"COMPORTAMENTO CRÍTICO
DE UM GÁS DE BOSE -
-EINSTEIN MAGNETIZADO"

Melquisedech Soares Silva

Dissertação apresentada ao Insti-
tuto de Física e Química de São
Carlos, da Universidade de São
Paulo, para obtenção do título de
Mestre em Física Básica".

Orientador:

Prof.Dr. Sylvio Goulart Rosa Jr.

DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

São Carlos

1 9 8 4

BIBLIOTECA DO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS - USP
FÍSICA

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE _____

MELQUISEDECH SOARES SILVA

APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 14 DE março DE 1984.

COMISSÃO JULGADORA:

Dr. SYLVIO GOULART ROSA JUNIOR - Orientador

Dr. JOSÉ ROBERTO DRUGOWICH DE FELICIO

Dr. GILMAR EUGÊNIO MARQUES

Dedico,

Aos meus pais
José Deque e Leonice,
à minha esposa Nenen
e ao meu filho Andrei.

AGRADEÇO,

Em especial ao Prof. Sylvio Goulart Rosa Jr. pela agradável orientação e colaboração para minha formação profissional.

Ao amigo Hidembergue por suas muitas e valiosas sugestões.

À Nenen pelo companheirismo e palavras de estímulo.

À Loreni pelo excelente trabalho de datilografia.

Ao Departamento de Física do Instituto de Física e Química de São Carlos, USP, pela acolhida e à Universidade do Amazonas pelo apoio financeiro.

ÍNDICE

LISTA DE ILUSTRAÇÕES E TABELAS.....	i
RESUMO.....	ii
ABSTRACT.....	iii
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO II- APRESENTAÇÃO DAS FUNÇÕES TERMODINÂMICAS.....	6
2.1. As funções termodinâmicas a volume constan te.....	6
2.2. As funções termodinâmicas à pressão cons - tante.....	12
CAPÍTULO III-OS EXPOENTES CRÍTICOS.....	16
3.1. Cálculo dos expoentes críticos a volume constante.....	16
3.2. Cálculo dos expoentes críticos à pressão constante.....	25
3.3. Comportamento das funções termodinâmicas nas linhas de transição.....	29
CAPÍTULO IV -CONCLUSÕES.....	42
APÊNDICE I - AS FUNÇÕES DE BOSE-EINSTEIN.....	45
APÊNDICE II- O LOGARÍTMO DA FUNÇÃO DE GRAND PARTIÇÃO Ξ	47
APÊNDICE III-COMPORTAMENTOS DAS FUNÇÕES TERMODINÂMICAS NA VI- ZINHANÇA DO PONTO CRÍTICO.....	52
APÊNDICE IV- AS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO GÁS IDEAL DE BOSE-EINSTEIN.....	57
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	60

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Linhas de transição L_1T , L_2T e L_3T no plano campo magnético contra temperatura.....	9
Figura 2 - Temperatura crítica como função da dimensionalidade para a condensação do GIBE nos casos de pressão constante e de volume constante.....	26
Figura 3 - Contorno para o cálculo da Eq. (II.7).....	49

LISTA DE TABELAS

Tabela I - Expoentes críticos no caso de volume constante..	25
Tabela II- Expoentes críticos no caso de pressão constante.	28
Tabela III- Comportamentos de várias grandezas termodinâmicas nas linhas de transição L_1T e L_3T	41
Tabela IV - Valores dos expoentes críticos obtidos por G.B. para o GIBE como função da dimensionalidade d do sistema e do parâmetro σ	59
Tabela V - Relações entre os expoentes críticos.....	59

RESUMO

Investigamos neste trabalho o comportamento crítico de um gás de bósons neutros com spin S na presença de um campo magnético uniforme. Os expoentes críticos são calculados como função da dimensionalidade d do sistema e do parâmetro σ do espectro $E(K) \sim K^\sigma$ de uma partícula. O comportamento crítico é examinado nas condições de volume constante e de pressão constante. Estabelecemos as relações entre os novos expoentes críticos e os calculados por Gunton e Buckingham para o gás ideal de Bose-Einstein sem spin.

ABSTRACT

The critical behavior of a d -dimensional ideal gas of uncharged bosons with spin S and spectrum of a single particle given by $E(K) \sim K^\sigma$ in a uniform magnetic field is examined. The critical exponents are calculated as a function of the dimensionality of the systems and the parameter σ for both constant volume and constant pressure. We establish the relationship between the new critical exponents with those calculated by Gunton and Buckingham for a spinless Bose-Einstein gas.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Em 1924 o físico indiano S.N.Bose⁽¹⁾, considerado um dos fundadores da mecânica estatística quântica, submeteu à apreciação de Einstein um trabalho pioneiro onde demonstrava que a lei de radiação de Planck poderia ser deduzida independentemente da eletrodinâmica clássica. Nessa demonstração ele admitiu que o espaço de fase de um quantum de luz num dado volume é subdividido em regiões elementares de volume h^3 .

As partículas (fótons) com dois estados de polarização e cujo número não é conservado obedecem a uma estatística diferente da de Boltzmann. Einstein não só endossou o trabalho de Bose como o generalizou para qualquer gás de bósons com potencial químico não nulo. Essa estatística tornou-se conhecida como estatística de Bose-Einstein e o sistema de partículas não interagentes que obedece a essa estatística é chamado gás ideal de Bose-Einstein, denominado daqui por diante como GIBE.

O interesse no estudo das propriedades termodinâmicas do GIBE foi posteriormente estimulado fortemente por London⁽²⁾ que usou-o como modelo para explicar a transição λ do ^4He líquido. O fato da temperatura crítica do GIBE, calculada usando a densidade e massa atômica do ^4He , e a temperatura de transição do hélio líquido serem da mesma ordem de grandeza, levou London a sugerir que as propriedades anômalas do ^4He são essencialmente uma manifestação da condensação^(*) de Bose-Einstein. Essa condensação é

(*) Essa condensação também é conhecida como condensação no espaço dos momenta para enfatizar que sua causa está na simetria da função de onda e não em qualquer interação entre as partículas.

a ocupação macroscópica do estado quântico particular ($\vec{K}=0$) abaixo da temperatura crítica.

O tratamento da condensação de Bose-Einstein como modelo para transição de fase em geral foi outra motivação para o estudo do GIBE. Finalmente devemos acrescentar uma outra razão para o interesse continuado no estudo de bósons ideais. Estes sistemas constituem uma classe especial por exibirem transição de fase à temperatura finita e terem suas propriedades termodinâmicas calculadas exatamente em qualquer dimensão.

As propriedades termodinâmicas do GIBE na vizinhança de seu ponto crítico foram estudadas em detalhes por Gunton e Buckingham⁽³⁾ que fizeram um paralelo entre a condensação do GIBE e a transição no hélio líquido com o modelo esférico e um ferromagneto real, já que o GIBE e o modelo esférico pertencem à mesma classe de universalidade. A condensação do GIBE como uma transição de fase cooperativa em dimensão arbitrária também foi estudada por Lacour-Gayet e Toulouse⁽⁴⁾ que examinaram os casos: o gás ideal homogêneo à densidade constante (primeiramente estudado por Gunton e Buckingham), o gás homogêneo à pressão constante e o não homogêneo. Neste último caso, foram estudados os efeitos criados pela ação de campos aleatórios nas propriedades termodinâmicas do GIBE.

Um sistema de bósons à baixa temperatura que recentemente tem despertado muito interesse é o gás de hidrogênio atômico com spin do elétron polarizado ($H\uparrow$). Este sistema foi estabilizado contra a recombinação para a forma molecular por Silvera e Walraven⁽⁵⁾ em 1980. Hecht⁽⁶⁾ em 1959, foi o primeiro investigador a propor que um campo magnético poderia ser utilizado para estabilizar o hidrogênio atômico e usou o teorema dos estados correspondentes para discutir o seu possível comportamento superfluido à baixa temperatura. Como consequência da fraca interação in -

teratômica e da energia de ponto zero muito grande, espera-se que este sistema ($H\downarrow$) permaneça gasoso mesmo à temperatura zero absoluto. Espera-se também a ocorrência da condensação de Bose-Einstein bem como da superfluidez de modo semelhante ao que acontece com o ^4He líquido. Estas são algumas das notáveis propriedades associadas a este novo fluido quântico e que constitui provavelmente o mais promissor sistema físico para a observação experimental da condensação de Bose-Einstein. Há evidências experimentais com base na série de trabalhos de Silvera e Walraven que o hidrogênio atômico quando colocado em condições especiais deverá apresentar as propriedades citadas acima já previstas teoricamente.

Desde que o hidrogênio atômico com spin do elétron polarizado foi inicialmente estabilizado por Silvera e Walraven⁽⁵⁾ grandes esforços, por vários grupos de pesquisa no mundo inteiro, estão sendo feitos para se obter densidade suficientemente alta ($\sim 10^{19}$ átomos/cm³) e baixa temperatura (~ 50 mK) para que sejam observadas as propriedades degeneradas deste gás de bósons. Sprik, Walraven e Silvera⁽⁷⁾ em agosto de 1983 relataram ter observado densidade da ordem de 10^{18} átomos/cm³, mas ainda não se conseguiu obter experimentalmente a ocorrência da condensação de Bose-Einstein.

O gás de hidrogênio atômico com spin polarizado é um sistema fracamente interagente e os efeitos de interação no seu comportamento termodinâmico pode ser desprezado em primeira aproximação, de modo que este sistema tem sido frequentemente tratado como um GIBE⁽⁸⁾. Motivado pelo interesse crescente neste importante sistema quântico investigaremos neste trabalho as propriedades termodinâmicas de um gás de bósons neutros de massa m e spin S , contidos num recipiente hiper-cúbico de volume $V=L^d$ à temperatura T na presença de um campo magnético uniforme $\vec{H}=H\hat{z}$. Examinaremos os casos de densidade de partícula constante e de pressão constante.

Apesar das várias simplificações do modelo comparado com a situação experimental, a saber- a homogeneidade de $\vec{H}$, a não interação entre as partículas, a suposição de nenhuma estrutura interna das partículas e acima de tudo, a hipótese do equilíbrio termodinâmico do sistema- o estudo do modelo é justificável desde que seu comportamento peculiar pode ser indispensável para a melhor compreensão qualitativa do hidrogênio atômico com spin polarizado. O caso tridimensional do modelo acima foi estudado em detalhes por Yamada⁽⁹⁾ que considerou as partículas com spin $S=1$.

A ocorrência da condensação de Bose-Einstein é responsável pelo notável comportamento magnético do sistema que exhibe uma magnetização espontânea e uma suscetibilidade divergente ($d < 4$) cujo comportamento sugere a existência de um "ferromagnetismo de Bose-Einstein". A magnetização espontânea surge como um indicador da condensação, visto que está relacionada ao número de partículas N_0 na fase condensada. Apesar de existir uma relação entre o momento total de Bose, que é o parâmetro de ordem introduzido por Gunton e Buckingham⁽³⁾ para descrever a condensação de Bose-Einstein como uma transição cooperativa, e o número de partículas N_0 , não podemos em geral considerar a magnetização espontânea como um parâmetro de ordem. Em outras palavras, a magnetização espontânea pode ser considerada como um parâmetro de ordem "secundário" no caso particular em que o campo é nulo.

É um fato bem conhecido que o GIBE não sofre condensação de Bose-Einstein à temperatura finita⁽¹⁰⁾ quando a dimensionalidade do sistema for menor que 3. No entanto isto é verdade somente se o sistema for mantido a uma densidade ($n=N/V$) de partículas constante, mas finita. Gunther, Imry e Bergman⁽¹¹⁾ mostraram que o GIBE em uma e duas dimensões também condensa se baixamos a temperatura mantendo a pressão constante.

Lembramos que o GIBE sem spin, tridimensional e à pres

são constante, foi estudado por London⁽²⁾ que mostrou a existência de uma transição de fase de primeira ordem a uma temperatura crítica T_C dependente da pressão. Os calores específicos à pressão constante C_p e a volume constante C_v têm comportamentos completamente diferentes. C_v permanece finito para qualquer temperatura e C_p torna-se infinito quando $T \rightarrow T_C(P)$.

