizada, uma interface separando a fase (+) em um final, da fase (-) no outro final. Se $\mathcal{F}(\tau; \mathcal{N}, W^{++})$ representa a energia livre na presença dos potenciais W^{++} , etc, a energia livre de interface por unidade de área ou tensão superficial é definida por :

$$f_{inter}(\tau) = \lim_{A(\mathcal{N}) \rightarrow \infty} [A(\mathcal{N})]^{-1} \lim_{L(\mathcal{N}) \rightarrow \infty} \left[\mathcal{F}(\tau; \mathcal{N}, W^{+-}) + \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \mathcal{F}(\tau; \mathcal{N}, W^{++}) - \frac{1}{2} \mathcal{F}(\tau; \mathcal{N}, W^{--}) \right] \quad (II.15)$$

a qual é o excesso de energia livre devido a presença da interface.

II.3.2. Teoria Clássica ou do Campo Médio :

Muitas informações qualitativas e semi-quantitativas sobre as características universais, delineação de classes de universalidade, etc, tem sido obtidas através da análise de um modelo genérico descrito pela Hamiltoniana de Landau-Ginzburg-Wilson (Jasnow 1984) escrita na forma :

$$\bar{H} = -\frac{H(\bar{\sigma})}{T} = -\int d\vec{x} \left(\frac{1}{2} (\nabla \bar{\sigma})^2 + \frac{1}{2} r \bar{\sigma}^2 + u \bar{\sigma}^4 - h \bar{\sigma} \right) \quad (\text{II.16})$$

onde u é um parâmetro determinado pelos detalhes das interações, $r \propto [T - T_c]$ e h representa um campo magnético externo aplicado (no caso de sistemas magnéticos). A termodinâmica é obtida através da função de partição :

$$Z = \int D\bar{\sigma} \exp \left[\bar{H}(\bar{\sigma}(\vec{x})) \right] \quad (\text{II.17})$$

isto é, uma integral sobre funções $\bar{\sigma}(\vec{x})$ as quais especificam as configurações com peso dado por $\bar{H}(\bar{\sigma})$. Maximizando $\bar{H}(\bar{\sigma})$ obtemos a equação de estado :

$$h = r \bar{\sigma} + 4u \bar{\sigma}^3 \quad (\text{II.18})$$

a qual é similar em estrutura à equação clássica de van der Waals. Para $h=0$ e $T < T_c$ ou $r < 0$, obtemos as duas fases com valores do parâmetro de ordem :

$$\bar{\sigma} = \pm (-r/4u)^{1/2} = \bar{\sigma}_{\pm} = \pm \bar{\sigma}_0 \quad (\text{II.19})$$

Abaixo de T_c , a solução $\bar{\sigma} = 0$ é instável. Os dois valores de $\bar{\sigma}$ correspondem, na linguagem do magnetismo, aos dois valores de magnetização espontânea, isto é, as fases magnetizadas de spin "up" e "down". Podemos ainda obter a função de correlação (ver por exemplo Amit 1978), cuja forma no espaço de Fourier

é :

$$G(\vec{R}) = (\vec{R}^2 + \xi^{-2})^{-1} \quad (\text{II.20})$$

a qual define o comprimento de correlação do sistema, ξ , para as fases homogêneas, possuindo os valores :

$$\begin{aligned} \xi &= r^{-1/2} \quad (r > 0 \text{ ou } T > T_c) \\ &= (-2r)^{-1/2} \quad (r < 0 \text{ ou } T < T_c) \end{aligned} \quad (\text{II.21})$$

mostrando então que o expoente crítico ν é universal, ou seja, independente de u , o qual é determinado pelos detalhes das interações, e que em campo médio possui o valor $\nu = 1/2$.

As propriedades da interface são obtidas através da equação de movimento de $\bar{H}$:

$$-\nabla^2 \bar{U}_0(\vec{x}) + r \bar{U}_0(\vec{x}) + 4u \bar{U}_0^3(\vec{x}) = h \quad (\text{II.22})$$

Para $h=0$, $r < 0$ e imaginando que as condições de contorno ou o potencial da parede requer

$$\bar{U}_0(\vec{x}) = \bar{U}_0(\vec{x}_T, x_L) \rightarrow \pm \bar{U}_0 \quad \text{para } x_L \rightarrow \pm \infty \quad (\text{II.23})$$

onde $\vec{x}_T$ e x_L são as coordenadas transversais e longitudinal do espaço respectivamente e o parâmetro de ordem tem como limite os valores de equilíbrio. Podemos ainda esperar que os potenciais possuem o perfil invariante translacional-

mente, isto é, independente de $\vec{x}_T$, no espaço (d-1) dimensional perpendicular ao eixo x_L . Das condições impostas, nós encontramos a "forma" do parâmetro de ordem (Cahn e Hilliard 1958) :

$$\bar{U}_0(x_L) = \bar{U}_0 \tanh[(x_L - x_L^0)/2\xi] \quad (\text{II.24})$$

onde x_L^0 é uma constante arbitrária indicando o centro da interface.

O parâmetro de ordem $\bar{U}_0$ depende de u e então não é universal, no entanto a dependência na temperatura é universal : da equação II.19, temos que $\bar{U}_0 \sim |T_c - T|^{1/2}$ ou $\beta = 1/2$ em teoria de campo médio. No entanto a solução adimensional $m(x_L/\xi)$:

$$m(x_L/\xi) = \frac{\bar{U}_0(x_L)}{\bar{U}_0}, \quad m(x) \rightarrow \pm 1 \text{ para } x \rightarrow \pm \infty \quad (\text{II.25})$$

é independente de u e portanto independente do sistema e a temperatura entra sómente em ξ . Isto sugere então que $m(x)$ é universal e em teorias do campo médio possui a forma:

$$m(x) = \tanh(x/2) \quad (\text{II.26})$$

A equação acima leva-nos a hipótese de escala para a interface entre duas fases coexistindo e, se verdadeira, sugere que um perfil universal da interface existe e uma definição razoável da largura da interface poderia ser :

$$l \propto \xi \sim |T_c - T|^{-\nu} \quad (\text{II.27})$$

isto é, a largura da interface diverge proporcionalmente ao comprimento de correlação quando $T \rightarrow T_c$. Entretanto resultados experimentais em fenômenos críticos indicam que a equação II.26 e os expoentes de campo médio ($\nu = 1/2$, $\beta = 1/2$) são incorretos para sistemas 3D com interações de curto alcance.

Em teorias clássicas podemos ainda, facilmente calcular a tensão superficial, calculando a diferença de energia livre entre uma fase uniforme com ordem espontânea $\bar{U}_0$ e uma fase não uniforme caracterizada por $m(x)$, cujo resultado é (por exemplo Widom 1972) :

$$f_{\text{interfacial}}/k_B T = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d \bar{U}_0(x_L)}{dx_L} \right) dx_L \quad (\text{II.28})$$

e

$$\begin{aligned} f_{\text{interfacial}} &\propto \bar{U}_0^2 \xi^{-1} \sim |\Delta T|^{2\beta + \nu} \\ &\sim |\Delta T|^{3/2} \quad (\text{teoria de campo médio}) \end{aligned} \quad (\text{II.29})$$

mostrando que para $T \rightarrow T_c$ a tensão superficial se anula, com expoente característico $\mu = 3/2$.

II.3.3. Homogeneidade e Escala :

Se nós assumimos que próximo de T_c existe um comprimento característico ξ e portanto a largura $l \propto \xi$, então

poderíamos ter que o excesso de energia livre associada com uma interface de área A é da ordem de $\Delta F \sim A f_{\text{inter}}$. Se a região interfacial tem largura ξ , podemos associar um excesso de energia livre por unidade de volume $\Delta F = f_{\text{inter}} A / \xi \sim f_{\text{inter}} \xi^{-1}$ com a região interfacial. Se esta densidade de energia livre varia com a temperatura da mesma forma que a parte singular da energia livre de Helmholtz do sistema, então $f_{\text{inter}} \xi^{-1} \sim F_{\text{sing}} \sim |\Delta T|^{2-\alpha}$ onde α é o expoente padrão do calor específico. Os argumentos acima sugerem então que :

$$f_{\text{inter}} \sim |\Delta T|^4 \sim \xi |\Delta T|^{2-\alpha} \sim |\Delta T|^{2-\alpha-\nu} \quad (\text{II.30})$$

e usando a lei de escala $\alpha + 2\beta + \nu = 2$ nós chegamos à relação :

$$\begin{aligned} \eta &= 2 - \alpha - \nu \\ &= 2\beta + \gamma - \nu \end{aligned} \quad (\text{II.31})$$

a qual é satisfeita dentro da teoria clássica ($2\beta = 2\nu = \gamma = 1$), e esperamos que a relação acima seja válida em geral. Usando os valores experimentais dados na tabela I, (seção II.2), temos :

$$\eta \simeq 2 \cdot (0,33) + 1,24 - 0,65 \simeq 1,25 \quad (\text{II.32})$$

o qual esta dentro dos próprios limites experimentais nos estudos sobre a interface próxima da criticalidade (Jasnow 1984).

Introduzindo agora a noção de hiper-escala, a qual representa uma relação adicional entre os expoentes, envolvendo a dimensionalidade d do sistema :

$$d\nu = 2 - \alpha \quad (II.33)$$

e retornando à relação II.31, $\gamma = 2 - \alpha - \nu$, obtemos :

$$\gamma = (d-1)\nu \quad (II.34)$$

a qual também é suposta ser uma relação válida, pelo menos dentro dos limites de precisão experimentais disponíveis presentemente. Note porém que as relações envolvendo hiper-escala não são concordantes dentro da teoria clássica.

Podemos ainda obter a relação II.30 baseando-se em "finite-size scaling" (Fisher et al 1973), em que se assume que a energia livre por unidade de volume em um sistema de comprimento L (e "área" infinita) tem a forma :

$$F^{(\pm)}(T, L) \approx L^w X^{(\pm)}(L/\xi) \quad (II.35)$$

onde $\pm = +, -$, corresponde às condições de contorno "uniforme" ou "mista" respectivamente, a primeira produzindo uma fase homogênea e a última introduzindo uma interface.

Para $L/\xi \rightarrow \infty$, nós devemos ter :

$$F^{(\pm)} \approx \xi^{-(2-\alpha)/\nu} \sim (\Delta T)^{2-\alpha} \quad (II.36)$$

portanto

$$X^{(r)}(x) \rightarrow \chi_{\infty} x^{-\omega} \quad (\text{II.37})$$

e identificamos :

$$\omega = -(2 - \alpha)/\nu \quad (\text{II.38})$$

Mas a diferença das densidades de energia livre é proporcional à energia livre da interface, ou para $L \rightarrow \infty$:

$$F^{(-)} - F^{(+)} \approx \frac{f_{\text{interf}}(\tau)}{L} + \dots \quad (\text{II.39})$$

escrevendo, então :

$$X^{(-)}(x) - X^{(+)}(x) \approx \chi_{\infty} x^{-\varphi} \quad \text{para } x \rightarrow \infty \quad (\text{II.40})$$

nós obtemos

$$F^{(-)} - F^{(+)} \approx \chi_{\infty} L^{-(2 - \alpha + \nu\varphi)/\nu} \quad (\text{II.41})$$

o que requer, comparando com II.39 :

$$(2 - \alpha + \nu\varphi)/\nu = 1 \quad (\text{II.42})$$

ou

$$\varphi = -(2-d-\nu)/\nu \quad (\text{II.43})$$

Então

$$f_{\text{interf.}} \sim \xi^{-(2-d-\nu)/\nu} \sim |\Delta T|^{2-d-\nu} \quad (\text{II.44})$$

o que está de acordo com II.30 .