No Capítulo II deste trabalho apresentaremos o formalismo⁽¹²⁾ usado para obtenção do grand potencial termodinâmico Ω . A principal vantagem desse formalismo é a separação completa da dinâmica do problema das consequências da estatística de Bose-Einstein ou Fermi-Dirac no comportamento termodinâmico do sistema. Calcularemos também numa forma fechada as funções termodinâmicas nos casos de volume constante e de pressão constante.

Finalmente no Capítulo III analisaremos o comportamento termodinâmico do sistema de bósons ideais na região de transição calculando os expoentes críticos nos casos de volume constante e de pressão constante. Também são analisados os comportamentos de várias grandezas termodinâmicas nas linhas de transição.

CAPÍTULO II

APRESENTAÇÃO DAS FUNÇÕES TERMODINÂMICAS

2.1. As funções termodinâmicas a volume constante

Calculamos neste capítulo as funções termodinâmicas de um sistema de bósons não interagentes cuja descrição foi feita no capítulo I. Para este cálculo usamos o formalismo grand canônico em que o potencial termodinâmico Ω é representado por uma transformada integral da função de partição $Z(\beta, H)$ de uma partícula. Os detalhes desse formalismo são apresentados no apêndice II.

O sistema é definido pelo seguinte hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}, s_z} [E(\vec{k}) - g\mu_B H s_z] a_{\vec{k}, s_z}^{\dagger} a_{\vec{k}, s_z} \quad (2.1)$$

onde $\mu_B = e\hbar/2mC$ é o magneton de Bohr, g é o fator de Landé, $a_{\vec{k}, s_z}^{\dagger}$ e $a_{\vec{k}, s_z}$ são os operadores criação e aniquilação de uma partícula com espectro $E(K) = a_1 K^{\sigma}$. Os casos particulares $a_1 = \hbar C$ e $a_2 = \hbar^2/2m$ dão as relações de dispersão ultrarelativística e não relativística, respectivamente.

A expressão para a função de partição Z de uma partícula, onde separamos as contribuições dos graus de liberdade de spin e de translação, é dada por

$$Z = Z_S \cdot Z_T = \sum_{s_z = -S}^S e^{\beta g\mu_B H s_z} \sum_{\vec{k}} e^{-\beta E(\vec{k})} \quad (2.2)$$

onde $\beta^{-1} = K_B T$, K_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura absoluta. A parte magnética da função de partição acima é uma progressão geométrica finita cujo somatório é facilmente obtida. Transformando a soma sobre $\vec{k}$ na Eq.(2.2) numa integral e usando a densida-

de de estados

$$D(E) = \frac{\pi^{d/2} d^d L^d a_\sigma^{-d/\sigma} E^{\frac{d}{\sigma} - 1}}{(2\pi\hbar)^d \sigma (d/2)!} \quad (2.3)$$

Obtemos a seguinte expressão para a função de partição de uma partícula

$$Z(\beta, H) = \frac{\sinh[(S+1/2)\beta h]}{\sinh(\beta h/2)} \frac{A_\sigma}{\beta^{d/\sigma}}, \quad (2.4)$$

onde

$$A_\sigma \equiv \frac{\pi^{d/2} d^d L^d \Gamma(\frac{d}{\sigma}) a_\sigma^{-\frac{d}{\sigma}}}{(2\pi\hbar)^d \sigma (d/2)!}, \quad h \equiv g\mu_B H \quad (2.5)$$

Combinando a Eq.(2.4) com a representação integral do grand potencial Ω apresentada no apêndice II, encontramos a seguinte expressão:

$$\Omega = \frac{A_\sigma}{\beta} \frac{1}{2i} \int_{C-i\infty}^{C+i\infty} t^{-1} \cotg(\pi t) \frac{1}{(\beta t)^{d/\sigma}} \frac{\sinh[(S+1/2)\beta th]}{\sinh(\beta th/2)} e^{\beta\theta't} dt. \quad (2.6)$$

O cálculo da integral acima pode ser efetuado com o auxílio do teorema do resíduo, cujos detalhes são feitos no apêndice II, resultando em

$$\Omega = - \frac{A_\sigma}{\beta^{\frac{d}{\sigma} + 1}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{\frac{d}{\sigma} + 1}} \frac{\sinh[(S+1/2)\beta nh]}{\sinh(\beta nh/2)} e^{\beta\theta'n} \quad (2.7)$$

onde o sinal negativo vem do fato de nosso contorno ser orientado no sentido horário e no teorema do resíduo a integral é calculada no sentido anti-horário.

A Eq.(2.7) pode ser reescrita usando as funções de Bose Einstein (veja Eq.1 do apêndice I) como

$$\Omega = - \frac{A_{\sigma}}{\beta \frac{d}{\sigma} + 1} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma} + 1} [\beta(\theta - \ell h)] + \Omega_0 \quad (2.8)$$

onde fizemos uma mudança de variável $\theta = \theta' + hS$ e adicionamos a contribuição

$$\Omega_0 = \frac{1}{\beta} \sum_{\ell=0}^{2S} \ln [1 - e^{\beta(\theta - \ell h)}] \quad (2.9)$$

que vem dos estados de momentum nulo, que foi perdida quando transformamos a soma sobre $\vec{K}$ na Eq.(2.2) numa integral.

Iniciamos o estudo do comportamento termodinâmico do sistema calculando o número médio de partículas. Isto nos permite determinar o diagrama de fase do sistema. O número total N de partículas pode ser calculado tomando-se a derivada parcial de Ω com relação a θ'

$$\begin{aligned} N &= - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \theta'} \right)_{T, V, H} = N_0 + N_1 \\ &= \sum_{\ell=0}^{2S} [e^{-\beta(\theta - \ell h)} - 1]^{-1} + \frac{A_{\sigma}}{\beta \frac{d}{\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \end{aligned} \quad (2.10)$$

Sendo N_0 e N_1 os números de partículas nos estados de momentum nulo e excitados ($\vec{K} \neq 0$) respectivamente.

Na condição de densidade de partícula constante a temperatura crítica $T_c(H, N/V)$ pode ser obtida da Eq.(2.10) fazendo $\theta=0$ na contribuição dos estados excitados

$$N = N_1 = \frac{A}{\beta_c} \frac{\sigma}{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}(-\beta_c \ell h) \quad (2.11)$$

O sistema sofrerá uma condensação a uma temperatura finita se $d > \sigma$, visto que se mantemos a densidade de partícula constante e baixamos a temperatura, $F_{\frac{d}{\sigma}}(\alpha)$ deve crescer, atingindo seu valor máximo quando $\alpha=0$. Como $F_{\frac{d}{\sigma}}(0)$ é função finita se $d > \sigma$, a igualdade (Eq.(2.11)) não mais se verifica e consequentemente temos uma fração das partículas do sistema no estado de momentum nulo.

Como consequência de $F_{\frac{d}{\sigma}}(\alpha)$ ser monotonicamente decrescente, a temperatura crítica é uma função côncava e monotonicamente crescente de $|H|$, resultando para qualquer $d > \sigma$ um diagrama de fase semelhante ao obtido primeiramente por Yamada⁽⁹⁾ para o caso especial $d=3$, $\sigma=2$ e $S=1$

Fig.1- Linhas de transição $L_1 T$, $L_2 T$ e $L_3 T$ no plano campo magnético contra temperatura. RC e RN representam as regiões de condensação e normal com os spins para cima ($\uparrow$) ou para baixo ($\downarrow$), respectivamente.

As temperaturas críticas $T_c(0)$ e $T_c(\infty)$ são obtidas quando fazemos $H=0$ e $H=\infty$ respectivamente na Eq.(2.11) e estão relacionadas por

$$T_c(\infty) = (2S+1)^{\sigma/d} T_c(0) . \quad (2.12)$$

As outras quantidades de interesse tais como magnetização M , suscetibilidade χ e energia interna U são também obtidas diretamente do potencial termodinâmico Ω por derivadas parciais:

$$\begin{aligned} M = N m &= - \frac{\partial \Omega}{\partial H} \Big|_{T, V, \theta} \\ &= N g \mu_B S \left\{ 1 - \frac{A_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma}} (NS)^{-1} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \right\} \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde tomamos no termo Ω_0 (Eq.2.9) só a contribuição de $\ell=0$, pois na fase condensada apenas o estado fundamental ($\vec{k}=0$, $\ell=0$) contribui para a magnetização. A suscetibilidade χ é obtida da Eq.(2.13)

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{T, V, N} \\ &= -g \mu_B \frac{A_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma} - 1} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta - \ell h)] \left(\frac{\partial \theta}{\partial H} - \ell g \mu_B \right) , \end{aligned} \quad (2.14)$$

onde

$$\frac{\partial \theta}{\partial H} = g \mu_B \frac{\sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta - \ell h)]}{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta - \ell h)]} \quad (2.15)$$

é determinado anulando a derivada de N_1 com relação ao campo mag-

nético H.

Para a energia interna obtemos a seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
 U &= Nu = \Omega + N\theta' - T \frac{\partial \Omega}{\partial T} \bigg|_{V, H, \theta'} \\
 &= \frac{d}{\sigma} \frac{A_{\sigma}}{\beta \frac{d}{\sigma} + 1} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma} + 1} [\beta(\theta - \ell h)] \\
 &\quad - N \text{Sh} \left\{ 1 - \frac{A_{\sigma}}{\beta \frac{d}{\sigma}} (NS)^{-1} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \right\} \quad (2.16)
 \end{aligned}$$

A expressão para o calor específico é obtida tomando a derivada de U com relação à temperatura T

$$C_H = \frac{\partial U}{\partial T} \bigg|_{V, H, \theta'} \quad (2.17)$$

Se a temperatura está acima da temperatura crítica T_c , o calor específico C_H^+ ($T > T_c$) é dado por

$$\begin{aligned}
 C_H^+ &= \frac{d(d+\sigma)}{\sigma^2} \frac{A_{\sigma}}{\beta \frac{d}{\sigma}} K_B \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma} + 1} [\beta(\theta - \ell h)] + \frac{Nd}{\sigma \beta} \frac{\partial(\beta \theta)}{\partial T} \\
 &\quad + \frac{2d}{\sigma} \frac{A_{\sigma}}{\beta \frac{d}{\sigma} - 1} h K_B \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \\
 &\quad + h \frac{A_{\sigma}}{\beta \frac{d}{\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell \left[\frac{\partial(\beta \theta)}{\partial T} - \ell \frac{\partial(\beta h)}{\partial T} \right] F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta - \ell h)], \quad (2.18)
 \end{aligned}$$

onde

$$T \frac{\partial(\beta \theta)}{\partial T} = - \frac{\frac{Nd}{\sigma} \left(\frac{A_{\sigma}}{\beta \frac{d}{\sigma}} \right)^{-1} + \beta h \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta - \ell h)]}{\sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)]} \quad (2.19)$$

obtido anulando a derivada de N_1 com relação à temperatura T .

Se a temperatura está abaixo de T_c , o calor específico $C_H^-(T < T_c)$ é determinado fazendo primeiro $\theta=0$ na Eq.(2.16) e em seguida efetuando a derivada com relação à temperatura:

$$\begin{aligned}
 C_H^- = K_B \frac{A_\sigma}{\beta d/\sigma} & \left[\frac{d(d+\sigma)}{\sigma^2} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}} (-\beta \ell h) \right. \\
 & + \frac{2d}{\sigma} \beta h \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} (-\beta \ell h) \\
 & \left. + (h\beta)^2 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma}} (-\beta \ell h) \right] - 1 \quad (2.20)
 \end{aligned}$$

Foi mostrado inicialmente por P.Landsberg e J.Dunning-Davies⁽¹³⁾ que existe uma descontinuidade no calor específico à temperatura crítica T_c no GIBE. No caso do sistema investigado neste trabalho aparecerá uma descontinuidade Δ_d finita na temperatura crítica se a dimensionalidade do sistema for maior que 2σ . Sua expressão é obtida combinando as Eqs.(2.18) e (2.20)

$$\begin{aligned}
 \Delta_d &= (C_H^- - C_H^+)_{T=T_c} \\
 &= - \left[\frac{Nd}{\sigma \beta_c} + h \frac{A_\sigma}{\beta_c d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} (-\beta_c \ell h) \right] \frac{\partial(\beta \theta)}{\partial T} \Big|_{T=T_c} \quad (2.21)
 \end{aligned}$$

2.2. As funções termodinâmicas à pressão constante

Nosso ponto de partida para o cálculo das funções termodinâmicas à pressão constante é novamente o potencial Ω , tendo antes o cuidado de deixar explicitamente a dependência do volume $V=L^d$ que aparece na expressão (2.5) $A_\sigma = A'_\sigma V$.