II.4. O Limite do Contínuo

Tomemos a função de partição para o modelo de Ising, equação II.3 :

$$Z_{\text{Ising}} = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-S_{\text{Ising}}) \quad (\text{II.45})$$

onde S_{Ising} é a ação de Ising :

$$S_{\text{Ising}} = -K \sum_n \sum_{\hat{i}} \sigma_n \sigma_{n+\hat{i}} \quad (\text{II.46})$$

Podemos formular tal modelo considerando uma rede hipercúbica assimétrica, ou seja, nas 3 dimensões espaciais da rede, tenhamos espaçamento a_s e para a dimensão restante, a direção "temporal", um espaçamento a_t , podemos representar a ação como :

$$S = -K_s \sum_{x,i} \sigma(x_\nu + a_s \hat{e}_i) \sigma(x_\nu) - K_t \sum_x \sigma(x_\nu + a_t e_0) \sigma(x_\nu) \quad (\text{II.47})$$

onde K_s e K_t são as constantes de acoplamento, entre os

vizinhos mais próximos, nas direções espacial e "temporal" respectivamente e $e_\nu = (\hat{e}_i, e_0) = (e_1, e_2, e_3, e_0)$ são vetores unitários da rede.

Podemos reescrever a função de partição II.45 com a ação II.47, permitindo que os spins tomem valores contínuos mas regulados por uma função δ de modo a restringir seus valores à $\sigma(x_\nu) = \pm 1$:

$$Z = \prod_x \left[\int d\sigma(x_\nu) \delta(1 - \sigma^2(x_\nu)) \right] \exp \left[K_s \sum_{x,i} \sigma(x_\nu + a_s \hat{e}_i) \sigma(x_\nu) + \right. \\ \left. + K_t \sum_x \sigma(x_\nu + a_t e_0) \sigma(x_\nu) \right] \quad (\text{II.48})$$

onde $d\sigma(x_\nu)$ indica que estamos fazendo uma integração funcional em $\sigma(x_\nu)$. Temos ainda que se:

$$\delta(1 - \sigma^2(x_\nu)) = \lim_{g \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{g}{\pi}} \exp \left\{ -g [1 - \sigma^2(x_\nu)]^2 \right\} \quad (\text{II.49})$$

então podemos adicionar à função de partição o termo $\exp[2g\sigma^2(x_\nu) - g\sigma^4(x_\nu)]$, a menos de uma constante, tal que no limite $g \rightarrow \infty$ reobtemos o modelo anterior. Então:

$$Z = N \int \prod_x d\sigma(x_\nu) \exp \left[K_s \sum_{x,i} \sigma(x_\nu + a_s \hat{e}_i) \sigma(x_\nu) + \right. \\ \left. + K_t \sum_x \sigma(x_\nu + a_t e_0) \sigma(x_\nu) + 2g \sum_x \sigma^2(x_\nu) - g \sum_x \sigma^4(x_\nu) \right] \quad (\text{II.50})$$

Mas podemos fazer as transformações:

ou seja, fazendo $a_t \rightarrow 0$ e $N_t \rightarrow \infty$ com $N_t a_t = \text{fixo}$, procedimento este comumente utilizado nas simulações numéricas do modelo $\lambda \phi^4$ à temperatura finita (Löhneysen et al 1987). Então se próximo do ponto crítico (para temperaturas próximas de T_c), quando as escalas de comprimento de interesse (digamos, o comprimento de correlação) são grandes comparadas com as escalas de comprimento microscópicas, podemos tomar a ação do modelo $\lambda \phi^4$ no contínuo à temperatura finita dada abaixo (equação II.57) (Bernard 1974) como sendo uma apropriada descrição do modelo de Ising 3D em temperaturas próximas de T_c

$$S = \int_0^{\beta} dz \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} (\partial_i \phi(x))^2 + \frac{1}{2} (\partial_0 \phi(x))^2 + \frac{m^2}{2} \phi^2(x) + \frac{\lambda}{4} \phi^4(x) \right\} \quad (\text{II.57})$$

onde podemos tomar $m^2 = -\mu^2$ ($\mu^2 > 0$), de modo à podermos ter quebra espontânea de simetria (ver próximo capítulo).

III. TEORIA DE CAMPOS Á TEMPERATURA FINITA - O POTENCIAL EFETIVO -

III.1. A Função de Partição na Representação Funcional -

Em mecânica estatística a termodinâmica de um determinado sistema pode ser obtida da função de partição :

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (\text{III.1})$$

onde $\beta = 1/k_B T$, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura, e a soma é sobre todas as configurações de energia E_n .

Quanticamente podemos expressar a função de partição considerando autoestados ortonormais $|n\rangle$, com autovalores de energia E_n do operador Hamiltoniano H , ou seja, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, então :

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta H}) \quad (\text{III.2})$$

Temos então que a teoria à temperatura finita é definida como sendo àquela dada pelo ensemble canônico, com a matriz densidade $\exp(-\beta H)$ representando o comportamento de equilíbrio do sistema que é fracamente acoplado à um banho de calor externo. Todas as quantidades termodinâmicas podem ser extraídas da função de partição, como por exemplo a energia livre :

$$F = -\beta^{-1} \ln Z \quad (\text{III.3})$$

O valor esperado de algum observável $\mathcal{O}$ é dado por :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr} [\mathcal{O} \exp(-\beta H)] / Z \quad (\text{III.4})$$

A representação por integral funcional pode ser derivada destas quantidades pela repetida inserção de estados completos $\int \frac{dn}{2\pi\hbar} |n\rangle \langle n| = 1$.

Se tomarmos como exemplo a Hamiltoniana na forma padrão $\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + V(\hat{x})$ e usando a identidade :

$$e^{-\beta H} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\beta}{N} H \right)^N \quad (\text{III.5})$$

então a função de partição fica :

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dp_1}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_N}{2\pi\hbar} dx_1 \dots dx_N \langle p_N | (1 - \frac{\epsilon}{\hbar} H) | x_N \rangle \langle x_N | p_{N-1} \rangle \dots$$

$$\langle p_{N-1} | (1 - \frac{\epsilon}{\hbar} H) | x_{N-1} \rangle \dots \langle p_1 | (1 - \frac{\epsilon}{\hbar} H) | x_1 \rangle \langle x_1 | p_N \rangle =$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left(\prod_i \frac{dp_i}{2\pi\hbar} \right) \left(\prod_i dx_i \right) \exp \left\{ -\frac{\epsilon}{\hbar} \sum_i \left[\frac{1}{2} p_i^2 + V(x_i) + \right. \right. \\ \left. \left. - i p_i \frac{(x_{i+1} - x_i)}{\epsilon} \right] \right\} \quad (\text{III.6})$$

onde $\epsilon = \frac{\beta\hbar}{N}$ e $x_{N+1} = x_1$. Na equação acima podemos fazer a integração em p_i (as integrais são Gaussianas), obtendo :

$$Z = N(\beta) \int_{x(0)=x(\beta\hbar)} [Dx(t)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} dt \left[\frac{1}{2} \dot{x}^2(t) + V(x(t)) \right] \right\} \quad (\text{III.7})$$

onde $N(\beta)$ é uma constante obtida ao realizar a integração e o limite. O argumento da exponencial é $(-1/\hbar)$ vezes a ação Euclideana, $S_E \equiv \int_0^{\beta\hbar} dt \left[\frac{1}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right]$, e a integral é sobre todas as trajetórias periódicas, de período $\beta\hbar$.

A extensão do formalismo funcional para teorias de campo pode ser igualmente feita sem problemas. Considerando inicialmente uma teoria quântica de campos descrita por uma densidade de Hamiltoniana $\mathcal{H}$ que depende de $\phi(\vec{x}, t)$, o operador de campo na representação de Heisenberg, e de $\pi(\vec{x}, t)$, o momento canonicamente conjugado de ϕ (a generalização para uma teoria com muitos campos é imediata). Tomemos $\phi(\vec{x}, 0)$ como sendo o operador de campo na representação de Schrödinger, $|\phi_0\rangle$ e $|\phi_1\rangle$ seus autoestados, com autovalores $\phi_0(\vec{x})$ e $\phi_1(\vec{x})$, então:

$$\phi(\vec{x}, 0) |\phi_0\rangle = \phi_0(\vec{x}) |\phi_0\rangle$$

$$\phi(\vec{x}, 0) |\phi_1\rangle = \phi_1(\vec{x}) |\phi_1\rangle \quad (\text{III.8})$$

Então o funcional de Feynman na forma Hamiltoniana (Feynman e Hibbs 1965) dá a amplitude de transição de ir de $|\phi_0\rangle$ à $t=0$ para $|\phi_1\rangle$ à $t=t_1$:

$$\langle \phi_1 | e^{-iHt_1} | \phi_0 \rangle = N \int [D\pi] [D\phi] \exp \left\{ i \int_0^{t_1} dt \int d^3x \left[\pi \dot{\phi} - \mathcal{H}(\pi, \phi) \right] \right\} \quad (\text{III.9})$$

onde a integral em $[D\phi]$ é efetuada sobre as possíveis configurações que começam em $\phi_0(\vec{x})$ à $t=0$ até $\phi_1(\vec{x})$ à $t=t_1$. N é uma constante de normalização e a integral em $[D\pi]$ não é restrita por qualquer vínculo, sendo esta integração sempre a primeira a ser efetuada à fim de evitar-se ambiguidades (Bernard 1974). Fazendo então $it_1 = \beta$, ou seja, o que equivale à uma rotação de Wick na expressão III.9, definindo-se $\tau = it$, temos que $\frac{\partial \phi}{\partial t} = i \frac{\partial \phi}{\partial \tau}$ e então obtemos a função de partição $Z = \text{Tr } e^{-\beta H}$, simplesmente permitindo que $\int [D\phi]$ seja realizado sobre todas as configurações de campo periódicas (para campos bosônicos) no tempo euclidiano de período β : $\phi(\vec{x}, 0) \equiv \phi(\vec{x}, \beta)$, o que equivale, para bósons, a trocar a energia k_0 por $\frac{2\pi n}{\beta}$ e somar sobre n inteiros em vez de integrar sobre k_0 . Temos então:

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta H} = \sum_{\phi} \langle \phi | e^{-\beta H} | \phi \rangle = N \int [D\pi] \int [D\phi] \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[i\pi \dot{\phi} - \mathcal{H}(\pi, \phi) \right] \right\} \quad (\text{III.10})$$

Para

$$\mathcal{H}(\pi, \phi) = \frac{1}{2} \pi^2 + \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \phi)^2 + V(\phi) \quad (\text{III.11})$$

obtemos

$$Z = N(\beta) \int [D\phi] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_{\text{Euc.}}(\phi, \dot{\phi}) \right\} \quad (\text{III.12})$$

onde $\dot{\phi} = i \frac{\partial \phi}{\partial t}$ e $\mathcal{L}_{\text{Eucl.}}(\phi, \dot{\phi}) = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + V(\phi)$ é a densidade de Lagrangeana Euclideana.

III.2. A Teoria $\lambda (\phi^2)^2$ com Quebra Espontânea de Simetria $O(N)$ -

Consideremos agora uma densidade de Lagrangeana de N campos escalares com interação invariante por simetria $O(N)$:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi_i) (\partial^\mu \phi_i) - \frac{m^2}{2} \phi^2 - \frac{\lambda}{4} \phi^4 \quad (\text{III.13})$$

onde $\phi^2 = \phi_i \phi_i$; $\phi^4 = (\phi^2)^2$; $i = 1, \dots, N$.