A pressão é dada por

$$P = - \frac{\partial \Omega}{\partial V} \Big|_{T, \theta', H}$$

$$= \frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma} + 1} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma} + 1} [\beta(\theta - \ell h)] \quad (2.22)$$

onde as partículas no condensado não contribuem para a pressão porque Ω_0 não depende explicitamente do volume.

Observamos na Eq.(2.22) que mantendo a pressão constante haverá uma condensação para qualquer dimensão maior que zero ($d > 0$) pelos mesmos argumentos apresentados para o caso de densidade de partícula constante na seção (2.1).

A densidade de partícula "n" e a energia interna por partícula "u" são determinadas das Eqs.(2.10) e (2.16) resultando nas expressões abaixo

$$n = \frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \quad (2.23)$$

e

$$u = \frac{d}{\sigma} \frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma} + 1} \frac{1}{n} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma} + 1} [\beta(\theta - \ell h)]$$

$$- \text{Sh} \left\{ 1 - \frac{A'_\sigma}{S \beta \frac{d}{\sigma}} \frac{1}{n} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \right\} \quad (2.24)$$

O calor específico à pressão constante é obtido derivando a entalpia com relação à temperatura. Para isto usaremos a seguinte expressão para a entalpia por partícula "ε"

$$\epsilon = u + P \frac{1}{n} - \frac{h}{g_{\mu_B}} m. \quad (2.25)$$

Usando as equações

$$\omega \equiv \frac{\Omega}{N} = - \frac{P}{n} \quad (2.26)$$

para o potencial termodinâmico e

$$\begin{aligned} m &= - \left(\frac{\partial \omega}{\partial H} \right)_P \\ &= - \frac{P}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial H} \right)_P \end{aligned} \quad (2.27)$$

para a magnetização por partícula à pressão constante, podemos reescrever ε como

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{d+\sigma}{\sigma} \frac{P}{n} - Sh \left\{ 1 - \frac{A'_\sigma}{S\beta d/\sigma} \frac{1}{n} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \right\} \\ &+ \frac{h}{g\mu_B} \frac{P}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial H} \right)_P. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Finalmente para o calor específico à pressão constante obtemos

$$\begin{aligned} C_P &= \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_P \\ &= - \frac{d+\sigma}{\sigma} \frac{P}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial T} \right)_P + \frac{d}{\sigma} \frac{hK_B}{n} \frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma} - 1} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \\ &+ \frac{h}{n} \frac{A'_\sigma}{\beta d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \left[\frac{\partial (\beta\theta)}{\partial T} \right]_P - \ell \frac{\partial (\beta h)}{\partial T} \\ &- \frac{h}{n^2} \frac{A'_\sigma}{\beta d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] \left(\frac{\partial n}{\partial T} \right)_P \\ &+ \frac{h}{g\mu_B} P \left[- \frac{2}{n^3} \frac{\partial n}{\partial T} \frac{\partial n}{\partial H} + \frac{1}{n^2} \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial n}{\partial H} \right) \right]_P \end{aligned} \quad (2.29)$$

com

$$T \frac{\partial(\beta\theta)}{\partial T} \Big|_P = - \frac{P \frac{d+\sigma}{\sigma} \left(\frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma} + 1} \right)^{-1} + \beta h \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}}[\beta(\theta-\ell h)]}{2S \sum_{\ell=0} F_{\frac{d}{\sigma}}[\beta(\theta-\ell h)]} \quad (2.30)$$

determinado da Eq.(2.22) tomando a derivada com relação à temperatura. Por outro lado, os cálculos das derivadas $\frac{\partial n}{\partial T} \Big|_P$ e $\frac{\partial n}{\partial H} \Big|_P$ são obtidos da Eq.(2.23) cujos resultados expressamos abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial T} \Big|_P &= \frac{d}{\sigma} K_B \frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma} - 1} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}[\beta(\theta-\ell h)] + \\ &+ \frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta-\ell h)] \left[\frac{\partial(\beta\theta)}{\partial T} \Big|_P - \ell \frac{\partial(\beta h)}{\partial T} \right] \end{aligned} \quad (2.31)$$

e

$$\frac{\partial n}{\partial H} \Big|_P = \frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta-\ell h)] \left[\frac{\partial(\beta\theta)}{\partial H} \Big|_P - \ell \frac{\partial(\beta h)}{\partial H} \right] \quad (2.32)$$

A expressão para $\frac{\partial \theta}{\partial H} \Big|_P$ também pode ser determinada da Eq.(2.22) que resulta em

$$\frac{\partial \theta}{\partial H} \Big|_P = g\mu_B \frac{\sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}}[\beta(\theta-\ell h)]}{2S \sum_{\ell=0} F_{\frac{d}{\sigma}}[\beta(\theta-\ell h)]} \quad (2.33)$$

A suscetibilidade magnética à pressão constante é obtida da Eq.(2.27) tomando sua derivada com relação ao campo magnético

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial m}{\partial H} \Big|_P \\ &= P \left[\frac{2}{n^3} \frac{\partial n}{\partial H} \frac{\partial n}{\partial H} - \frac{1}{n^2} \frac{\partial^2 n}{\partial H^2} \right] \Big|_P \end{aligned} \quad (2.34)$$

CAPÍTULO III

OS EXPOENTES CRÍTICOS

3.1. Cálculo dos expoentes críticos a volume constante

O estudo de um sistema físico na vizinhança de seu ponto crítico é um dos problemas fundamentais na teoria de transição de fase e um dos mais interessantes na mecânica estatística do equilíbrio.

As funções termodinâmicas de um sistema físico (em geral não conhecemos sua forma funcional completa) apresentam singularidades na região de transição que podem ser descritas por um conjunto de índices chamados de expoentes de ponto crítico. Estes expoentes são universais no sentido de serem independentes das características específicas dos sistemas em questão, dependendo apenas da dimensionalidade e das propriedades de simetria.

Antes de calcularmos os expoentes críticos que descrevem o comportamento das funções termodinâmicas do capítulo anterior, apresentaremos suas definições.

Associados ao calor específico temos os expoentes críticos α e α'

$$C_H = - T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \quad (3.1)$$

$$C_H \sim \begin{cases} \epsilon^{-\alpha} & \epsilon > 0, H=0 \\ (-\epsilon)^{-\alpha'} & \epsilon < 0, H=0 \end{cases} \quad (3.2)$$

onde F é a energia livre, $\epsilon \equiv \frac{T-T_c}{T_c}$ é a variável de temperatura reduzida e a notação $X \sim Y$ significa que X/Y tende a um limite não nulo. Sabemos que há dificuldades nas leis de escala para o GIBE quando a dimensionalidade do sistema é maior que 4. Dada a sua im

portância, esse problema será discutido posteriormente em maiores detalhes.

A magnetização espontânea é uma função da temperatura e é definida por

$$M_0(T) = \lim_{H \rightarrow 0^+} M(H, T) \quad , \quad \text{onde } M \text{ é obtido de } M = - \frac{\partial F}{\partial H} \quad (3.3)$$

O comportamento crítico da magnetização espontânea é caracterizado pelo expoente β definido como

$$M_0(T) \sim (-\epsilon)^\beta \quad \epsilon < 0, \quad H=0 \quad . \quad (3.4)$$

A suscetibilidade magnética

$$\chi(H, T) = \frac{\partial M(H, T)}{\partial H} \quad (3.5)$$

tem seu comportamento na região de transição descrito pelos expoentes γ e γ'

$$\chi(0, T) \sim \begin{cases} \epsilon^{-\gamma} & \epsilon > 0, H=0 \\ (-\epsilon)^{-\gamma'} & \epsilon < 0, H=0 \end{cases} \quad (3.6)$$

Associada à magnetização $M=M(H, T)$ há um expoente crítico δ definido por

$$M(H, T_c) \sim H^{1/\delta} \quad \epsilon = 0, \quad H \rightarrow 0 \quad . \quad (3.7)$$

A função de correlação tem a seguinte forma na temperatura crítica

$$g(\vec{r}) \sim r^{-d+2-\eta} \quad \epsilon = 0, \quad H=0, \quad r \rightarrow \infty \quad (3.8)$$

onde " η " é um expoente crítico e " d " é a dimensionalidade do sistema. No espaço de momentum a função de correlação se comporta da seguinte maneira:

$$g(\vec{K}) \sim K^{-2+\eta} \quad \varepsilon = 0, K \rightarrow 0 \quad (3.9)$$

O comprimento de correlação é uma função do campo magnético e da temperatura. Seu comportamento em torno da temperatura crítica é descrito pelos expoentes ν e ν'

$$\xi(0, T) \sim \begin{cases} \varepsilon^{-\nu} & \varepsilon > 0, H=0 \\ (-\varepsilon)^{-\nu'} & \varepsilon < 0, H=0. \end{cases} \quad (3.10)$$

Os expoentes críticos não são todos independentes e estão relacionados como consequência das leis de escala.

Usaremos um sub-índice "M" nos expoentes críticos que calcularemos a seguir para fazermos uma distinção dos calculados por Gunton e Buckingham⁽³⁾ (G.B.) para o GIBE sem spin. Os detalhes de cálculo do comportamento das funções termodinâmicas na vizinhança do ponto crítico são apresentados no apêndice III.

Iniciaremos calculando o expoente crítico associado à magnetização espontânea. Combinando a equação de estado (Eq.2.13) com a equação para a temperatura crítica podemos reescrever a magnetização espontânea por partícula da seguinte forma:

$$m_0 = g\mu_B S(1-t^{d/\sigma}), \quad t \equiv T/T_c(0) \quad (3.11)$$

Introduzindo na equação acima a variável de temperatura reduzida $\varepsilon \equiv t-1$ e usando a definição de β feita na Eq.(3.4) verificamos que $\beta_M=1$.

A fração $n_0 = \frac{N_0}{N}$ de partículas no estado condensado ($\vec{K}=0, S_z=0$) é obtida usando a Eq.(2.10)

$$n_0 = 1 - t^{d/\sigma} . \quad (3.12)$$

Comparando esta equação com a expressão para m_0 , verificamos que a magnetização espontânea é causada somente pelas partículas no condensado. Esta relação importante permite considerar m_0 como um indicador magnético da transição. Por outro lado sabendo que $\psi_0 \sim N_0^{1/2}$, como foi mostrado no apêndice IV, poderíamos em princípio usar a magnetização espontânea como um parâmetro de ordem da condensação de Bose-Einstein. Acontece que a condensação de Bose-Einstein ocorre mesmo quando o campo magnético é diferente de zero e neste caso a magnetização é uma função bem comportada na linha crítica $T=T_c(H)$. Portanto podemos considerar m_0 como um parâmetro de ordem apenas no caso particular em que o campo é nulo.

O comportamento singular da magnetização como função do campo externo quando $T=T_c$ e $H \rightarrow 0$ é descrito pelo expoente δ_M definido pela Eq.(3.7). Para calcular δ_M fazemos $T=T_c$ na Eq.(2.13), usamos a expansão das funções de Bose-Einstein (FBE) dada pela Eq. (6) do apêndice I e mantemos somente os termos dominantes nessa expansão. Encontramos os seguintes valores para δ_M

$$\delta_M = \begin{cases} \frac{\sigma}{d-\sigma} , & \sigma < d < 2\sigma \\ 1 , & d > 2\sigma \end{cases} \quad (3.13)$$

Quando $d=2\sigma$ veremos que há uma divergência logarítmica. Isto pode ser verificado com o mesmo procedimento do parágrafo anterior usando a Eq.(7) do apêndice I. Retendo o termo dominante da magnetização depois de feita a expansão temos que

$$H \sim \frac{m}{\ln m^{-1}} . \quad (3.14)$$

Com a definição do expoente crítico δ_M podemos reescrever a expressão (3.14) como

$$m^{\delta_M} \sim \frac{m}{\ln m^{-1}} \quad (3.15)$$

onde $\delta_M = 1_L$ onde L indica divergências logarítmicas^(*).

Para dar prosseguimento ao cálculo dos expoentes críticos vamos obter primeiramente o potencial químico como função da temperatura na vizinhança da temperatura crítica T_c . Para isto procedemos da seguinte maneira: fazemos a expansão das FBE na equação do número de partículas dos estados excitados e mantemos nessas expansões apenas os termos cujas contribuições são dominantes. Verificamos que $\beta\theta$ tem o seguinte comportamento

$$\beta\theta \sim \begin{cases} \epsilon^{\frac{\sigma}{d-\sigma}} & , \quad \sigma < d < 2\sigma \\ \epsilon & , \quad d > 2\sigma \end{cases} \quad (3.16)$$

O expoente crítico γ_M associado à suscetibilidade magnética é obtido fazendo a substituição da dependência de $\beta\theta$ com ϵ nas equações (2.14) e (2.15) que dão a suscetibilidade e derivada do potencial químico em relação ao campo magnético. Adotando os mesmos procedimentos com relação às expansões das FBE dos casos anteriores obtemos

$$\gamma_M = \begin{cases} \frac{2\sigma-d}{d-\sigma} & , \quad \sigma < d < 2\sigma \\ 0 & , \quad d > 2\sigma \end{cases} \quad (3.17)$$

(*) $f(y)$ tem expoente η_ℓ se $f(y) \sim \frac{y^\eta}{\ln y^{-1}}$

Quando $d=2\sigma$ encontramos novamente uma divergência logarítmica $\gamma_M=0_L$. Isto pode ser verificado fazendo $h=0$ nas Eqs. (2.14) e (2.15) e na equação que dá o número de partículas nos estados excitados.

Vamos agora discutir o comportamento crítico do calor específico para o GIBE. Algumas dificuldades nas leis de escala foram observadas quando a dimensionalidade "d" do sistema é maior que 4. Várias tentativas foram feitas para resolverem este problema e uma das quais (com sucesso) explicaremos a seguir:

Hall⁽¹⁴⁾, através da hipótese de homogeneidade da energia livre na região de transição, mostrou que o comportamento do calor específico (do GIBE com spin $S=0$ e relação de dispersão $E \sim k^2$) em torno do ponto crítico é descrito por dois expoentes α_h e α_s , que estão associados às contribuições de dois termos competitivos na energia livre.

O expoente crítico α_h (h lembra homogeneidade) é definido por

$$\frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} F_S(H, \varepsilon) \sim \varepsilon^{-\alpha_h}; \quad \varepsilon \rightarrow 0^+, H=0 \quad (3.18)$$

onde F_S é a parte singular da energia livre. Lembramos neste contexto que uma função é singular quando uma das derivadas com relação à temperatura ou ao campo (ou a ambos) divergem.

Examinando as Eqs. (2.18) e (2.20) podemos verificar que o calor específico permanece finito quando $\varepsilon \rightarrow 0^\pm$ e exibe uma descontinuidade finita se $d > 2\sigma$. Isto sugere a definição de um outro expoente crítico α_s (que dá a singularidade dominante na equação do calor específico) que é determinado calculando a derivada do calor específico de mais baixa ordem que diverge

$$\frac{\partial^m C_H}{\partial \varepsilon^m} \sim \varepsilon^{-(\alpha_s + m)} \quad (3.19)$$

Foi verificado por Hall⁽¹⁴⁾ que a dimensionalidade do sistema é um parâmetro que seleciona entre dois termos na energia livre qual a contribuição dominante na vizinhança do ponto crítico. A energia livre obtida tem o seguinte comportamento perto da temperatura crítica

$$F - F_{ns} \sim \varepsilon^{d\nu} f_1(\varepsilon) + \varepsilon^{4\nu} f_2(\varepsilon) \quad (3.20)$$

onde F_{ns} é a parte não singular da energia livre, f_1 e f_2 são funções finitas no infinito.

Verificou-se que o expoente crítico α_s está sempre associado ao segundo termo $\varepsilon^{4\nu} f_2(\varepsilon)$ da energia livre independente da dimensão do sistema, enquanto α_h está associado ao mesmo termo que α_s somente se $d < 4$. Os dois expoentes críticos descrevem diferentes comportamentos singulares do calor específico de forma que

$$\begin{aligned} \alpha_s &= \alpha_h = \alpha & \text{se } d < 4 \\ \alpha_s &\neq \alpha_h & \text{se } d > 4 \end{aligned} \quad (3.21)$$

As inconsistências nas leis de escala foram resolvidas usando os dois expoentes críticos associados ao calor específico. Em outras palavras as leis de escala generalizadas definidas por Hall envolvendo combinações de $\alpha_h - \alpha_s$ são válidas em qualquer dimensão.

O campo H está associado ao operador que quebra a simetria no hamiltoniano (Eq.2.1). Tendo em vista que os expoentes críticos α_h e α_s são definidos em geral com a condição $H=0$, concluímos então que os valores para α_M^h e α_M^s no GIBE magnetizado são os mesmos calculados por G.B. (veja apêndice IV)

$$\alpha_M^h = \begin{cases} \frac{d-2\sigma}{d-\sigma} & , \quad \sigma < d < 2\sigma \\ 0 & , \quad d > 2\sigma \end{cases} \quad (3.22)$$

$$\alpha_M^s = \begin{cases} \frac{d-2\sigma}{d-\sigma} & , \quad \sigma < d < 2\sigma \\ \frac{2\sigma-d}{\sigma} & , \quad d > 2\sigma \end{cases} \quad (3.23)$$

No apêndice IV também apresentaremos as relações entre os expoentes críticos calculados neste trabalho e os obtidos por G.B..

A representação no espaço de momentum da função de correlação $g_{\vec{K}, S_z}$ pode ser obtida observando que o termo (Zeeman) que quebra a simetria no hamiltoniano na Eq.(2.1) é proporcional ao operador número de partícula e que a flutuação no número de partículas é dada por

$$\langle (n_{\vec{K}, S_z} - \langle n_{\vec{K}, S_z} \rangle)^2 \rangle = \langle n_{\vec{K}, S_z} \rangle (1 + \langle n_{\vec{K}, S_z} \rangle) \quad (3.24)$$

onde $\langle \rangle$ denota média térmica. Reescrevendo a equação acima obtemos que

$$\langle n_{\vec{K}, S_z}^2 \rangle = \langle n_{\vec{K}, S_z} \rangle (1 + 2\langle n_{\vec{K}, S_z} \rangle) \quad (3.25)$$

onde

$$\langle n_{\vec{K}, S_z} \rangle = [e^{\beta(E_K - g_{\mu_B} H S_z - \theta')} - 1]^{-1} \quad (3.26)$$

é a função distribuição de Bose-Einstein.

Usando as Eqs.(3.25) e (3.26) para $T=T_c$, $S=S_z$ e $|\vec{k}| \rightarrow 0$ obtemos que $g_{\vec{k},S}$ se comporta como

$$g_{\vec{k},S} = \langle n_{\vec{k},S}^2 \rangle \sim |\vec{k}|^{-2\sigma} \quad (3.27)$$

O expoente crítico η_M pode agora ser determinado com o auxílio da definição da função de correlação. Portanto

$$\eta_M = 2-2\sigma. \quad (3.28)$$

A expressão para o comprimento de correlação é obtida fazendo a transformada de Fourier do espaço de coordenadas da Eq.(3.25) como foi feito por G.B. ou de uma forma mais direta pela análise dimensional da Eq.(3.26)

$$\xi = (-\beta\theta)^{-1/\sigma}. \quad (3.29)$$

O comportamento crítico do comprimento de correlação pode ser determinado combinando o comportamento do potencial químico na vizinhança da temperatura crítica com a Eq.(3.29). Usando a definição do expoente crítico ν_M , determinamos o seguinte resultado

$$\nu_M = \begin{cases} \frac{1}{d-\sigma} & , \quad \sigma < d < 2\sigma \\ \frac{1}{\sigma} & , \quad d > 2\sigma \end{cases} \quad (3.30)$$

Por conveniência apresentamos na tabela I todos os expoentes críticos calculados nesta seção.

TABELA I - Expoentes críticos no caso de volume constante.

exp. crít. dim.	α_M^h	α_M^S	β_M	γ_M	δ_M	η_M	ν_M
$\sigma < d < 2\sigma$	$\frac{d-2\sigma}{d-\sigma}$	$\frac{d-2\sigma}{d-\sigma}$	1	$\frac{2\sigma-d}{d-\sigma}$	$\frac{\sigma}{d-\sigma}$	$2-2\sigma$	$\frac{1}{d-\sigma}$
$d > 2\sigma$	0	$\frac{2\sigma-d}{\sigma}$	1	0	1	$2-2\sigma$	$\frac{1}{\sigma}$

3.2. Cálculo dos expoentes críticos à pressão constante

O objetivo desta seção é estudar o comportamento de algumas funções termodinâmicas do GIBE na região de transição quando mantemos a pressão constante. Ao contrário do que ocorre quando mantemos o volume constante, a temperatura crítica do GIBE à pressão constante não se anula para $d < \sigma$. Nesta condição a temperatura crítica $T_c(P)$ é uma função monotonicamente decrescente da dimensão d do sistema conforme mostra a figura a seguir.

Foi mostrado por G.B. que o GIBE à pressão constante e o modelo gaussiano do ferromagnetismo pertencem à mesma classe de universalidade. Como o modelo gaussiano não é termodinamicamente bem definido à baixa temperatura e a transição é de primeira ordem, então somente alguns expoentes críticos podem ser calculados.

O comportamento do potencial químico como função da temperatura pode ser determinado fazendo $h=0$ na equação que dá a pressão (Eq.2.22) resultando em

Fig.2. Temperatura crítica como função da dimensionalidade (esquemática) para a condensação do GIBE nos casos de pressão constante e de volume constante. A escala de temperatura é arbitrária.

$$P = \frac{A'_\sigma}{\beta \frac{d}{\sigma} + 1} (2S+1) \frac{F_{\frac{d}{\sigma} + 1}(\beta\theta)}{\sigma} \quad (3.31)$$

Combinando a equação acima com a equação para a temperatura crítica, que é obtida da Eq.(3.31) quando $\theta=0$, resulta na seguinte expressão:

$$1 = \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{d}{\sigma} + 1} \frac{F_{\frac{d}{\sigma} + 1}(\beta\theta)}{F_{\frac{d}{\sigma} + 1}(0)} \quad (3.32)$$

O comportamento de $\beta\theta$ na vizinhança da temperatura crítica é obtido da Eq.(3.32) usando a expansão dada pela Eq.(6) do apêndice I.

$$\beta\theta \sim \begin{cases} \frac{\sigma}{d} & , \quad d < \sigma \\ \epsilon & , \quad d > \sigma. \end{cases} \quad (3.33)$$

Sabendo que o calor específico à pressão constante é dado por

$$C_P = -TN \frac{\partial^2 \theta}{\partial T^2} \quad (3.34)$$

Obtemos então para o seu comportamento crítico

$$C_P \sim \begin{cases} \frac{\sigma - 2d}{d} & , \quad d < \sigma \\ 0 & , \quad d > \sigma \end{cases} \quad (3.35)$$

Com a definição do expoente crítico α feita na seção (3.1) teremos para o expoente crítico α_h os seguintes valores:

$$\alpha_h = \begin{cases} 2 - \frac{\sigma}{d} & , \quad d < \sigma \\ 0 & , \quad d > \sigma \end{cases} \quad (3.36)$$

Os expoentes críticos η e ν são calculados da função de correlação $g_{K,S}^{\pm}$ (para K e θ pequenos) como no caso de volume constante

$$\eta = 2 - 2\sigma \quad (3.37)$$

Usando a expressão para o comprimento de correlação discutido anteriormente

$$\xi = (-\beta\theta)^{-1/\sigma} \quad (3.38)$$

e o comportamento de $\beta\theta$ dado por (3.33) teremos para o comprimento de correlação

$$\xi \sim \begin{cases} \varepsilon^{-\frac{1}{d}} & , d < \sigma \\ \varepsilon^{-\frac{1}{\sigma}} & , d > \sigma \end{cases} \quad (3.39)$$

Consequentemente o expoente crítico ν é dado por

$$\nu = \begin{cases} \frac{1}{d} & , d < \sigma \\ \frac{1}{\sigma} & , d > \sigma \end{cases} \quad (3.40)$$

Um resumo desses expoentes críticos é feito na tabela

II.