A expressão para o potencial de um campo constante $\phi = \bar{\sigma}$ ao nível clássico, é dado por :

$$U(\bar{\sigma}) = \frac{1}{2} m^2 \bar{\sigma}^2 + \frac{\lambda}{4} (\bar{\sigma}^2)^2 \quad (\text{III.14})$$

Para $m^2 = -\mu^2$ ($\mu^2 > 0$), $U(\bar{\sigma})$ possui estados de menor energia em $\bar{\sigma}_0^2 = \mu^2/\lambda$. Se consideramos todas as direções no espaço das componentes de $\bar{\sigma}_0$ equivalentes, podemos escolher que

$$\bar{\sigma}_i = 0 \quad ; \quad i = 1, \dots, N-1$$

$$\bar{\sigma}_N = \pm \mu/\sqrt{\lambda} \quad (\text{III.15})$$

ou

$$\vec{\bar{\sigma}}_0 = (0, \dots, \pm \mu/\sqrt{\lambda}) \quad (\text{III.16})$$

ou seja, temos o que se chama de uma quebra espontânea da simetria $O(N)$, com o potencial tendo mínimos não em $\vec{\sigma} = (0, \dots, 0)$

mas em $\vec{v}_0 = (0, \dots, +\mu/\sqrt{\lambda}) = +\vec{\Phi}_v$ ou $\vec{v}_0 = (0, \dots, -\mu/\sqrt{\lambda}) = -\vec{\Phi}_v$, que são os vácuos clássicos da teoria, com a quebra de simetria ocorrendo na direção de $\vec{v}_0$.

As equações de movimento para os campos ϕ_i são dadas por :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi_i} - \frac{\partial_\mu \partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi_i)} = 0 \quad (\text{III.17})$$

de III.13, obtemos :

$$\square \phi_i + (\mu^2 - \lambda \vec{\Phi}^2) \phi_i = 0 \quad (\text{III.18})$$

onde $\square \equiv \partial_\mu \partial_\mu$. Uma solução possível para a equação acima é uma solução não-trivial, independente de $\vec{x}$, a qual corresponde a uma solução conhecida como Kink (Rajaraman 1975) :

$$\phi_k = \pm \frac{\mu}{\sqrt{\lambda}} \tanh \frac{\mu x_L}{\sqrt{2}} \quad (\text{III.19})$$

onde x_L representa a coordenada espacial longitudinal (em 3 dimensões espaciais $\vec{x} = (\vec{x}_T, x_L)$, onde $\vec{x}_T$ representa as duas coordenadas transversais restantes). Tal solução aproxima assintoticamente de dois diferentes valores, $\pm \mu/\sqrt{\lambda}$, quando $x_L \rightarrow \pm \infty$. Estes valores são justamente os dois vácuos clássicos degenerados :

$$\langle 0 | \vec{\Phi} | 0 \rangle = \begin{cases} +\vec{\Phi}_v = (0, \dots, +\mu/\sqrt{\lambda}) \\ \text{ou} \\ -\vec{\Phi}_v = (0, \dots, -\mu/\sqrt{\lambda}) \end{cases} \quad (\text{III.20})$$

A equação III.19 tem a forma apresentada na figura abaixo:

Figura III.1. Solução estática $\phi_z = u/\sqrt{\lambda} \tanh u x_L/\sqrt{\lambda}$ centrada em $x_L = 0$.

III.3.0 Método do Potencial Efetivo no Estudo das Transições de Fase em Teorias de Campo à Temperatura Finita -

Em teorias de campo com simetrias espontaneamente quebradas à temperatura zero, é esperado, da mesma forma que nos casos em mecânica estatística que, para temperaturas acima de um determinado valor crítico T_c , essa simetria seja restaurada. Dentre as abordagens possíveis ao estudo de transições de fase na teoria de campos à temperatura finita, a mais popular consiste do método do potencial efetivo que derivaremos rapidamente abaixo (para mais detalhes, ver por exemplo, Brandenberger 1985).

O potencial efetivo inclui todas as correções quânticas para o potencial da teoria de campos clássica. Podemos dizer que, minimizando o potencial efetivo, obtemos a

configuração de campo de energia mínima, o vácuo da teoria. Então pelo estudo do potencial efetivo nós podemos obter informações sobre as simetrias de toda a teoria e não somente aquelas da Lagrangeana.

Para definirmos o potencial efetivo, comecemos por relembrar o formalismo de funcionais geradores. Definindo primeiramente as funções de Green à temperatura finita para um campo escalar ϕ :

$$G_n^{\beta}(x_1, \dots, x_n) = \frac{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H} T \left[\phi(x_1) \dots \phi(x_n) \right] \right\}}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \quad (\text{III.21})$$

onde H é a Hamiltoniana que governa a dinâmica do campo $\phi(x)$ e T é o símbolo de ordenação em $\mathcal{C}$.

Em analogia com o caso à temperatura zero, nós podemos obter as funções de Green à temperatura finita usando o formalismo funcional. O funcional gerador à temperatura finita é dado por :

$$Z^{\beta}(J) = \frac{\text{Tr} \left[e^{-\beta H} T \exp \left[i \int J(x) \phi(x) d^4x \right] \right]}{\text{Tr} e^{-\beta H}} \quad (\text{III.22})$$

onde $J(x) \phi(x)$ representa o termo de fonte, $J(x)$ é um campo externo clássico. As funções de Green são então obtidas por :

$$G_n^{\beta}(x_1, \dots, x_n) = \left[\frac{\delta}{\delta J(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta J(x_n)} Z^{\beta}(J) \right] \Big|_{J=0} \quad (\text{III.23})$$

Igualmente podemos utilizar a representação em integrais funcionais. Neste caso :

$$Z^\beta(J) = N \int [D\phi] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[\mathcal{L}_E(\phi(x)) - J(x)\phi(x) \right] \right\} \quad (\text{III.24})$$

onde $\mathcal{L}_E(\phi)$ é a densidade de Lagrangeana Euclideana e o funcional gerador $Z^\beta(J)$, para $J=0$, é exatamente a função de partição, equação III.12.

As funções de Green conexas $G_n^c(x_1, \dots, x_n)$ são obtidas a partir do funcional gerador $W^\beta(J)$:

$$G_n^c(x_1, \dots, x_n) = \left[\frac{\delta}{\delta J(x_1)} \dots \frac{\delta}{\delta J(x_n)} W^\beta(J) \right] \Big|_{J=0} \quad (\text{III.25})$$

e a conexão entre $Z^\beta(J)$ e $W^\beta(J)$ é dada por:

$$W^\beta(J) = \ln Z^\beta(J) \quad (\text{III.26})$$

No entanto o valor médio do campo ϕ é dado por:

$$\bar{\phi}(x) \equiv \frac{\int [D\phi] \phi(x) \exp \left\{ - S_{E_{\text{ucl}}}(\phi, J) \right\}}{\int [D\phi] \exp \left\{ - S_{E_{\text{ucl}}}(\phi, J) \right\}} = \frac{\delta W}{\delta J} \quad (\text{III.27})$$

onde $S_{E_{\text{ucl}}}(\phi, J) = \int_0^\beta d\tau \int d^3x (\mathcal{L}_{E_{\text{ucl}}} - J\phi)$. Escrevendo o funcional $W^\beta(J)$ em função de $\bar{\phi}$, através de uma transformada de Legendre, obtemos a definição do funcional gerador das funções de 1P.I. ou a Ação efetiva:

$$\Gamma^\beta(\bar{\phi}) = W^\beta(J) - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \bar{\phi}(x) J(x) \quad (\text{III.28})$$

o que implica em $\frac{\delta \Gamma^\beta(\bar{\phi})}{\delta \bar{\phi}(x)} = -J(x)$.

Em uma teoria invariante translacionalmente, $\bar{\Phi}(x)$ deverá ser independente de x , então é suficiente estudar $\Gamma^\beta(\bar{\Phi})$ para $\bar{\Phi}(x) = \phi_0$ constante. Podemos então definir o potencial efetivo por :

$$\Gamma^\beta(\phi_0) = \int_0^\beta d\tau \int d^3x \left[-V_{\text{eff}}^\beta(\phi_0) \right] \quad (\text{III.29})$$

ou

$$V_{\text{eff}}^\beta(\phi_0) = -\frac{1}{\beta V} \Gamma^\beta(\phi_0) \quad (\text{III.30})$$

Podemos obter o significado do potencial efetivo, tomando inicialmente uma expansão em série de Taylor de $\Gamma^\beta(\bar{\Phi})$

$$\Gamma^\beta(\bar{\Phi}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \int d^3x_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \int d^3x_n \Gamma^{(n)}(\bar{x}_1, \tau_1; \dots; \bar{x}_n, \tau_n) \bar{\Phi}(x_1) \dots \bar{\Phi}(x_n) \quad (\text{III.31})$$

onde $\Gamma^{(n)}$ são derivadas funcionais n -ésimas de Γ^β . A transformada de Fourier de $\Gamma^{(n)}$ é dada por :

$$\Gamma^{(n)}(\bar{x}_1, \tau_1; \dots; \bar{x}_n, \tau_n) = \left(\frac{i}{\beta}\right)^n \sum_{j_1, \dots, j_n = -\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^n \left[\int \frac{d^3k_i}{(2\pi)^3} e^{-i(\vec{k}_i \cdot \vec{x}_i + \omega_i \tau_i)} \right] \times \tilde{\Gamma}_i^{(n)}(\vec{k}_1, \omega_1; \dots; \vec{k}_n, \omega_n) \quad (\text{III.32})$$

onde $\omega_i = \frac{2\pi j_i}{\beta}$, com j_i 's inteiros.

No entanto para o caso de invariância translacional ($\bar{\Phi}(x) = \phi_0$) temos que :

$$\tilde{\Gamma}^{(n)}(\vec{k}_1, \omega_1; \dots; \vec{k}_n, \omega_n) = (2\pi)^3 \beta \delta_{\sum_i \omega_i} \delta(\sum_i \vec{k}_i) \bar{\Gamma}^{(n)}(\vec{k}_1, \omega_1; \dots, \vec{k}_n, \omega_n) \quad (\text{III.33})$$

Substituindo III.33 em III.32 e retornando à equação III.31, obtemos :

$$\Gamma^\beta(\phi_0) = \beta V \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \bar{\Gamma}^{(n)}(\vec{0}, 0; \dots; \vec{0}, 0) \phi_0^n \quad (\text{III.34})$$

Da definição do potencial efetivo, obtemos então que :

$$V_{\text{eff}}^\beta(\phi_0) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \bar{\Gamma}^{(n)}(\vec{0}, 0; \dots; \vec{0}, 0) \phi_0^n \quad (\text{III.35})$$

ou seja, o potencial efetivo pode ser interpretado como sendo o funcional gerador para os gráficos de 1P.I. com momentos externos nulos. Nós podemos calculá-lo somando todos os gráficos 1P.I. e inserindo um fator ϕ_0 para cada linha externa.