TABELA II - Expoentes críticos no caso de pressão constante.

	exp. crít. α	η	ν
dim.			
$d < \sigma$	$2 - \frac{\sigma}{d}$	$2 - \sigma$	$\frac{1}{d}$
$d > \sigma$	0	$2 - \sigma$	$\frac{1}{\sigma}$

3.3. Comportamentos de várias funções termodinâmicas nas linhas de transição L_1T e L_3T

Examinamos nesta seção como se comportam várias funções termodinâmicas nas linhas de transição L_1T e L_3T . Os comportamentos de algumas funções termodinâmicas nas linhas de transição são de interesse puramente teórico, enquanto outras como o da magnetização, da suscetibilidade, da derivada do calor específico em relação ao campo magnético, por exemplo, podem servir para interpretação de dados experimentais.

Para maior conveniência de leitura desta seção repetiremos o diagrama de fase, Fig.1 do capítulo II, como também as grandezas termodinâmicas que estamos interessados para nossas análises.

Fig.1- Linhas de transição L_1T , L_2T e L_3T no plano campo magnético contra temperatura.

O diagrama de fase acima está dividido em quatro regiões

distintas: As regiões de condensação (RC) com os spins apontando no sentido do campo ($\uparrow$) ou no sentido contrário ($\downarrow$) são caracterizadas por $n_0 \neq 0$ e $\theta = 0$. As outras regiões onde $n_0 = 0$ e $\theta \neq 0$ são chamadas regiões normais (RN).

Como vimos anteriormente, a soma das frações $n_0 = \frac{N_0}{N}$ e $n_1 = \frac{N_1}{N}$ define o número total de partículas (veja Eq.(2.10))

$$n_0 + n_1 = 1 \quad (3.41)$$

onde

$$n_0 = \sum_{\ell=0}^{2S} [e^{-\beta(\theta - \ell h)} - 1]^{-1} \quad (3.42)$$

e

$$n_1 = \frac{A_\sigma}{N\beta \frac{d}{d\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{d\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] . \quad (3.43)$$

A fração de partículas no condensado n_0 e o potencial químico θ são nulos nas linhas de transição L_1T e L_3T . A linha de transição L_3T é definida pela equação da temperatura crítica como função do campo magnético

$$\frac{A_\sigma}{N\beta \frac{d}{d\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{d\sigma}} (-\beta \ell h) = 1 . \quad (3.44)$$

Combinando as Eqs.(3.41) e (3.43) teremos para n_0 nas regiões de condensação

$$n_0 = 1 - \frac{A_\sigma}{N\beta \frac{d}{d\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{d\sigma}} (-\beta \ell |h|) , \quad \theta = 0 . \quad (3.45)$$

Nas regiões normais obtemos que

$$n_0 = 0 \quad \text{e} \quad \frac{A_\sigma}{N\beta \frac{d}{\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] = 1. \quad (3.46)$$

Analisando o comportamento da Eq.(3.46) constatamos sua continuidade através das linhas de transição L_1T e L_3T como mostrado a seguir. Na linha de transição L_1T

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} n_0 = \lim_{H \rightarrow 0^-} n_0 = 1 - \frac{A_\sigma}{N\beta \frac{d}{\sigma}} (2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0). \quad (3.47)$$

Na linha de transição L_3T

$$\lim_{T \rightarrow T_c^+} n_0 = \lim_{T \rightarrow T_c^-} n_0 = 0. \quad (3.48)$$

Por conveniência tomaremos os limites das funções termodinâmicas na linha de transição L_3T apenas na variável de temperatura T . Dando prosseguimento ao cálculo dos limites verificamos que $T \frac{\partial n_0}{\partial T}$ é contínua na linha L_1T

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} T \frac{\partial n_0}{\partial T} = \lim_{H \rightarrow 0^-} T \frac{\partial n_0}{\partial T} = - \frac{d}{\sigma} \frac{A_\sigma}{N\beta \frac{d}{\sigma}} (2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0) \quad (3.49)$$

e descontínua na linha L_3T

$$\lim_{T \rightarrow T_c^-} T \frac{\partial n_0}{\partial T} = - \frac{d}{\sigma} - \beta_c h \frac{\sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}}(-\beta_c \ell h) - 1}{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}(-\beta_c \ell h)} \quad (3.50)$$

$$\lim_{T \rightarrow T_c^+} T \frac{\partial n_0}{\partial T} = 0 \quad \text{visto que } n_0 = 0 \text{ para } T \geq T_c.$$

A função $T \frac{\partial n_O}{\partial H}$ é descontínua tanto na linha $L_1 T$ como em $L_3 T$. Vejamos como são essas descontinuidades

Em $L_1 T$

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} T \frac{\partial n_O}{\partial H} = \frac{A_\sigma}{N\beta^{d/\sigma}} \frac{S(2S+1)}{K_B} F_{\frac{d}{\sigma} - 1}^{(0) \rightarrow +\infty}$$

se $d \leq 2\sigma$

e

$$\lim_{H \rightarrow 0^-} T \frac{\partial n_O}{\partial H} = - \frac{A_\sigma}{N\beta^{d/\sigma}} \frac{S(2S+1)}{K_B} F_{\frac{d}{\sigma} - 1}^{(0) \rightarrow -\infty} \quad (3.51)$$

Em $L_3 T$

$$\lim_{T \rightarrow T_c^-} T \frac{\partial n_O}{\partial H} = \frac{g\mu_B}{K_B} \frac{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma} - 1}^{(-\beta_c \ell h)}}{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}^{(-\beta_c \ell h)}}$$

e

(3.52)

$$\lim_{T \rightarrow T_c^+} T \frac{\partial n_O}{\partial H} = 0 \text{ onde } n_O = 0 \text{ para } T \geq T_c$$

O potencial químico θ pode ser obtido da Eq.(3.46) expandindo as FBE. Podemos verificar sua continuidade nas linhas de transição $L_1 T$ observando que $\theta=0$ nas regiões de condensação ou seja

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} T \frac{\partial \theta}{\partial H} = \lim_{H \rightarrow 0^-} T \frac{\partial \theta}{\partial H} = 0. \quad (3.53)$$

Fazendo a derivada de $\frac{\partial \theta}{\partial H}$ com relação ao campo e de $\frac{\partial (\beta \theta)}{\partial T}$ com relação à temperatura, podemos mostrar que $T^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial H^2}$ e $T^2 \frac{\partial^2 \theta}{\partial T^2}$ são contínuas na linha $L_1 T$ e descontínuas em $L_3 T$.

Como a magnetização é função ímpar da variável campo magnético $m(H, T) = -m(-H, T)$, podemos reescrever a Eq. (2.13) para que seja válida para campo magnético menor que zero,

$$m = -g\mu_B S \left\{ 1 - \frac{A_\sigma}{NS\beta d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} \left[\beta(\theta + \ell h) \right] \right\}. \quad (3.57)$$

Verificamos que a magnetização é descontínua na linha $L_1 T$ e contínua na linha $L_3 T$ conforme mostram as expressões abaixo

Em $L_1 T$

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} m = g\mu_B S \left[1 - \frac{A_\sigma}{N\beta d/\sigma} (2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0) \right]$$

e

(3.58)

$$\lim_{H \rightarrow 0^-} m = -g\mu_B S \left[1 - \frac{A_\sigma}{N\beta d/\sigma} (2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0) \right]$$

onde $d > 2\sigma$.

Em $L_3 T$

$$\lim_{T \rightarrow T_C^+} m = \lim_{T \rightarrow T_C^-} m = g\mu_B S \left[1 - \frac{A_\sigma}{SN\beta_C d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}}(-\beta_C \ell h) \right]. \quad (3.59)$$

Analisamos em seguida os comportamentos das derivadas da magnetização com relação ao campo magnético. As expressões para $T \frac{\partial m}{\partial H}$ são obtidas como:

$$- \frac{(g\mu_B)^2}{NK_B} \frac{A_\sigma}{\beta^{d/\sigma}} \frac{\sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 (-\beta_c^{\ell h})}{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 (-\beta_c^{\ell h})} \quad (3.63)$$

O comportamento da função $T \frac{\partial m}{\partial T}$ nas linhas de transição é analisado a seguir:

Se $H > 0$

$$\begin{aligned} T \frac{\partial m}{\partial T} &= -B_1 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta - \ell h)] - \\ &- B_2 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta - \ell h)] T \frac{\partial(\beta\theta)}{\partial T} - \\ &- B_2 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta - \ell h)] \beta h \end{aligned} \quad (3.64)$$

onde

$$\begin{aligned} B_1 &\equiv g\mu_B \frac{A_\sigma}{N} K_B^{d/\sigma} \frac{d}{\sigma} \\ B_2 &\equiv g\mu_B \frac{A_\sigma}{N} K_B^{d/\sigma} \end{aligned} \quad (3.65)$$

e

$$T \frac{\partial(\beta\theta)}{\partial T} = - \frac{\frac{Nd}{\sigma} \left(\frac{A_\sigma}{\beta^{d/\sigma}}\right)^{-1} + \beta h \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta - \ell h)]}{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta - \ell h)]} \quad (3.66)$$

Se $H < 0$

$$\begin{aligned} T \frac{\partial m}{\partial T} &= B_1 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta + \ell h)] \\ &+ B_2 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta + \ell h)] T \frac{\partial(\beta\theta)}{\partial T} - \end{aligned}$$

$$- B_2 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta + \ell h)] \beta h \quad (3.67)$$

onde $T \frac{\partial(\beta\theta)}{\partial T}$ é obtido da Eq.(2.19) trocando H por $-H$. Fazendo os limites das Eqs.(3.64) e (3.67) obtemos que na linha $L_1 T$

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} T \frac{\partial m}{\partial T} = -B_1 T^{d/\sigma} S(2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0) + B_2 T^{d/\sigma} \frac{S N d}{\sigma} \left(\frac{A_\sigma}{\beta d/\sigma} \right)^{-1} \quad (3.68)$$

$$\lim_{H \rightarrow 0^-} T \frac{\partial m}{\partial T} = B_1 T^{d/\sigma} S(2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0) - B_2 T^{d/\sigma} \frac{S N d}{\sigma} \left(\frac{A_\sigma}{\beta d/\sigma} \right)^{-1}$$

$T \frac{\partial m}{\partial T}$ é função descontínua. Por outro lado na linha $L_3 T$ ela é contínua como mostramos a seguir:

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow T_C^+} T \frac{\partial m}{\partial T} &= \lim_{T \rightarrow T_C^-} T \frac{\partial m}{\partial T} \\ &= -B_1 T_C^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma}}(-\beta_C \ell h) \\ &\quad - B_2 T_C^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 (-\beta_C \ell h) T_C \frac{\partial(\beta\theta)}{\partial T} \Big|_{T=T_C} \\ &\quad - B_2 T_C^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 (-\beta_C \ell h) \beta_C h \end{aligned} \quad (3.69)$$

As expressões para $T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial T^2}$ são determinadas das Eqs. (3.64) e (3.67).