Podemos notar ainda que, da definição de $\bar{\Phi}(x)$, se $J=0$, obtemos a média termodinâmica de $\phi(x)$, ou seja, $\frac{\delta W^A}{\delta J} \Big|_{J=0} = \langle \phi \rangle_T$, que em teorias com quebra espontânea de simetria, na fase quebrada teríamos $\langle \phi \rangle_T = \phi_v \neq 0$ e na fase simétrica, $\langle \phi \rangle_T = 0$. Então na situação onde $\phi_0 = \phi_v \neq 0$, quando $J=0$, a expansão III.31 poderia ser realizada sobre um valor não-nulo de ϕ_0 , notadamente $\phi_0 = \phi_v$, pois os $\Gamma^{(n)}$'s são definidos à $J=0$, onde podemos ter $\phi_v \neq 0$. A equação III.35 fica então :

$$V_{\text{eff}}^\beta(\phi_0) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \bar{\Gamma}^{(n)}(\vec{0}, 0; \dots; \vec{0}, 0) (\phi_0 - \phi_v)^n \quad (\text{III.36})$$

e da equação III.28 ,obtemos que :

$$\left(\frac{\delta \Gamma}{\delta \bar{\Phi}} \right)_{\bar{\Phi}=\Phi_v} = 0 \quad (J=0) \quad (\text{III.37})$$

Portanto se existirem soluções $\bar{\Phi} = \Phi_v \neq 0$ da equação acima e que correspondem aos mínimos de V_{eff}^P ,então temos uma teoria com quebra espontânea de simetria.

Como exemplo,calcularemos o potencial efetivo para a densidade de Lagrangeana III.13 :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi_a) (\partial_\mu \phi_a) - \frac{m^2}{2} \phi^2 - \frac{\lambda}{4} (\phi^2)^2 \quad (\text{III.38})$$

com $m^2 < 0$. A Lagrangeana é invariante por simetria $O(N)$ e $\phi^2 = \phi_a \phi_a$, $a=1, \dots, N$.Fazendo $\phi_a \rightarrow \phi_a + \bar{\Phi}_a$,onde $\bar{\Phi}_a$ são campos clássicos independentes de x ($\bar{\Phi}_a \equiv \phi_a$), substituindo em $\mathcal{L}$,obtemos :

$$\mathcal{L}(\phi_a, \bar{\Phi}_a) = \mathcal{L}(\bar{\Phi}_a) + \mathcal{L}_o(\phi_a, \bar{\Phi}_a) + \mathcal{L}_I(\phi_a, \bar{\Phi}_a) \quad (\text{III.39})$$

onde $\mathcal{L}_o(\phi_a, \bar{\Phi}_a)$ possui somente termos quadráticos em ϕ_a e em $\mathcal{L}_I(\phi_a, \bar{\Phi}_a)$ os termos restantes (linear, cúbico e quartíco em ϕ_a).

Em nossos cálculos estamos somente interessado nas contribuições dos gráficos de 1-loop,então necessitamos apenas dos termos quadráticos em ϕ_a .O termo $\mathcal{L}(\bar{\Phi}_a)$ nos dará o potencial clássico ou ao nível da "árvore".

Nossa função de partição, equação III.12 ,será

então dada por :

$$Z^{\beta}(\bar{\Phi}) = N \int [D\Phi] \exp \left\{ - \int_0^{\beta} d\tau \int d^3x \left[\mathcal{L}_{\text{Eucl.}}(\bar{\Phi}_a) + \mathcal{L}_{o_{\text{Eucl.}}}(\Phi_a, \bar{\Phi}_a) \right] \right\} \quad (\text{III.40})$$

onde $\mathcal{L}_{\text{Eucl.}}(\bar{\Phi}_a)$ e $\mathcal{L}_{o_{\text{Eucl.}}}(\Phi_a, \bar{\Phi}_a)$ são as densidades de Lagrangeana Euclidianas :

$$\mathcal{L}_{\text{Eucl.}}(\bar{\Phi}_a) = -\frac{\gamma^2}{2} \bar{\Phi}^2 + \frac{\lambda}{4} (\bar{\Phi}^2)^2 \quad (\text{III.41a})$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{o_{\text{Eucl.}}}(\Phi_a, \bar{\Phi}_a) = & \frac{1}{2} (\partial_0 \Phi_a)(\partial_0 \Phi_a) + \frac{1}{2} (\partial_i \Phi_a)(\partial_i \Phi_a) + \\ & + \frac{1}{2} \Phi_a \left[-\gamma^2 \delta_{ab} + \lambda \bar{\Phi}^2 \delta_{ab} + 2\lambda \bar{\Phi}_a \bar{\Phi}_b \right] \Phi_b \end{aligned} \quad (\text{III.41b})$$

onde $\gamma^2 = -m^2$ ($\gamma^2 > 0$) e $\partial_0 \equiv \frac{\partial}{\partial \tau}$.

Como a integral em $[D\Phi]$ é sobre campos que são periódicos em τ , de período β , podemos escrever :

$$\Phi_a(\vec{x}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} e^{i\omega_n \tau} \phi_{a_n}(\vec{k}) \quad (\text{III.42a})$$

e

$$\phi_{a_n}(\vec{k}) = \int d^3x \int_0^{\beta} d\tau e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} e^{-i\omega_n \tau} \Phi_a(\vec{x}, \tau) \quad (\text{III.42b})$$

onde $\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}$, n inteiro.

Substituindo III.42a em III.40 e usando a identidade :

$$\int_0^{\beta} d\tau e^{i(\omega_n - \omega_{n'})\tau} = \beta \delta_{n, n'} \quad (\text{III.43})$$

obtemos :

$$Z^\beta(\bar{\Phi}) = N \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E(\bar{\Phi}_a) \right\} [\det D_{ab}(\bar{\Phi})]^{-1/2} \quad (\text{III.44})$$

onde

$$\begin{aligned} D_{ab} &= -\partial^2 \delta_{ab} + M_{ab}^2(\bar{\Phi}) = \\ &= -\partial^2 \delta_{ab} + (-\mu^2 \delta_{ab} + \lambda \bar{\Phi}^2 \delta_{ab} + 2\lambda \bar{\Phi}_a \bar{\Phi}_b) \end{aligned} \quad (\text{III.45a})$$

com $\partial^2 = \partial_\mu \partial_\mu = \square$ e

$$(\det D_{ab}(\bar{\Phi}))^{-1/2} = \oint [D\Phi] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \Phi_a [D_{ab}] \Phi_b \right\} \quad (\text{III.45b})$$

da equação III.36, temos que $\Gamma^\beta(\Phi_V) = 0$, ou $V_{\text{eff}}^\beta(\Phi_V) = 0$, podemos então definir $V_{\text{eff}}^\beta(\bar{\Phi})$ como (Aragão et al 1986) :

$$V_{\text{eff}}^\beta(\bar{\Phi}) = \frac{-1}{\beta V} \ln \frac{Z^\beta(\bar{\Phi})}{Z^\beta(\bar{\Phi}_V)} = \frac{-1}{\beta V} [\Gamma(\bar{\Phi}) - \Gamma(\bar{\Phi}_V)] \quad (\text{III.46})$$

obtemos então :

$$V_{\text{eff}}^\beta(\bar{\Phi}) = \frac{-1}{\beta V} \ln \frac{\exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E(\bar{\Phi}_a) \right\} [\det D_{ab}(\bar{\Phi})]^{-1/2}}{\exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E(\bar{\Phi}_V) \right\} [\det D_{ab}(\bar{\Phi}_V)]^{-1/2}} \quad (\text{III.47})$$

onde

$$\mathcal{L}_E(\bar{\Phi}_V) = -\mu^2/2 \Phi_V^2 + \lambda/4 (\Phi_V^2)^2 = -\mu^4/4\lambda$$

e

$$\begin{aligned} D_{ab}(\Phi_V) &= -\partial^2 \delta_{ab} + M_{ab}^2(\Phi_V) = -\partial^2 \delta_{ab} + (-\mu^2 \delta_{ab} + \lambda \Phi_V^2 \delta_{ab} + \\ &\quad + 2\lambda \Phi_{Va} \Phi_{Vb}) \end{aligned} \quad (\text{III.48})$$

para a convenção, de quebra de simetria na n 'ésima componen-
te, dada na seção III.2, ou seja, $\bar{\Phi} = (0, \dots, \bar{\Phi})$ e
 $\bar{\Phi}_v = (0, \dots, +1/\sqrt{\lambda})$, então $M_{ab}^2(\phi)$, $\phi = \bar{\Phi}$ ou Φ_v , po-
de ser escrito como :

$$\begin{aligned} M_{ab}^2(\phi) &= -\gamma^2 \delta_{ab} + \lambda \phi^2 \delta_{ab} + 2\lambda \phi_a \phi_b = \\ &= \begin{cases} (-\gamma^2 + \lambda \phi^2) \delta_{ab} ; & a, b = 1, \dots, N-1 \\ (-\gamma^2 + 3\lambda \phi^2) \delta_{NN} ; & a, b = N \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{III.49})$$

voltando à equação III.47, temos que :

$$V_{eff}^P(\bar{\Phi}) = -\frac{\gamma^2}{2} \bar{\Phi}^2 + \frac{\lambda}{4} (\bar{\Phi}^2)^2 + \frac{\gamma^4}{4\lambda} - \frac{1}{\beta_V} (-1/2) \ln \frac{[\det D_{ab}(\bar{\Phi})]}{[\det D_{ab}(\Phi_v)]} \quad (\text{III.50})$$

o termo logaritmico pode ser reescrito como :

$$\begin{aligned} &\ln \frac{\det [-\square \delta_{ab} - \gamma^2 \delta_{ab} + \lambda \bar{\Phi}^2 \delta_{ab} + 2\lambda \bar{\Phi}_a \bar{\Phi}_b]}{\det [-\square \delta_{ab} - \gamma^2 \delta_{ab} + \lambda \Phi_v^2 \delta_{ab} + 2\lambda \Phi_{va} \Phi_{vb}]} = \\ &= \ln \det \left\{ \mathbb{1} + \frac{[\lambda \bar{\Phi}^2 \delta_{ab} + 2\lambda \bar{\Phi}_a \bar{\Phi}_b - \lambda \Phi_v^2 \delta_{ab} - 2\lambda \Phi_{va} \Phi_{vb}]}{-\square \delta_{ab} + 2\lambda \Phi_{va} \Phi_{vb}} \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.51})$$

usando as propriedades :

$$\ln \det \hat{O} = \text{Tr} \ln \hat{O}$$

$$\text{Tr} \hat{O} = \int d^4x \langle x | \hat{O} | x \rangle$$

$$e^{\ln(1+x)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} x^n$$

, resolvendo o traço com base na equação III.49, passando para a representação no espaço dos momentos e expandindo o $\ln$, obtemos :

$$(III.51) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \int_0^{\beta} d\tau \int d^3x \left[3\lambda (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2) \right]^n \frac{1}{\beta} \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\omega_j^2 + \vec{k}^2 + 2\gamma^2)^n} +$$

$$+ (N-1) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} \int_0^{\beta} d\tau \int d^3x \left[\lambda (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2) \right]^n \frac{1}{\beta} \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\omega_j^2 + \vec{k}^2)^n} \quad (III.52)$$

que pode ser representado pela expansão gráfica :

$$\text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots + (N-1) \left[\text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots \right] \quad (III.53)$$

onde as linhas externas inteiras (pontilhadas), correspondem à $3\lambda (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)$ ($\lambda (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)$) e as linhas internas inteiras (pontilhadas) aos propagadores à temperatura finita dados por $\frac{1}{\omega_j^2 + \vec{k}^2 + 2\gamma^2}$ ($\frac{1}{\omega_j^2 + \vec{k}^2}$).