Se $H > 0$ temos que

$$\begin{aligned}
 T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial T^2} = & - \left(\frac{d-\sigma}{\sigma} \right) B_1 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} [\beta(\theta-\ell h)] - \\
 & - B_1 T^{\frac{d}{\sigma} + 1} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta-\ell h)] \left(\beta \frac{\partial \theta}{\partial T} - \frac{\beta \theta}{T} + \frac{\beta \ell h}{T} \right) - \\
 & - \frac{d}{\sigma} B_2 T^{\frac{d}{\sigma} + 1} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta-\ell h)] \left(\beta \frac{\partial \theta}{\partial T} - \frac{\beta \theta}{\partial T} \right) - \\
 & - B_2 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma} - 2} [\beta(\theta-\ell h)] \left(\beta \frac{\partial \theta}{\partial T} - \frac{\beta \theta}{T} + \frac{\beta \ell h}{T} \right) \left(\beta \frac{\partial \theta}{\partial T} + \frac{\beta \theta}{T} \right) + \\
 & + B_2 T^{d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta-\ell h)] \left(\beta \frac{\partial^2 \theta}{\partial T^2} - \frac{\beta}{T} \frac{\partial \theta}{\partial T} + \frac{\beta \theta}{T^2} + \frac{\beta}{T} \frac{\partial \theta}{\partial T} \right) - \\
 & - h \left\{ \left(\frac{d}{\sigma} - 2 \right) B_2 \frac{1}{K_B} T^{\frac{d}{\sigma} - 3} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma} - 1} [\beta(\theta-\ell h)] + \right. \\
 & \left. + B_2 T^{\frac{d}{\sigma} - 2} \frac{1}{K_B} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma} - 2} [\beta(\theta-\ell h)] \left(\frac{\partial(\beta \theta)}{\partial T} - \frac{\partial(\beta \ell h)}{\partial T} \right) \right\} .
 \end{aligned}
 \tag{3.70}$$

Mas, $H < 0$ obtemos uma expressão semelhante à Eq.(3.70) onde alguns sinais (-) ou (+) são alterados e H é substituído por $-H$. Fazendo o limite de $H \rightarrow 0$ obtemos que

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial T^2} = - \left(\frac{d-\sigma}{\sigma} \right) B_1 T^{d/\sigma} S(2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0)
 \tag{3.71}$$

e

$$\lim_{H \rightarrow 0^-} T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial T^2} = \left(\frac{d-\sigma}{\sigma} \right) B_1 T^{d/\sigma} S(2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0) .$$

Consequentemente $T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial T^2}$ é descontínua e finita se $d > \sigma$ e descontínua ($\mp \infty$) se $d \leq \sigma$. Analisando o comportamento desta função constatamos que ela é descontínua na linha $L_3 T$ visto que o termo $\frac{\partial^2 \theta}{\partial T^2}$ que aparece na Eq.(3.70) é descontínuo nesta linha.

Examinaremos em seguida o comportamento da função $T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial H^2}$ nas linhas $L_1 T$ e $L_3 T$.

Se $H > 0$

$$\begin{aligned}
 T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial H^2} &= D_1 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma}} - 2 [\beta(\theta - \ell h)] \left(\beta \frac{\partial \theta}{\partial H} - \beta g \mu_B \ell \right) T^2 - \\
 &- D_2 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} - 2 [\beta(\theta - \ell h)] \left(\beta \frac{\partial \theta}{\partial H} - \beta g \mu_B \ell \right) \frac{\partial \theta}{\partial H} T^2 - \\
 &- D_2 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta - \ell h)] \frac{\partial^2 \theta}{\partial H^2} T^2 \quad (3.72)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_1 &\equiv \frac{(g \mu_B)^2}{N K_B} \frac{A_\sigma}{\beta \frac{d}{d\sigma}} \\
 D_2 &\equiv \frac{g \mu_B}{N K_B} \frac{A_\sigma}{\beta \frac{d}{d\sigma}} \quad (3.73)
 \end{aligned}$$

Se $H < 0$ temos que

$$\begin{aligned}
 T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial H^2} &= D_1 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^2 F_{\frac{d}{\sigma}} - 2 [\beta(\theta + \ell h)] \left(\beta \frac{\partial \theta}{\partial H} + \beta \ell g \mu_B \right) T^2 - \\
 &- D_2 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} - 2 [\beta(\theta + \ell h)] \left(\beta \frac{\partial \theta}{\partial H} + \beta \ell g \mu_B \right) \frac{\partial \theta}{\partial H} T^2 - \\
 &- D_2 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}} - 1 [\beta(\theta + \ell h)] \frac{\partial^2 \theta}{\partial H^2} T^2 \quad (3.74)
 \end{aligned}$$

Fazendo os limites de $T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial T^2}$ verificamos que na linha $L_1 T$

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial H^2} = - D_1 g \mu_B \beta T^2 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^3 F_{\frac{d}{\sigma}} - 2 (0) \quad (3.75)$$

$$\lim_{H \rightarrow 0^-} T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial H^2} = D_1 g_{\mu_B} \beta T^2 \sum_{\ell=0}^{2S} \ell^3 F_{\frac{d}{\sigma}} - 2 \quad (0)$$

Portanto a função $T^2 \frac{\partial^2 m}{\partial T^2}$ é descontínua se $d > 3\sigma$ e descontínua ($\mp \infty$) se $d \leq 3\sigma$. Na linha L_3T esta função é descontínua visto que o termo $\frac{\partial^2 \theta}{\partial H^2}$ também é descontínuo nesta linha.

O calor específico dado pela Eq. (2.20) é função contínua na linha de transição L_1T onde

$$\lim_{H \rightarrow 0^+} C_H = \lim_{H \rightarrow 0^-} C_H = K_B \frac{A_{\sigma}}{\beta d/\sigma} \frac{d(d+\sigma)}{\sigma^2} (2S+1) F_{\frac{d}{\sigma} + 1} \quad (0) \quad (3.76)$$

Examinando as Eqs. (2.18), (2.19) e (2.20) veremos que o calor específico na linha L_3T é função descontínua.

A grandeza termodinâmica $T \frac{\partial C_H}{\partial T}$ é contínua na linha L_1T e descontínua na linha L_3T . Isto pode ser verificado das Eqs. (2.18) ou (2.20).

Finalmente a função $T \frac{\partial C_H}{\partial H}$ é descontínua em ambas as linhas de transição.

Apresentaremos a seguir um resumo dos comportamentos das funções termodinâmicas discutidos nesta seção.

TABELA III - Comportamentos de várias grandezas termodinâmicas nas linhas de transição L_1T e L_3T . C e D significam contínua e descontínua respectivamente.

Grandezas Termodinâmicas	Linhas de transição		Grandezas Termodinâmicas	Linhas de transição	
	L_1T	L_3T		L_1T	L_3T
n_o	C	C	m	D	C
$T \partial n_o / \partial T$	C	D	$T \partial m / \partial T$	D	C
$T \partial n_o / \partial H$	$D \pm \infty$ $H = 0 \pm$ $d \leq 2\sigma$	D	$T \partial m / \partial H$	$D \pm \infty$ $H = 0 \pm$ $d \leq 2\sigma$	C
θ	C	C	$T^2 \partial^2 m / \partial T^2$	$D (d > \sigma)$ $D \mp \infty$ $H = 0 \pm$ $d \leq \sigma$	D
$T \partial \theta / \partial T$	C $d < 2\sigma$	C	$T^2 \partial^2 m / \partial H^2$	$D (d > 3\sigma)$ $D \mp \infty$ $H = 0 \pm$ $d \leq 3\sigma$	D
$T \partial \theta / \partial H$	C $d < 2\sigma$	C	C_H	C	D
$T \partial^2 \theta / \partial T^2$	C	D	$T \partial C_H / \partial T$	C	D
$T \partial^2 \theta / \partial H^2$	C	D	$T \partial C_H / \partial H$	D	D

CAPÍTULO IV

CONCLUSÕES

Estudamos neste trabalho um sistema de bósons não interagentes, num espaço de dimensão arbitrária, com spin S qualquer, submetidos a um campo magnético uniforme. As funções termodinâmicas foram obtidas numa forma fechada para os casos de densidade de partículas constante e de pressão constante através de um procedimento matemático simples. Usamos uma formulação em que o grand potencial termodinâmico Ω é escrito como uma transformada integral da função de partição de uma partícula $Z(\beta, H)$.

Exploramos de uma maneira detalhada as consequências termodinâmicas da presença do termo Zeeman no hamiltoniano usada para definir o GIBE magnetizado. Vimos que este sistema a volume constante sofre condensação de Bose-Einstein se $d > \sigma$ e tem uma magnetização espontânea que é causada pelas partículas no condensado. Esse fenômeno foi chamado por Yamada⁽⁹⁾ de ferromagnetismo de Bose-Einstein. Vimos também que a magnetização espontânea m_0 e o momento de Bose ψ_0 (que é um parâmetro de ordem da condensação introduzido por G.B) estão relacionados por $\psi_0 \sim m_0^{1/2}$.

O termo $(v_0 a_0 + v_0^* a_0^+)$ que quebra a simetria do hamiltoniano, usada por G.B como por Lacour-Gayet e Toulouse⁽⁴⁾, representa fonte e sumidouro de bósons. Como consequência os expoentes críticos que eles calcularam não podem ser medidos diretamente em laboratório, visto que o parâmetro de ordem de condensação ψ_0 ($\psi_0 \sim \langle a_0 \rangle$ ou $\psi_0^* \sim \langle a_0^+ \rangle$) não é uma grandeza diretamente mensurável e os campos de Bose v_0 e v_0^* são também quantidades complexas. Enfatizamos que em teoria de transição de fase e fenômenos críticos nada obriga que o parâmetro de ordem e seu campo conjugado, por exemplo, sejam quantidades acessíveis experimentalmente. Como observado por Ma⁽¹⁵⁾, uma situação semelhante a esta é também encon

trada no estudo das propriedades do ^4He e supercondutores na região de transição.

Os expoentes críticos do GIBE magnetizado, que em princípio podem ser medidos diretamente, estão relacionados com aqueles obtidos por G.B para o GIBE sem spin. A razão para que esses dois conjuntos de expoentes críticos sejam relacionados é que a hamiltoniana (Eq.2.1) com $H=0$ é invariante pelas transformações de gauge ($e^{iN\theta}$) e $S_Z \rightarrow -S_Z$. No ponto crítico ambas as simetrias são simultaneamente quebradas conduzindo a proporcionalidade entre a magnetização espontânea e as partículas no condensado.

Podemos verificar da tabela I que os expoentes críticos obedecem às leis de escala de Rushbrooke ($\alpha_h + 2\beta + \gamma = 2$), Widom ($\delta = 1 + \gamma/\beta$) e Josephson ($d\nu = 2 - \alpha_s$). A lei de escala de Fisher $\gamma = (2 - \eta)\nu$ é violada no GIBE para qualquer dimensão. Como foi chamada a atenção por Lacour-Gayet e Toulouse⁽⁴⁾, a definição do parâmetro de ordem desempenha um papel decisivo não somente na determinação da natureza da transição de fase e expoentes críticos, mas também na violação das leis de escala. A violação das leis de escala de Josephson e Fisher também ocorre no GIBE sem spin na condição de pressão constante ou sob a influência de campos aleatórios (Lacour-Gayet e Toulouse).