Temos então que :

$$V_{eff}^{\beta}(\Phi) = -\gamma^2/2 \bar{\Phi}^2 + \frac{\lambda}{4} (\bar{\Phi}^2)^2 + \frac{\gamma^4}{4\lambda} + \frac{1}{2\beta} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ln \left[1 + \right.$$

$$\left. + \frac{3\lambda (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)}{\omega_j^2 + \vec{k}^2 + 2\gamma^2} \right] + \frac{(N-1)}{2\beta} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ln \left[1 + \frac{\lambda (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)}{\omega_j^2 + \vec{k}^2} \right] \quad (III.54)$$

No entanto a soma em III.52 é divergente, pois os gráficos

e são quadraticamente divergentes e os gráficos e são logaritmicamente divergentes. Subtraindo tais contribuições calculadas à temperatura zero de $V_{eff}^{\beta}(\Phi)$ (o que equivale a introduzir contrater-

mos adequados à renormalização) e utilizando a relação :

$$\sum_j \ln(w_j^2 + \vec{k}^2 + m^2) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\frac{\sqrt{\vec{k}^2 + m^2}}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[1 - e^{-\beta \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}} \right] \right] \quad (\text{III.55})$$

obtemos :

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}^{\beta}(\bar{\Phi}) = & -\mu^2/2 \bar{\Phi}^2 + \frac{\lambda}{4} (\bar{\Phi}^2)^2 + \frac{\mu^4}{4\lambda} + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\sqrt{\vec{k}^2 + 2\mu^2 + 3\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)} + \right. \\ & - \sqrt{\vec{k}^2 + 2\mu^2} + (N-1) \sqrt{\vec{k}^2 + \lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)} - (N-1) \sqrt{\vec{k}^2} \left. \right] + \\ & - 3\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2) \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{(\vec{k}^2 + 2\mu^2)} - (N-1)\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2) \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{\vec{k}^2} + \\ & + \frac{9\lambda^2}{2} (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)^2 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{(\vec{k}^2 + 2\mu^2)^2} + (N-1) \frac{\lambda^2}{2} (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)^2 \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{(\vec{k}^2)^2} + \\ & + \frac{1}{\beta} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[\ln \left[1 - \exp \left(-\beta \sqrt{\vec{k}^2 + 2\mu^2 + 3\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)} \right) \right] + \right. \\ & \ln \left[1 - \exp \left(-\beta \sqrt{\vec{k}^2 + 2\mu^2} \right) \right] + (N-1) \ln \left[1 - \exp \left(-\beta \sqrt{\vec{k}^2 + \lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)} \right) \right] + \\ & \left. - (N-1) \ln \left[1 - \exp \left(-\beta \sqrt{\vec{k}^2} \right) \right] \right] \end{aligned} \quad (\text{III.56})$$

As cinco primeiras integrações produzem um resultado finito e a última integração (termo dependente da temperatura) não possui divergências.

Da equação acima temos que se $\bar{\Phi}^2 < \bar{\Phi}_{cr}^2 = \Phi_V^2 - \frac{2\mu^2}{3\lambda}$ para $N=1$, ou se $\bar{\Phi}^2 < \bar{\Phi}_{cr}^2 = \Phi_V^2$ para $N>1$, $V_{\text{eff}}^{\beta}(\bar{\Phi})$ adiqui-

re uma parte imaginária. A esses valores de Φ_{cr}^2 podemos associar uma temperatura limite T_L de confiabilidade, uma vez que acima de T_L , o aparecimento de partes imaginárias em V_{eff}^β , assinala instabilidade nesta região (Lange 1967), das configurações de campo uniformes utilizadas.

Podemos encontrar uma expressão direta para $V_{eff}^\beta(\Phi)$ se tomarmos o limite de "altas temperaturas", $T \gg \mu$. Se estudarmos o comportamento assintótico dos termos da equação III.52 :

$$K_n^{(N=1)} = \frac{1}{\beta} \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\omega_j^2 + k^2 + 2\mu^2)^n} \text{ ou } K_n^{(N>1)} = \frac{1}{\beta} \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\omega_j^2 + k^2)^n} \quad (\text{III.57})$$

mudando a variável de integração para $k' = \beta k$, a dependência na temperatura para $n=1$ é β^{-2} , para $n=2$ é β^0 , para $n=3$ é β^2 e assim por diante. No limite de altas temperaturas o termo $n=1$ é portanto o termo de ordem superior, ou dominante, correspondendo aos termos :

$$\bigcirc_e = \frac{1}{\beta} \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\omega_j^2 + k^2 + 2\mu^2} \quad (\text{III.58a})$$

$$\bigcirc = \frac{1}{\beta} \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\omega_j^2 + k^2} \quad (\text{III.58b})$$

Usando a identidade :

$$\frac{1}{\beta} \sum_j \frac{1}{\left(\frac{2\pi j}{\beta}\right)^2 + E^2} = \frac{1}{2E} + \frac{1}{E(e^{\beta E} - 1)} \quad (\text{III.59})$$

obtemos então que $V_{\text{eff}}^{\beta}(\bar{\Phi})$ em ordem superior é dado por :

$$V_{\text{eff}}^{\beta}(\bar{\Phi}) = -\frac{\mu^2}{2} \bar{\Phi}^2 + \frac{\lambda}{4} (\bar{\Phi}^2)^2 + \frac{\mu^4}{4\lambda} + \frac{1}{2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[\frac{3\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)}{2\sqrt{k^2 + 2\mu^2}} + \frac{(N-1)\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)}{2\sqrt{k^2}} \right] + \frac{1}{2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[\frac{3\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)}{\sqrt{k^2 + 2\mu^2} [\exp(\beta\sqrt{k^2 + 2\mu^2}) - 1]} + \frac{(N-1)\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)}{\sqrt{k^2} (e^{\beta\sqrt{k^2}} - 1)} \right] \quad (\text{III.60})$$

a primeira integração em III.60 (divergente) é a contribuição à temperatura zero e pode ser cancelada pela introdução de contratermos. Obtemos então a expressão para $V_{\text{eff}}^{\beta}(\bar{\Phi})$ no limite $T \gg \mu$ ($\beta\mu \ll 1$) ($k' = \beta\sqrt{k^2}$) :

$$V_{\text{eff}}^{\beta}(\bar{\Phi}) = -\frac{\mu^2}{2} \bar{\Phi}^2 + \frac{\lambda}{4} (\bar{\Phi}^2)^2 + \frac{\mu^4}{4\lambda} + \frac{1}{2} \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \frac{\lambda(\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2)}{\beta^2} (N+2) \int_0^{\infty} dk' \frac{k'}{e^{k'} - 1} =$$

$$= -\frac{\mu^2}{2} \bar{\Phi}^2 + \frac{\lambda}{4} (\bar{\Phi}^2)^2 + \frac{\mu^4}{4\lambda} + \frac{(N+2)}{24} \lambda (\bar{\Phi}^2 - \Phi_V^2) T^2 \quad (\text{III.61})$$

Os extremos desta expressão são dados por :

$$\bar{\Phi}^2 = \begin{cases} 0 & (\text{máximo}) \\ \bar{\Phi}^2(T) = \Phi_V^2 - \frac{(N+2)}{12} T^2 & (\text{mínimos à } \pm \bar{\Phi}(T)) \end{cases} \quad (\text{III.62})$$

À $T=0$ $\bar{\Phi}^2(0) = \Phi_V^2$ e à $T=T_c$, os três extremos coincidem, com T_c , a temperatura crítica, dada por :

$$T_c^2 = \frac{12}{N+2} \frac{\mu^2}{\lambda} \quad (\text{III.63})$$

podendo também ser definida pela expressão de Dolan e Jackiw (1974) :

$$\left. \frac{\partial V_{eff}^p}{\partial \Phi^2} \right|_{\Phi^2=0} = 0 \quad (III.64)$$

ou seja

$$-\mu^2/2 + \frac{(N+2)}{24} \lambda T_c^2 = 0 \quad \text{ou} \quad T_c^2 = \frac{12}{N+2} \mu^2/\lambda$$

Podemos agora calcular o valor de T_L , de validade do modelo, dada por $\Phi^2(T_L) = \Phi_{cr}^2$. Para $N=1$, $\Phi_{cr}^2 = \frac{1}{3} \frac{\mu^2}{\lambda}$ e de III.62 :

$$T_L^2(N=1) = \frac{8}{3} \frac{\mu^2}{\lambda} \quad (III.65)$$

Para $N>1$, $\Phi_{cr}^2 = \frac{\mu^2}{\lambda}$ e

$$T_L^2(N>1) = 0 \quad (III.66)$$

Portanto para ambos os casos $T_L < T_c$ e uma vez que para $T > T_L$, v_{eff}^p torna-se imaginário, nada podemos dizer sobre a transição de fase e o método torna-se não confiável, como já foi dito na introdução.

IV. CÁLCULO DA TENSÃO SUPERFICIAL OU ENERGIA LIVRE DA INTERFACE -

Como foi visto na seção III.2, uma das possíveis soluções para a equação de Euler-Lagrange da densidade de Lagrangeana, equação III.13, é uma solução do tipo Kink, a qual representa uma solução não-trivial ou defeito topológico (do tipo parede). O ponto é que em teorias de campo com simetrias espontaneamente quebradas, surgem estruturas não-triviais (defeitos), como no exemplo acima, representando soluções topologicamente não-triviais das equações de Euler-Lagrange. Bricmont e Fröhlich (1984) propuseram que a distinção entre as fases de teorias de gauge fosse feita analisando-se a energia livre de tais defeitos, ou seja, estudando-se a variação de energia quando se força o aparecimento de um defeito no sistema através de contornos adequados. A energia livre de tais defeitos é basicamente a tensão superficial, sendo provado em Lebowitz e Pfister (1981) e em Bricmont et al (1980), que a tensão superficial distingue precisamente a fase de altas temperaturas da de baixas temperaturas no modelo de Ising : $\mathcal{E}(\beta) > 0$, para $\beta > \beta_{crit}$ e $\mathcal{E}(\beta) = 0$, para $\beta \leq \beta_{crit}$.

A solução do tipo Kink (equação III.19) pode ser entendida como sendo uma estrutura topológica tipo parede ao longo do eixo x_L , paralela aos eixos dados por $\vec{x}_T$, podendo ser interpretada como uma parede de Bloch, a qual divide o espaço tridimensional em regiões de fases (assintoticamente) invertidas, exibindo vácuos diferentes : $+\phi_V = (0, \dots, +\pi/\lambda)$

e $\phi_V = (0, \dots, -4/\sqrt{N})$, ou seja, semelhante à visão de paredes de Bloch 180° num ferromagneto (uniaxial) cuja direção de magnetização nos domínios são invertidas de 180° .

A energia livre por unidade de área da parede é definida por (Aragão et al (1986), Ventura (1981) e Bazeia et al (1983)) :

$$f_w(\tau) = -\frac{1}{\beta A} \ln \left(\frac{Z_\kappa^\beta}{Z_V^\beta} \right) \quad (\text{IV.1})$$

onde Z_κ^β é a função de partição do sistema como funcional do defeito considerado (parede, descrita pela configuração ϕ_κ e Z_V^β como funcional do vácuo. A é uma área escolhida de modo à ter f_w finito no limite termodinâmico. Note que a expressão formal para a tensão superficial, equação II.15, se reduz à equação IV.1 no caso da interface ser nada mais que uma parede de Bloch. Para o modelo $\lambda(\phi^2)^2$ com quebra espontânea de simetria $O(N)$ ocorrendo, por convenção, na n 'ésima componente, as condições de contorno que levam ao aparecimento das paredes de Bloch são :

$$\begin{aligned} \phi_N(x \rightarrow -\infty) &= -\phi_{N_V} \\ e \\ \phi_N(x \rightarrow +\infty) &= +\phi_{N_V} \end{aligned} \quad (\text{IV.2})$$

onde x é um dos eixos coordenados.

Na aproximação semiclássica, as configurações de campo clássicas $\bar{\phi}_N$, devem satisfazer a equação de movimento (equação III.18) :

$$\square \bar{\Phi}_N + (\gamma^2 - \lambda \bar{\Phi}^2) \bar{\Phi}_N = 0 \quad (\text{IV.3})$$

A solução $\bar{\Phi}_N$ satisfazendo IV.2 é exatamente a solução do tipo Kink, equação III.19 :

$$\bar{\Phi}_N = \phi_K(x_L) = \frac{u}{\sqrt{\lambda}} \tanh u \frac{x_L}{\sqrt{2}} \quad (\text{IV.4})$$

Podemos calcular a energia livre da parede na aproximação semiclássica do mesmo modo que foi calculado o potencial efetivo na seção III.3, extendendo a expansão gráfica, equação III.53, para a situação onde $\bar{\Phi}$ é dependente da posição. Obtendo então :

$$\begin{aligned} f_w(\tau) = & \frac{-L}{\beta A} \ln \frac{\exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E(\phi_K(x_L)) \right\}}{\exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L}_E(\bar{\Phi}_V) \right\}} + \frac{1}{2\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-L)^{n+1}}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_L \left[\right. \\ & \left. 3\lambda (\phi_K^2(x_L) - \phi_V^2) \right]^n \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\omega_j^2 + \vec{k}^2 + 2\gamma^2)^n} + \\ & + \frac{(N-1)}{2\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-L)^{n+1}}{n} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_L \left[\lambda (\phi_K^2(x_L) - \phi_V^2) \right]^n \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{(\omega_j^2 + \vec{k}^2)^n} \end{aligned} \quad (\text{IV.5})$$

No limite de altas temperaturas os termos relevantes são dados, como anteriormente, por $n=1$ e portanto :

$$\begin{aligned} f_w(\tau) = & \frac{L}{\beta A} \Delta S_E + \frac{L}{2\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_L \left[3\lambda (\phi_K^2(x_L) - \phi_V^2) \right] \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\omega_j^2 + \vec{k}^2 + 2\gamma^2} + \\ & + (N-1) \frac{L}{2\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_L \lambda (\phi_K^2(x_L) - \phi_V^2) \sum_j \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\omega_j^2 + \vec{k}^2} \end{aligned} \quad (\text{IV.6})$$

Usando a identidade III.59 e subtraindo as divergências do mesmo modo feito no cálculo do potencial efetivo, obtemos então que, no limite $\beta\mu \ll 1$:

$$f_w(\tau) = \frac{1}{\beta A} \Delta S_E - \sqrt{2} \mu (N+2) T^2 \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk' \frac{k'}{e^{k'} - 1} \quad (\text{IV.7})$$

onde $k' = \beta \sqrt{k^2}$ e

$$\begin{aligned} \Delta S_E &= \int_0^\beta dz \int d^2 x_T \int_{-\infty}^{+\infty} dx_L \left[\mathcal{L}_E(\phi_R(x_L)) - \mathcal{L}_E(\phi_V) \right] = \\ &= \beta A \frac{2\sqrt{2}}{3} \frac{\mu^3}{\lambda} \end{aligned} \quad (\text{IV.8})$$

Portanto

$$f_w(\tau) = \frac{2\sqrt{2}}{3\lambda} \mu^3 - \frac{(N+2)\sqrt{2}}{12} \mu T^2 \quad (\text{IV.9})$$

A temperatura crítica T_c do sistema é obtida procurando-se a solução de $f_w(T_c) = 0$, obtendo-se :

$$T_c = \sqrt{\frac{8}{N+2}} \frac{\mu}{\sqrt{\lambda}} \quad (\text{IV.10})$$

O caso de um único campo escalar ($N=1$), corresponde aos resultados obtidos por Aragão et al (1986) para o caso

$$\frac{\lambda}{4!} \phi^4$$

V. EXPOENTES CRÍTICOS E A ESTRUTURA DE PAREDES E DOMÍNIOS FERROMAGNÉTICOS -

V.1. Cálculo dos Expoentes Críticos α e ν -

Repetindo a introdução da seção II.3.3, podemos então assumir aqui que, próximo de T_c , existe um comprimento característico (comprimento de correlação) ξ e portanto a largura $l \propto \xi$, tal que o excesso de energia livre associada a uma interface de área A é da ordem de :

$$\Delta f \sim A f_{\text{interface}} \quad (V.1)$$

Se a região interfacial tem comprimento ξ , nós podemos associar um excesso de energia livre por unidade de volume

$$\Delta F = \frac{A f_{\text{inter}}}{A \xi} \sim f_{\text{inter}} \xi^{-1} \quad (V.2)$$

com a região interfacial. $f_{\text{inter}} \equiv f_w$.

A volume fixo, obtemos que :

$$\frac{d}{dT} (f_{\text{int}} \xi^{-1}) = \frac{\partial}{\partial T} (f_w \xi^{-1}) \Big|_V = - \xi^{-1} \Delta S \quad (V.3)$$

onde ΔS é a entropia por unidade de área. Da expressão acima, obtemos que :

$$f_w \frac{d(\xi^{-1})}{dT} + \xi^{-1} \frac{df_w}{dT} = - \xi^{-1} \Delta S \quad (V.4)$$

Mas podemos expressar a massa μ e o acoplamento λ de f_w , em função dos acoplamentos efetivos dependentes da temperatura $\mu(T)$ e $\lambda(T)$ respectivamente (Aragão et al 1986). A massa e a constante de acoplamento efetivos (dependentes da temperatura) são definidos respectivamente por :

$$\mu^2(T) \equiv \frac{d^2 V_{eff}^B}{d\Phi^2} \Big|_{\bar{\Phi} = \langle \Phi \rangle_T} \quad (V.5a)$$

e

$$\lambda(T) \equiv \frac{d^4 V_{eff}^B}{d\Phi^4} \Big|_{\bar{\Phi} = \langle \Phi \rangle_T} \quad (V.5b)$$

Da expressão do potencial efetivo obtida anteriormente, equação III.61, obtemos que :

$$\mu^2(T) = 2\mu^2 + \frac{(N+2)}{12} \lambda T^2 \quad (V.6a)$$

e

$$\lambda(T) \simeq \lambda \quad (V.6b)$$

onde tomamos $\langle \Phi \rangle_T$ como sendo μ/λ , dispensando a correção dependente da temperatura, uma vez que nossas expressões já estão corrigidas à nível de 1-loop.

Retornando à expressão V.4, podemos escrever como :

$$\frac{df_w}{dT} = \frac{\partial f_w}{\partial T} + \frac{\partial f_w}{\partial \mu^2(T)} \frac{d\mu^2(T)}{dT} + \frac{\partial f_w}{\partial \lambda(T)} \frac{d\lambda(T)}{dT} \quad (V.7)$$

Denotando então estes acoplamentos genericamente por $\chi_i(T)$, $i=1,2$, então :

$$\frac{\partial f_w}{\partial \eta^2(\tau)} \frac{d\eta^2(\tau)}{dT} + \frac{\partial f_w}{\partial \lambda(\tau)} \frac{d\lambda(\tau)}{dT} = \left[\frac{\partial f_w}{\partial \chi_i} \frac{d\chi_i}{dT} \right] \quad (V.8)$$

Portanto das equações V.2, V.3 e V.7, obtemos que :

$$\frac{d(\xi^{-1})}{dT} = - \xi^{-1} \frac{\left(\frac{\partial f_w}{\partial \chi_i} \frac{d\chi_i}{dT} \right)}{f_w} \quad (V.9)$$

Em T próximo de T_c , podemos aproximar $f_w(T)$ por :

$$f_w(T) \underset{T \approx T_c}{\approx} \left[\frac{df_w}{dT} \right]_{T=T_c} (T - T_c) \quad (V.10)$$

Da equação V.7, obtemos :

$$\begin{aligned} \left. \frac{df_w}{dT} \right|_{T=T_c} &= \left(\frac{\partial f_w}{\partial T} + \frac{\partial f_w}{\partial \chi_i} \frac{d\chi_i}{dT} \right) \Big|_{T=T_c} \\ &= \left(-\Delta S + \frac{\partial f_w}{\partial \chi_i} \frac{d\chi_i}{dT} \right) \Big|_{T=T_c} \end{aligned} \quad (V.11)$$

mas podemos escrever $f_w(T)$ como :

$$f_w(T) = \Delta E - T \Delta S = \frac{1}{\beta A} \Delta S_E - f(T) \quad (V.12)$$

onde $f(T)$ é a parte dependente da temperatura na expressão IV.6, a qual é finita e diferente de zero em $T=T_c$, pelo menos até a ordem de expansão considerada. Então V.11 pode ser escrita como :

$$\left. \frac{df_w}{dT} \right|_{T=T_c} = \frac{-1}{k_c} \left(\frac{\partial f_w}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dT} \right) \Big|_{T=T_c} \quad (V.13)$$

De V.9 e V.10 ,obtemos que :

$$(T-T_c) \frac{d(\xi^{-1})}{dT} = k_c (\xi^{-1}) \quad (V.14)$$

cuja solução é :

$$\xi^{-1}(T) = \text{const.} (T-T_c)^{k_c} \quad (V.15)$$

Mas o comportamento de ξ^{-1} em $T \sim T_c$ é dado por :

$$\xi^{-1} \sim (T-T_c)^\nu, \quad (T \sim T_c) \quad (V.16)$$

ou seja, k_c é nada mais que o índice crítico ν do comprimento de correlação.

Pode-se então escrever a entropia por unidade de volume como :

$$\xi^{-1} \Delta S \sim (T-T_c)^\nu \quad (V.17)$$

Derivando em relação à T ,obtem-se a expressão para o calor específico :

$$C \sim (T-T_c)^{\nu-1} \quad (V.18)$$

mas $\epsilon \sim (T-T_c)^{-\alpha}$ em $T \rightarrow T_c^+$, então :

$$\alpha = 1 - \nu \quad (V.19)$$

Da equação V.13 ,obtemos a expressão para :

$$\nu = - \frac{\left(\frac{\partial f_w}{\partial \chi_i} \frac{d\chi_i}{dT} \right) \Big|_{T=T_c}}{\frac{df_w}{dT} \Big|_{T=T_c}} \quad (V.20)$$

Invertendo V.6a e V.6b ,obtemos e em função da temperatura :

$$2\mu^2 = \mu^2(T) - \frac{(N+2)}{12} \lambda T^2 \quad (V.21a)$$

e

$$\lambda \simeq \lambda(T) \quad (V.21b)$$

Substituindo estas expressões em $f_w(T)$, obtemos então que:

$$\left(\frac{\partial f_w(T)}{\partial \mu^2(T)} \frac{d\mu^2(T)}{dT} + \frac{\partial f_w(T)}{\partial \lambda(T)} \frac{d\lambda(T)}{dT} \right) \Big|_{T=T_c} = \frac{2}{9} (N+2)^{1/2} \mu^2 \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \quad (V.22)$$

$T=T_c = \sqrt{\frac{8}{N+2}} \frac{\mu}{\sqrt{\lambda}}$

e

$$\frac{df_w}{dT} \Big|_{T=T_c} = -\frac{6}{9} (N+2)^{1/2} \frac{\mu^2}{\sqrt{\lambda}} + \frac{2}{9} (N+2)^{1/2} \frac{\mu^2}{\sqrt{\lambda}} = -\frac{4}{9} (N+2)^{1/2} \frac{\mu^2}{\sqrt{\lambda}} \quad (V.23)$$

e portanto :

$$\nu = \frac{-\frac{2}{9}(N+2)^{1/2} u^2/\sqrt{\lambda}}{-\frac{4}{9}(N+2)^{1/2} u^2/\sqrt{\lambda}} = \frac{1}{2} \quad (V.24)$$

e de V.19 :

$$\alpha = 1/2 \quad (V.25)$$

V.2. Análise da Estrutura de Paredes e Domínios Ferromagnéticos -

Nesta parte do trabalho fazemos uma aplicação dos resultados obtidos anteriormente para a tensão superficial e índices críticos, baseando-se na teoria clássica de domínios ferromagnéticos (ver por exemplo Kittel 1949). A base para esta análise fenomenológica é pelo fato da dificuldade de se obter uma expressão para a energia livre (e a entropia) de uma parede, através dos procedimentos clássicos e de mecânica estatística e que, como veremos abaixo, quantidades como a energia livre total de uma estrutura de domínios, espaçamento entre as paredes e quantidades termodinâmicas derivadas da energia livre total, podem ser expressas diretamente pelo conhecimento da energia livre interfacial e de quantidades de caráter puramente experimentais, características de cada material.