O gás de hidrogênio atômico com as interações Zeeman e hiperfina foi estudado por Mullin⁽⁸⁾ que usou o seguinte hamiltoniano para cada átomo de hidrogênio

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} - \vec{\mu}_e \cdot \vec{H} - \vec{\mu}_p \cdot \vec{H} + \alpha \vec{S} \cdot \vec{I}$$

onde $\vec{\mu}_e$ e $\vec{\mu}_p$ são os momentos magnéticos do elétron e do próton, α é a constante de interação hiperfina, $\vec{S}$ e $\vec{I}$ são os spins do elétron e do próton respectivamente. Levando-se em consideração a interação hiperfina dos bósons, teremos a função de partição de uma partícula fatorada nas contribuições dos graus de liberdade de

spin e de translação. Como visto no Capítulo II, a parte de spin na Eq.(2.2) não tem influência na determinação dos expoentes críticos apresentados na tabela I, de forma que a inclusão da interação hiperfina não afeta o comportamento do GIBE magnetizado na região de transição.

Além do comportamento na vizinhança da temperatura crítica, analisamos os comportamentos das funções termodinâmicas nas linhas de transição L_1T e L_3T (veja Fig.1) quando o volume é mantido constante. Uma motivação para o estudo do GIBE na condição de pressão constante é que recentemente foi desenvolvido por Sprik, Walraven e Silvera⁽⁷⁾ um novo tipo de "cela" de estabilização que permite estudar amostras do gás de hidrogênio atômico polarizado de altas densidades e por períodos da ordem de minutos, quando a pressão e a temperatura são mantidos constantes. Por este motivo pretendemos fazer uma análise detalhada do comportamento das funções termodinâmicas nas linhas de transição quando mantemos a pressão constante, semelhante ao caso de volume constante feito na seção 3.3.

Dando continuidade ao estudo do GIBE, um outro problema interessante é estudar a influência de desordens na transição causadas pela ação de campos aleatórios nos casos de volume constante e de pressão constante.

APÊNDICE I

AS FUNÇÕES DE BOSE-EINSTEIN

Neste apêndice fazemos uma apresentação suscinta das funções de Bose-Einstein (FBE) e de algumas de suas propriedades usadas com frequência nos capítulos II e III. Estas funções são definidas⁽²⁾ por

$$F_{\sigma}(\alpha) = \frac{1}{\Gamma(\sigma)} \int_0^{\infty} \frac{y^{\sigma-1} dy}{e^{y+\alpha} - 1}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} n^{-\sigma} e^{-\alpha n}, \quad \alpha \geq 0 \text{ e } \forall \sigma \quad (\text{I.1})$$

$$\text{onde } \Gamma(\sigma) = \int_0^{\infty} e^{-y} y^{\sigma-1} dy \quad (\text{I.2})$$

é a função gama.

As FBE são funções monótonas decrescentes em α convergindo na origem se $\sigma > 1$ e divergindo se $\sigma \leq 1$. No limite de $\alpha \rightarrow \infty$ comportam-se como $e^{-\alpha}$, independente de σ . Os casos particulares $F_1(\alpha)$ e $F_0(\alpha)$ têm as formas fechadas dadas por

$$F_1(\alpha) = -\ln(1-e^{-\alpha}) \text{ e } F_0(\alpha) = (e^{\alpha}-1)^{-1} \quad (\text{I.3})$$

Outras propriedades que podem ser obtidas facilmente de (I.1) são

$$\frac{\partial F_{\sigma}(\alpha)}{\partial \alpha} = -F_{\sigma-1}(\alpha) \quad (\text{I.4})$$

$$F_{\sigma}(0) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-\sigma} = \zeta(\sigma), \quad \sigma > 1 \quad (\text{I.5})$$

onde $\zeta(\sigma)$ é a função Zeta de Riemann.

O comportamento das FBE em torno de $\alpha=0$ é determinado pelas seguintes expressões primeiramente obtidas por Robinson⁽¹⁶⁾:

$$F_{\sigma}(\alpha) = \Gamma(1-\sigma)\alpha^{\sigma-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha)^n \zeta(\sigma-n)}{n!} \quad (\text{I.6})$$

se σ é positivo e não inteiro

$$\begin{aligned} \text{e} \quad F_{\sigma}(\alpha) = & \frac{(-\alpha)^{\sigma-1}}{(\sigma-1)!} \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{\sigma-1} - \ln \alpha \right) \\ & + \sum_{\substack{n=0 \\ n \neq \sigma-1}}^{\infty} \frac{(-\alpha)^n \zeta(\sigma-n)}{n!} \end{aligned} \quad (\text{I.7})$$

se σ é um inteiro maior ou igual a 2.

APÊNDICE II

O LOGARÍTMO DA FUNÇÃO DE GRAND PARTIÇÃO Ξ

Mostramos aqui o uso da transformada de Mellin para representar a função logarítmo⁽¹²⁾ e como determinar toda termodinâmica do sistema através do comportamento analítico do integrando da integral de contorno que define o logarítmo da função de grand partição. Esta formulação é extremamente interessante, poderosa e simples, sendo aplicável tanto a sistemas de bósons como de férmions.

A transformada de Mellin $G(t)$ da função $g(x)$ e sua respectiva transformada inversa são definidas pelas integrais

$$G(t) = \int_0^{\infty} g(x) x^{t-1} dx \quad (\text{II.1})$$

$$g(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} G(t) x^{-t} dt \quad \sigma > \sigma_0, x > 0 \quad (\text{II.2})$$

usando a Eq.(II.1) com

$$g(x) = \ln|1+x| \text{ ou } g(x) = \ln|1-x| \quad (\text{II.3})$$

Podemos obter⁽¹⁷⁾

$$G(t) = \pi t^{-1} \operatorname{cosec}(\pi t) \text{ ou } G(t) = \pi t^{-1} \cotg(\pi t) \quad (\text{II.4})$$

onde $-1 < \operatorname{Re} t < 0$.

Sabemos por outro lado que o logarítmo da grand função de partição Ξ para um gás quântico ideal⁽¹⁸⁾ é dado pela equação

$$\ln \Xi = -\epsilon \sum_j \ln [1 - \epsilon e^{\beta(\theta - E_j)}] \quad (\text{II.5})$$

onde ε toma os valores $+1$ para bósons e -1 para férmions. Combinando as Eqs.(II.2), (II.3), (II.4) e (II.5), encontramos a seguinte expressão para $\ln \Xi$

$$\ln \Xi = - \frac{\varepsilon}{2i} \sum_j \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} t^{-1} (\cos \pi t)^\gamma \operatorname{cosec}(\pi t) e^{\beta \theta t} e^{-\beta t E_j} dt \quad (\text{II.6})$$

$$0 < C < 1$$

onde $\gamma \equiv (1+\varepsilon)/2$, valendo 1 para bósons e zero para férmions. Trocando a ordem⁽¹⁹⁾ de soma em j e integração em t na Eq.(II.6) e usando o fato de que $Z(\beta t) = \sum_j e^{-\beta t E_j}$ obtemos que $\ln \Xi$ é dado por

$$\ln \Xi = - \frac{\varepsilon}{2i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} t^{-1} (\cos \pi t)^\gamma \operatorname{cosec}(\pi t) e^{\beta \theta t} Z(\beta t) dt \quad (\text{II.7})$$

onde $\beta^{-1} = K_B T$, T a temperatura absoluta, K_B a constante de Boltzmann, θ o potencial químico e E_j a energia do j -ésimo estado da hamiltoniana da partícula.

A essência da Eq.(II.7) é a separação dos efeitos da estatística obedecida pelas partículas contidos no termo $\varepsilon(\cos \pi t)^\gamma$ da parte dinâmica $Z(\beta t)$ que contém todos os efeitos de superfície, dimensão, campos externos, etc. $Z(\beta t)$ é a continuação analítica da função de partição de uma partícula para valores complexos de β . Seu comportamento analítico (polos, cortes, singularidades, etc.) juntamente com o termo $t^{-1} \operatorname{cosec}(\pi t)$ determinarão toda termodinâmica do sistema. O fator $\varepsilon(\cos \pi t)^\gamma$, sendo uma função bem comportada, não modifica as propriedades analíticas da integral determinada por $Z(\beta t)$ (veja Eq.II.7), contribuindo porém na determinação dos valores dos resíduos do integrando.

O cálculo da integral na Eq.(II.7) com $\gamma=1$ é feito através de procedimentos matemáticos simples: usamos um caminho fecha

do e o auxílio do teorema do resíduo. Este contorno, ilustrado na figura abaixo,

Fig.3. Contorno para o cálculo da Eq.(II.7).

consiste de um segmento de reta de comprimento $2R$ distante C da origem, paralelo ao eixo imaginário, sendo fechado à direita por um semi-círculo de raio R . Escolhemos este raio de forma que o contorno não passe por nenhum dos polos simples do integrando que estão localizados nos pontos $t=n$, $n=1,2,3,\dots$ devido ao fator $\cotg(\pi t)$ na Eq.(II.7). A integral original é recuperada no limite de $R \rightarrow \infty$, impondo a condição $\theta \leq 0$ ao potencial químico a fim de que a contribuição do semi-círculo se anule. Esta condição em θ é uma exigência física para que o potencial químico nunca exceda a energia mínima das partículas, tal que o número de ocupação seja sempre positivo.

Lembramos que o teorema do resíduo⁽²⁰⁾ é dado por

$\oint \mathcal{F}(t) dt = -2\pi i \sum_n b_n$ e que o resíduo em t_0 de uma função da forma $f(t) = \frac{\phi(t)}{\psi(t)}$, tais que $\phi(t_0)=0$, $\psi'(t_0) \neq 0$ e $\psi(t_0) \neq 0$, é determinado por $b_0 = \phi(t_0)/\psi'(t_0)$. Por conveniência repetimos a Eq.(2.6)

$$\Omega = \frac{A_\sigma}{\beta} \frac{1}{2i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} t^{-1} \frac{\cos(\pi t)}{\sin(\pi t)} \frac{1}{(\beta t)^{d/\sigma}} \frac{\sinh[(S+1/2)\beta th]}{\sinh(\beta th/2)} e^{\beta \theta' t} dt \quad (\text{II.8})$$

Identificando $\phi(t) = \sin(\pi t)$, $\phi(t)$ com a parte restante do integrando e aplicando o teorema do resíduo obtemos para o GIBE magnetizado a seguinte expressão para Ω

$$\Omega = - \frac{A_\sigma}{\beta} \frac{1}{\frac{d}{\sigma} + 1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\frac{d}{\sigma} + 1} \frac{\sinh[(S+1/2)\beta nh]}{\sinh(\beta nh/2)}. \quad (\text{II.9})$$

Mostraremos a seguir como algumas funções termodinâmicas são obtidas diretamente do potencial Ω . Sabemos que Ω e a função de grand partição Ξ estão relacionados pela equação

$$\Omega(V, T, \theta, H) = -\beta^{-1} \ln \Xi(V, T, \theta, H) \quad (\text{II.10})$$

que contém toda informação termodinâmica do sistema. Usando a relação de Euler

$$U = TS - PV + \theta N + HM \quad (\text{II.11})$$

para definir Ω como a seguinte transformada de Legendre de U

$$\Omega = U - TS - \theta N - HM \quad (\text{II.12})$$

Diferenciando a Eq.(II.12) e combinando com a relação de Gibbs

$$dU = TdS - PdV + \theta dN + HdM \quad (\text{II.13})$$

obtemos a seguinte expressão:

$$d\Omega = -SdT - PdV - Nd\theta - MdH \quad (\text{II.14})$$

A diferencial total de $\Omega(T, V, \theta, H)$ é dada por

$$d\Omega = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \theta, H} dT + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \theta, H} dV + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \theta} \right)_{T, V, H} d\theta + \left(\frac{\partial \Omega}{\partial H} \right)_{T, V, \theta} dH \quad (\text{II.15})$$

Comparando (II.14) com (II.15) temos que

$$S = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \theta, H} \quad (\text{Entropia}) \quad (\text{II.16})$$

$$P = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \theta, H} \quad (\text{pressão}) \quad (\text{II.17})$$

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \theta} \right)_{T, V, H} \quad (\text{número de partículas}) \quad (\text{II.18})$$

$$M = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial H} \right)_{T, V, \theta} \quad (\text{magnetização}) \quad (\text{II.19})$$

APÊNDICE III

COMPORTAMENTOS DAS FUNÇÕES TERMODINÂMICAS NA VIZINHANÇA
DO PONTO CRÍTICO

Procuramos fazer neste apêndice os detalhes de cálculo para uma melhor compreensão do comportamento das funções termodinâmicas na região do ponto crítico apresentado na seção (3.1).

a) Começaremos com a magnetização espontânea m_0 .