Tomemos inicialmente uma estrutura de domínios com o arranjo mais simples e com a menor energia, ou seja, a estrutura dada abaixo :

Figura V.1. Arranjo de paredes de domínios para um sistema ferromagnético. M_s é a magnetização.

Se na direção do comprimento L temos N paredes (Kinks), podemos escrever a energia livre do sistema de paredes não-interagentes como sendo :

$$F_w = Nwt f_w(\tau) = \left(\frac{L}{d}\right) wt f_w(\tau) = \\ = V \frac{f_w(\tau)}{d} \quad (V.26)$$

Em sistemas ferromagnéticos, temos ainda um termo de energia que envolve a interação entre os campos advindos das áreas de polos livres na superfície da estrutura, isto é, a energia interna magnetostática :

$$E_D = N_D M_s^2 d t L \quad (V.27)$$

onde N_D é o fator de desmagnetização ($N_D = 1.7$ para a estrutura da figura V.1). M_s é a magnetização no domínio.

A variação da magnetização com a temperatura é assumida ser da forma :

$$M(T) = M_0 \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2}\right)^\beta, \quad (\beta > 0) \quad (V.28)$$

onde M_0 é a magnetização à $T=0$ (magnetização de saturação à $T=0$).

Então podemos escrever a energia total do sistema como sendo :

$$F = F_w + F_D = V \frac{f_w(T)}{d} + 1,7 V \frac{d}{w} M^2(T) \quad (V.29)$$

Para a energia livre da parede, consideramos a expressão obtida anteriormente, equação IV.9 :

$$f_w(T) = \frac{2\sqrt{2} \gamma^3}{3\lambda} - (N+2) \frac{\sqrt{2}}{12} \mu T^2$$

ou

$$f_w(T) = (N+2) \frac{\sqrt{2}}{12} \gamma T_c^2 \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2}\right) \frac{k_B^2}{\hbar^2} \quad (V.30)$$

onde tomamos γ em unidades de massa e saímos do sistema de unidades $k_B = \hbar = c = 1$.

A energia livre total é um mínimo com respeito ao comprimento do domínio, d , quando :

$$\left(\frac{\partial F}{\partial d}\right)_{T,V} = -V \frac{f_w(T)}{d^2} + 1,7 \frac{V}{w} M^2(T) = 0 \quad (V.31)$$

Obtemos então o espaçamento de equilíbrio entre as paredes :

$$d(T) = \frac{1}{M(T)} \left(\frac{W}{1,7} f_w(T) \right)^{1/2} \quad (V.32)$$

ou

$$d(T) = \frac{1}{M_0} \left[\frac{W}{1,7} (N+2) \frac{\sqrt{2}}{12} 4 T_c^2 \frac{k_B^2}{\hbar^2} \right]^{1/2} \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right)^{1/2 - \beta} \quad (V.33)$$

Substituindo esse valor de d na expressão V.29 ,obtemos a energia mínima da estrutura de domínios (fig. V.1) :

$$F = 2V M_0 \left[\frac{1,7}{W} (N+2) \frac{\sqrt{2}}{12} 4 T_c^2 \frac{k_B^2}{\hbar^2} \right]^{1/2} \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right)^{1/2 + \beta} \quad (V.34)$$

Da termodinâmica,obtemos a "pressão" sobre a parede :

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T$$

$$= -2M_0 \left[\frac{1,7}{W} (N+2) \frac{\sqrt{2}}{12} 4 T_c^2 \frac{k_B^2}{\hbar^2} \right]^{1/2} \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right)^{1/2 + \beta} \quad (V.35)$$

Fisicamente falando,esta "pressão" surge devido as interações magnetostáticas entre as paredes,associadas com os polos livres sobre a superfície da amostra.Note que p é negativo,isto é,paredes adjacentes com polos livres de sinal alternado atraem uma a outra.

À $T \neq 0$,a desordem térmica de spins , responsável pela variação térmica de f_w e d ,também leva à um valor

não-nulo da entropia S do sistema de paredes. Da termodinâmica :

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V$$

$$= 4 \left(\frac{1}{2} + \beta \right) V M_0 \frac{T}{T_c} \left[\frac{L^7}{W} (N+2) \frac{\sqrt{2} \mu}{12} \frac{k_B^2}{h^2} \right]^{1/2} \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right)^{\beta - \frac{1}{2}} \quad (V.36)$$

como β e M_0 são > 0 , então $S > 0$.

A entropia de uma parede é dada por :

$$S^* = \frac{S}{N_w} \quad (V.37)$$

onde N_w é o número de paredes de domínio em uma amostra de comprimento L .

Agora, se nós consideramos uma amostra ferromagnética sujeita à um gradiente de temperatura, com um final à temperatura T e pressão na parede p , e o outro final à $T + \Delta T$ e $p + \Delta p$, como ilustrado na figura abaixo :

Figura V.2. Amostra ferromagnética sujeita à um gradiente de temperatura.

Podemos então calcular a força agindo sobre cada parede (Berger 1985).

Introduzindo a coordenada x paralela ao comprimento L da amostra, e se nós assumimos aproximadamente, equilíbrio local a cada ponto da amostra, nós podemos escrever :

$$\Delta p = L \frac{dp}{dT} \frac{dT}{dx} \quad (V.38)$$

Pelo princípio de Archimedes, este gradiente de pressão é equivalente a uma força de "empuxo" F_x sobre cada parede :

$$F_x = - \frac{\Delta p}{Nw} wt \quad (V.39)$$

Esta força move a parede e realiza trabalho externo. Sendo

$$S = twL \frac{dp}{dT} \quad \text{e} \quad \Delta p = L \frac{dp}{dT} \frac{dT}{dx}, \text{ nós obtemos que :}$$

$$F_x = - S^* \frac{dT}{dx} \quad (V.40)$$

e então usando a expressão de S obtida acima, temos que :

$$F_x = - \frac{1}{3} \left(\beta + \frac{1}{2} \right) wt T (N+2) \sqrt{2} \gamma \frac{k_B^2}{\hbar^2} \frac{dT}{dx} \quad (V.41)$$

V.2.1. Determinação do Expoente β

Sequindo o review de Kittel (Kittel 1949), nós podemos escrever a energia livre da parede como sendo :

$$f_w = z \left[A(\tau) K(\tau) \right]^{1/2} \quad (V.42)$$

onde $A(T)$ (the exchange stiffness) é dado por :

$$A(\tau) = \frac{z J S^2}{a} \quad (V.43)$$

onde J é a constante de "exchange", a é a constante da rede e $S=M(T)/M_0$. $K(T)$ é o termo de anisotropia uniaxial. As constantes de anisotropia são encontradas ser muito sensíveis à mudanças de temperatura, e é esperado que à $T=T_c$, K seja zero. A dependência na temperatura de K é suposta ser da forma :

$$K(\tau) = K_0 \left(\frac{M(\tau)}{M_0} \right)^n \quad (V.44)$$

onde K_0 é a constante de anisotropia à $T=0$. Escrevemos a dependência com a temperatura para a energia livre, equação V.42, como sendo :

$$f_w(\tau) = z \left(\frac{2J K_0}{a} \right) \left(1 - \frac{\tau^2}{T_c^2} \right)^{\beta(1+n/2)} \quad (V.45)$$

onde usamos a expressão V.28 para $M(T)$.

Comparando a equação V.45 com a equação V.30, obtemos que :

$$\beta(1+n/2) = 1 \quad (V.46)$$

Do review de Kittel e muitos outros textos (por exemplo Cullity 1972, Craik e Tebble 1965), a espessura da parede do domínio é dada por :

$$\begin{aligned} \delta &\simeq \pi \left[\frac{A(T)}{K(T)} \right]^{1/2} \\ &= \pi \sqrt{\frac{2J}{a K_0}} \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right)^{\beta(1-\eta/2)} \end{aligned} \quad (V.47)$$

mas se consideramos δ como tendo a mesma dependencia na temperatura que o comprimento de correlação ξ , então :

$$\delta \sim \xi \sim \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2} \right)^{-\nu} \quad (V.48)$$

e portanto :

$$\nu = \beta(\eta/2 - 1) \quad (V.49)$$

Na seção V.1, tínhamos obtido que $\nu = 1/2$ e $\alpha = 1/2$, então das equações V.49 e V.48, obtemos que :

$$\beta = 1/4 \quad (V.50a)$$

e

$$\eta = 6 \quad (V.50b)$$

Das relações obtidas por Kittel, temos ainda que, a susceptibilidade χ é dada por :

$$\chi = \frac{M^2(T)}{2K(T)} = \frac{M_0^2}{2K_0} \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2}\right)^{\beta(2-n)} \sim \left(1 - \frac{T^2}{T_c^2}\right)^{-\gamma} \quad (V.51)$$

ou seja :

$$\gamma = \beta(n-2) = 1 \quad (V.52)$$

Os expoentes obtidos acima obedecem a lei de escala $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, equação II.31.

V.2.2. Estimativas Numéricas dos Parâmetros μ e λ

Para determinar o parâmetro μ , nós usaremos as expressões para a energia livre da parede, equações V.30 e V.45. Obtendo :

$$(N+2) \frac{\sqrt{2}\mu}{12} T_c^2 \frac{k_B^2}{\hbar^2} = 2 \left(\frac{2Jk_0}{a} \right)^{1/2} \quad (V.53)$$

Para uma estrutura de domínios constituída de Fe, temos os seguintes valores :

$$\begin{aligned} J &= 2,83 \cdot 10^{-14} \text{ ergs} \\ T_c &= 1043^\circ \text{K} \\ K_0 &\simeq 5,23 \cdot 10^5 \text{ ergs/cm}^3 \\ a &= 2,86 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \end{aligned} \quad (V.54)$$

De V.53, obtemos que :

$$(N+2) \frac{\sqrt{2}}{12} \gamma T_c^2 \frac{k_B^2}{\hbar^2} \cong 2,03 \text{ ergs/cm}^3 \quad (\text{V.55})$$

e portanto :

$$\begin{aligned} \gamma &= 2,03 \text{ ergs/cm}^3 \cdot \frac{12 \hbar^2}{(N+2) \sqrt{2} T_c^2 k_B^2} \\ &= 1/(N+2) \cdot 9,25 \cdot 10^{-28} \text{ g} \end{aligned} \quad (\text{V.56})$$

Usando a expressão para a espessura da parede de Bloch, equação V.47 :

$$\delta = \pi \left[\frac{A(\tau)}{K(\tau)} \right]^{1/2} \quad (\text{V.57})$$

à $T=0$:

$$\delta = \pi \sqrt{\frac{2J}{a K_0}} \cong 6,11 \cdot 10^{-6} \text{ cm} \quad (\text{V.58})$$

Mas a solução utilizada por nós para descrever a parede , a solução do tipo Kink :

$$\vec{\Phi}_R(x_L) = (0, \dots, \frac{u}{\sqrt{2}} \tanh \gamma \frac{x_L}{\sqrt{2}}) \quad (\text{V.59})$$

possue uma espessura característica (comparando com a equação II.24) dada por :

$$\delta = \frac{\sqrt{2}}{2\gamma} \frac{\hbar}{c} \quad (\text{V.60})$$

com μ em unidades de massa e c é uma constante com unidades de velocidade (c aqui, não representa a velocidade da luz, pois o modelo em consideração não é relativístico).

Então, comparando V.60 com V.58, obtemos que :

$$c = \frac{1}{6,11 \cdot 10^{-6} \text{ cm}} \frac{\sqrt{2} \hbar}{2\mu} \simeq (N+2) 131994 \text{ cm/seg} \quad (\text{V.61})$$

Agora nós podemos calcular o parâmetro λ usando a expressão da temperatura crítica :

$$T_c = \sqrt{\frac{8}{N+2}} \frac{\mu}{\sqrt{\lambda}} \frac{c^2}{k_B^2} \quad (\text{V.62})$$

Dos resultados anteriores, obtemos que :

$$\lambda = \frac{8}{N+2} \frac{\mu^2 c^4}{T_c^2 k_B^2} \simeq (N+2) \cdot 1,0 \cdot 10^{-7} \quad (\text{V.63})$$

o que está coerente, dentro da suposição de que deveríamos de ter $\lambda \ll 1$.

VI. COMENTÁRIOS E CONCLUSÕES -

Uma vez que neste trabalho tomamos explicitamente que o modelo $\lambda(\phi^2)^2$ com interação invariante por simetria $O(N)$, definido no espaço Euclidiano 4D, está efetivamente na mesma classe de universalidade de um modelo de spin 3D com N componentes, tomando então no capítulo anterior os resultados obtidos na descrição de um sistema ferromagnético, devemos observar que a possível validade desta descrição pode ser segura sómente para temperaturas próximas de T_c , como comentado anteriormente. Aqui, trabalhamos com o valor de N finito ($N=1, 2$ ou 3), sendo um parâmetro livre em nossos resultados. Evitamos o caso de N muito grande, pois é bem conhecido que no limite de N muito grande, o nosso modelo em 1 dimensão temporal e 3 espaciais é um exemplo de uma teoria quântica cujo comportamento ultravioleta pode causar a quebra da correspondência entre magnétos clássicos e teorias quânticas de campo relativísticas, pois tem sido argumentado que não há quebra espontânea de simetria, mesmo à temperatura zero nesta teoria (Abbot et al 1976), no entanto a teoria clássica correspondente, exhibe quebra espontânea de simetria, como é o caso do modelo esférico ($N=\infty$).

Entretanto, trabalhando com sistemas de spins, como no caso do modelo de Ising, somos levados à considerar a possibilidade da interface poder deslocalizar-se (flutuações na interface) (Bricmont et al 1982) à uma dada temperatura T_r , ou seja, à baixas temperaturas, a interface é essencialmente

chata (localizada). Acima de T_r , a interface deslocaliza-se, assinalando a restauração da invariância translacional no sistema. Este fenômeno é notadamente sentido no modelo de Ising 2D em que $T_r=0$ e em 3D, $T_c > T_r > 0$. Mesmo considerando o modelo de Heisenberg ($N=3$), esperamos que a interface flutue e deslocalize-se à uma dada temperatura $T_r < T_c$ em 3D. Desde que nós tomamos uma solução para a interface que é essencialmente plana em nossos cálculos, negligenciando tais flutuações, isto nos leva à uma estimativa inferior da temperatura crítica T_c do que realmente deveria ser, uma vez que o custo energético para uma superfície flutuante, sendo maior, requereria um valor maior de T_c .

Com respeito aos índices críticos obtidos: $\alpha = 1/2$, $\nu = 1/2$, $\gamma = 1$ e $\beta = 1/4$, não são exatamente os correspondentes aos obtidos por campo médio ($\alpha = 0$, $\beta = 1/2$), entretanto em campo médio desprezamos os modos de excitação com momento diferente de zero, aqui nós integramos sobre todos os modos, tanto com $k=0$ como $k \neq 0$. Tais expoentes também não correspondem aos valores reais (vide tabela II.1), mas também utilizamos um perfil para a interface que não corresponde às evidências experimentais, entretanto os índices críticos obtidos, obedecem as relações de hiper-escala $d\nu = 2 - \alpha$ e a de escala $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$.

No entanto o método descrito neste trabalho, envolvendo paredes de domínios, se mostrou extremamente útil, uma vez que pelos procedimentos clássicos, a expressão que temos para a energia livre interfacial é apenas aproximada (Chika-

zumi e Charap 1964) , por exemplo , a expressão V.42 , $f_w = 2 [A(T)K(T)]^{1/2}$, assume implicitamente que a variação térmica de $A(T)$ e $K(T)$ é a mesma dentro da parede como em um ferromagneto uniforme. Dos resultados obtidos, tivemos que $n=6$, $K(T)=K_0 (M(T)/M_0)^n$, sendo que o valor comumente aceito para n é $n=10$ num ferromagneto uniforme (Chikazumi e Charap 1964). Outro método que conduziria à uma expressão mais realística para a energia livre da parede, poderia ser pela soma sobre todos os modos de excitação da parede (Winter 1961) , podendo as divergências infravermelhas, por ventura presentes no cálculo, ser removidas através de interações dipolo-dipolo (Gilinskii 1975). Entretanto, a presença de paredes de domínios também perturba o espectro e a amplitude local dos modos de ondas de spin livres , fazendo da definição e do cálculo da energia livre (e entropia) da parede extremamente complicado.

Com relação à fenomenologia desenvolvida na seção V.2 , achamos que a presença dos cálculos relativos à entropia do sistema de paredes e da força sobre elas, uma vez que relacionam-se à uma questão relativamente nova e de interesse em torno da observação de um movimento coletivo de translação de domínios ferromagnéticos em amostras sujeitas à um gradiente de temperatura (Berger 1985), pode vir a ser de importância, apesar de não termos feitos estimativas numéricas pelo fato de termos em nossas expressões uma dependência com a temperatura que podemos considerar válida somente para temperaturas próximas da temperatura crítica e uma vez que

não dispomos de resultados experimentais relativos ao problema nesta região, torna-se difícil por enquanto uma confrontação de resultados. No entanto o método desenvolvido neste trabalho, em frente aos problemas anteriormente citados, tem a vantagem de obter uma expressão para a tensão superficial que, apesar de não ser realista, possui simplicidade de cálculo além de obtermos explicitamente sua dependência com a temperatura, o que nos leva diretamente a obtenção da dependência na temperatura das expressões derivadas dela, como a entropia do sistema de paredes, do espaçamento mínimo entre paredes, etc, resultados estes não disponíveis nos procedimentos padrões.

VII. REFERENCIAS -

- Abbott, L.F. ; Kang, J.S. e Schnitzer, H.J. (1976) Phys. Rev. D13 , 2212 ;
- Aragão Carvalho, C. ; Marques, G.C. ; Silva, A.J. e Ventura, I. (1986) Nucl. Phys. B265 , 45 ;
- Bazeia, D. ; Marques, G.C. e Ventura, I. (1983) Rev. Bras. de Física 13 , 253 ;
- Berger, L. (1985) J. Appl. Phys. 58 , 450 ;
- Bernard, C.W. (1974) Phys. Rev. D9 , 3312 ;
- Brandenberger, R.H. (1985) Rev. Mod. Phys. 57 , 1 ;
- Bricmont, J. e Fröhlich, J. (1984) Nucl. Phys. B230 , 407 ;
- Bricmont, J. ; Lebowitz, J.L. e Pfister, C.E. (1980) Ann. of NY Acad. of Sci. 337 , 214 ;
- Bricmont, J. ; Fontaine, J.R. e Lebowitz, J.L. (1982) J. Stat. Phys. V 29 , 193 ;
- Brush, S. (1967) Rev. Mod. Phys. 39 , 883 ;
- Cahn, J.W. e Hilliard, J.E. (1958) J. Chem. Phys. 28 , 258 ;
- Chikazumi, S. e Charap, S.H. (1964) "Physics of Magnetism", (Wiley, NY) ;
- Craik, D.J. e Tebble, R.S. (1965) "Ferromagnetism and Ferromagnetic Domains", (North-Holland) ;
- Cullity, B.D. (1972) "Introduction to Magnetic Material" , (Addilson Wesley Publ. Co.) ;
- Dolan, L. e Jackiw, R. (1974) Phys. Rev. D9 , 3320 ;
- Feynman, R.P. e Hibbs, A.R. (1965) "Quantum Mechanics and Path Integrals", (Mc Graw-Hill Book Co.) ;

- Fisher, M.E. (1967) Rep. Prog. Phys. 30 , 615 ;
- Fisher, M.E. ; Barber, M.N. e Jasnow, D. (1973) Phys. Rev. A8 , 1111 ;
- Gilinskii, I.A. (1975) Sov. Phys. JETP 41 , 511 ;
- Hankey, A. e Stanley, H.E. (1972) Phys. Rev. B6 , 3515 ;
- Jasnow, D. (1984) Rep. Prog. Phys. 47 , 1059 ;
- Kadanoff, L.P. (1966) Physics 2 , 263 ;
- Kadanoff, L.P. (1977) Rev. Mod. Phys. 49 , 267 ;
- Kirzhnits, D.A. e Linde, A.D. (1976) Ann. Phys. 101 , 195 ;
- Kittel, C. (1949) Rev. Mod. Phys. 21 , 541 ;
- Kogut, J.B. (1979) Rev. Mod. Phys. 51 , 659 ;
- Lange, J.S. (1967) Ann. Phys. 41 , 108 ;
- Lebowitz, J.L. e Pfister, C.E. (1981) Phys. Rev. Lett. 46 , 1031 ;
- Löhneysen, L. von ; Stamatescu, I.O. e Shrock, R.E. (1987) ,
Preprint Berlin , November 1987 ;
- Rajaraman, R. (1975) Phys. Reports 21C , 227 ;
- Ventura, I. (1981) Phys. Rev. B24 , 2812 ;
- Weinberg, S. (1974) Phys. Rev. D9 , 3357 ;
- Widom, B. (1972) "Phase Transitions and Critical Phenomena"
Vol. 2 , ed. Domb, C. e Green, M.S. (New York , Academic) ,
pag. 79 ;
- Wilson, K.G. e Kogut, J.B. (1974) Phys. Reports 12C , 75 ;
- Winter, J.M. (1961) Phys. Rev. 124 , 452 .