Usando a Eq. (2.13) com $\theta=0$ e $H=0$

$$\frac{m_0}{g\mu_B S} = 1 - \frac{A_\sigma}{SN\beta d/\sigma} \sum_{\ell=0}^{2S} \ell F_{\frac{d}{\sigma}}(\ell) \quad (III.1)$$

e a expressão para a temperatura crítica

$$1 = \frac{A_\sigma}{N\beta_c d/\sigma} (2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(0) \quad (III.2)$$

Combinando (III.1) com (III.2) obtemos para a magnetização espontânea

$$m_0 = g\mu_B S (1 - t^{d/\sigma}) \quad (III.3)$$

b) A fração de partículas no condensado n_0 é obtida da equação que dá o número total de partículas Eq. (2.10). Reecrevendo esta equação usando $n_0 = \frac{N_0}{N}$ e $n_1 = \frac{N_1}{N}$ obtemos que

$$n_0 + n_1 = 1 \quad (III.4)$$

onde

$$n_0 = \sum_{\ell=0}^{2S} [e^{-\beta(\theta - \ell h)} - 1]^{-1} \quad (III.5)$$

e

$$n_1 = \frac{A_\sigma}{N\beta^{d/\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}[\beta(\theta - \ell h)]. \quad (\text{III.6})$$

Quando $\theta = n_0 = 0$, então $n_1 = 1$ e a Eq.(III.6) torna-se

$$\frac{A_\sigma}{N\beta^{d/\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}(-\beta\ell h) = 1 \quad (\text{III.7})$$

Fazendo em (III.7) $\beta = \beta_c$ e $h=0$ temos

$$\frac{A_\sigma}{N} = \frac{\beta_c^{d/\sigma}}{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}(0)} \quad (\text{III.8})$$

Combinando as Eqs.(III.4), (III.6) e (III.8)

$$n_0 = 1 - t^{d/\sigma} \frac{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}(-\ell h_c t)}{\sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}(0)} \quad (\text{III.9})$$

onde

$$h_c \equiv \frac{g\mu_B H}{K_B T_c} \quad (\text{III.10})$$

Fazendo $H=0$ na Eq.(III.9) encontramos finalmente que

$$n_0 = 1 - t^{d/\sigma} \quad (\text{III.11})$$

c) A equação de estado na região de transição e o cálculo de δ_M :

Na equação para a magnetização (Eq.2.13) fazemos $T=T_c$ e obtemos

$$\frac{m}{g\mu_B S} = 1 - \frac{A_\sigma}{SN\beta_C} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}(-\beta_C \ell h) . \quad (\text{III.12})$$

Recorrendo à expressão

$$F_{\frac{d}{\sigma}}(\alpha) = \zeta(d/\sigma) - \zeta\left(\frac{d}{\sigma} - 1\right)\alpha + \Gamma(1-d/\sigma)\alpha^{\frac{d}{\sigma}-1} + \dots \quad (\text{III.13})$$

onde $\zeta(d/\sigma) = F_{\frac{d}{\sigma}}(0)$ e observando que os termos dominantes na expansão acima são:

$\zeta\left(\frac{d}{\sigma} - 1\right)\alpha$ se $\frac{d}{\sigma} > 2$ e $\Gamma(1-d/\sigma)\alpha^{\frac{d}{\sigma}-1}$ se $\sigma < d < 2\sigma$ podemos reescrever a Eq. (III.12) como

$$\begin{aligned} \frac{m}{g\mu_B S} = 1 - \frac{A_\sigma}{SN\beta_C} & \left[S(2S+1)F_{\frac{d}{\sigma}}(0) + \right. \\ & \left. + \Gamma(1-d/\sigma) \sum_{n=1}^{2S} (-n\beta)^{\frac{d}{\sigma}-1} (g\mu_B)^{\frac{d}{\sigma}-1} H^{\frac{d}{\sigma}-1} \right] \quad (\text{III.14}) \end{aligned}$$

se $\sigma < d < 2\sigma$

e

$$\frac{m}{g\mu_B S} = 1 - \frac{A_\sigma}{SN\beta_C} \left[S(2S+1)F_{\frac{d}{\sigma}}(0) + \beta g\mu_B H \zeta\left(\frac{d}{\sigma} - 1\right) \sum_{\ell=1}^{2S} \ell^2 \right] \quad (\text{III.15})$$

se $d > 2\sigma$.

Combinando a Eq. (III.2) com as Eqs. (III.14) e (III.15) encontramos que

$$H \sim m \frac{\sigma}{d-\sigma}, \quad \sigma < d < 2\sigma \quad (\text{III.16})$$

$$H \sim m, \quad d > 2\sigma$$

Com a definição do expoente crítico δ_M obtemos a Eq.(3.15).

Quando $d=2\sigma$ combinamos a equação para a magnetização (Eq.2.13) com a expansão para as FBE dada na Eq.(7) do apêndice I.

$$\frac{m}{g\mu_B S} = 1 - \frac{A_\sigma}{NS\beta_c^2} \sum_{\ell=0}^{2S} \left[F_2(0) - (\beta\ell h) + (\beta\ell h) \ln(\beta\ell h) + \dots \right] \quad (\text{III.17})$$

Mantendo o termo dominante desta expansão

$$\frac{m}{g\mu_B S} \simeq 1 - \frac{A_\sigma}{NS\beta_c^2} \left[S(2S+1)F_2(0) + \beta h \sum_{\ell=1}^{2S} \ell \ln(\beta\ell h) \right] \quad (\text{III.18})$$

Substituindo a Eq.(III.2) na Eq.(III.18) encontramos que

$$m \sim H \ln H^{-1} \quad (\text{III.19a})$$

ou

$$\frac{m}{H} \sim - \ln H. \quad (\text{III.19b})$$

Tomando-se o logaritmo de (III.19a), desprezando o termo $\ln(\ln H^{-1})$ e usando (III.19b) podemos escrever

$$H \sim \frac{m}{\ln m^{-1}}. \quad (\text{III.20})$$

Com a definição do expoente crítico δ_M determinamos que $\delta_M = 1_L$.

d) O comportamento do potencial químico θ em torno da temperatura crítica.

Fazendo $h=0$ na expressão que dá o número de partículas nos estados excitados

$$\begin{aligned}
 N = N_1 &= \frac{A_\sigma}{\beta^{d/\sigma}} \sum_{\ell=0}^{2S} F_{\frac{d}{\sigma}}(\beta\theta) \\
 &= \frac{A_\sigma}{\beta^{d/\sigma}} (2S+1) F_{\frac{d}{\sigma}}(\beta\theta) ,
 \end{aligned} \tag{III.21}$$

e combinando com a expansão

$$F_{\frac{d}{\sigma}}(\beta\theta) = \Gamma(1-d/\sigma) (\beta\theta)^{\frac{d}{\sigma}-1} + F_{\frac{d}{\sigma}}(0) - F_{\frac{d}{\sigma}-1}(0) (\beta\theta) + \dots \tag{III.22}$$

Obtemos

$$N = (2S+1) \frac{A_\sigma}{\beta^{d/\sigma}} \left[F_{\frac{d}{\sigma}}(0) - F_{\frac{d}{\sigma}-1}(0) (\beta\theta) \right] \tag{III.23}$$

se $d > 2\sigma$

e

$$N = (2S+1) \frac{A_\sigma}{\beta^{d/\sigma}} \left[F_{\frac{d}{\sigma}}(0) + \Gamma(1-d/\sigma) (\beta\theta)^{\frac{d}{\sigma}-1} \right] \tag{III.24}$$

se $\sigma < d < 2\sigma$, onde foram retidos somente os termos dominantes.

Efetuada a substituição da Eq.(III.2) em (III.23) e (III.24) determinamos o comportamento de $\beta\theta$ como função de ε na região de transição.

APÊNDICE IV

AS PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DO GÁS IDEAL DE BOSE-EINSTEIN (GIBE)

Apresentamos um resumo das propriedades termodinâmicas do GIBE na vizinhança de sua transição que foram estudadas em detalhes por Gunton e Buckingham⁽³⁾ (G.B.). Eles introduziram um parâmetro de ordem chamado de momento de Bose ψ_0 , que é igual à raiz quadrada da densidade de partículas no condensado, e uma variável intensiva v_0 , chamada campo de Bose, conjugada ao momento de Bose. Por conveniência mantemos a mesma notação usada por G.B.

O sistema é definido pelo seguinte hamiltoniano

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \\ &= \sum_{\vec{K}} E(\vec{K}) a_{\vec{K}}^+ a_{\vec{K}} - V(v_0 \phi_0 + v_0 \phi_0^+) \end{aligned} \quad (\text{IV.1})$$

onde V é o volume do sistema, $a_{\vec{K}}^+$ e $a_{\vec{K}}$ são os operadores criação e aniquilação de uma partícula no estado $\vec{K}$ com energia $E(\vec{K}) = \hbar^2 \vec{K}^2 / 2m$. O par de variáveis dinâmicas é dado por

$$\phi_{\vec{K}} = V^{-1/2} a_{\vec{K}}, \quad \phi_{\vec{K}}^+ = V^{-1/2} a_{\vec{K}}^+ \quad (\text{IV.2})$$

$\psi_{\vec{K}}$ e $\psi_{\vec{K}}^*$ são as médias térmicas das variáveis dinâmicas definidas por (IV.2). O momento de Bose ψ_0 e o campo de Bose v_0 são análogos ao momento magnético e ao campo magnético de um sistema que exhibe uma transição de fase ferromagnética. Esta transição ocorre somente a campo nulo.

O hamiltoniano $\mathcal{H}_0$ comuta com o operador número de partículas $N = \sum_{\vec{K}} a_{\vec{K}}^+ a_{\vec{K}}$ e é invariante por uma transformação de Gauge $e^{iN\theta}$, onde θ é uma fase. Essa invariança de Gauge implica que o

momento de Bose é nulo para qualquer temperatura. Para contornar essa dificuldade introduziu-se o termo $\mathcal{H}_1$ que quebra a simetria de gauge de $\mathcal{H}_0$.

A pressão para o GIBE obtida por G.B. é dada como

$$P(\mu, v_0, T) = - \frac{v_0 v_0^*}{\mu} + (\beta \lambda^d)^{-1} F_{\frac{d}{2}+1}(-\beta \mu) \quad (\text{IV.3})$$

sendo μ o potencial químico, $\lambda = (2\pi\hbar^2/mK_B T)^{1/2}$ o comprimento de onda térmico de de Broglie, d a dimensionalidade do sistema e

$$F_\sigma(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-\sigma} e^{-nx}, \quad x \geq 0 \quad \text{são as FBE.}$$

O momento de Bose (ψ_0) e a densidade de partícula ($\rho = N/V$) são obtidas da Eq.(IV.3)

$$\psi_0 = \frac{\partial P}{\partial v_0} = - \frac{v_0^*}{\mu} \quad (\text{IV.4})$$

$$\rho = \frac{\partial P}{\partial \mu} = \frac{v_0 v_0^*}{\mu^2} + \lambda^{-d} F_{\frac{d}{2}}(-\beta \mu) \quad (\text{IV.5})$$

combinando a Eq.(IV.4) com a equação de conservação para a densidade (Eq.IV.5) obtemos que

$$\rho = \psi_0^* \psi_0 + \lambda^{-d} F_{\frac{d}{2}}(\beta v_0^* / \psi_0) \quad (\text{IV.6})$$

O primeiro termo no lado direito da Eq.(IV.6) é a densidade de partículas no estado $\vec{k}=0$. Usando a Eq.(IV.4) podemos verificar que a energia livre do sistema (Eq.IV.3) depende de $|\psi_0|^2$. Portanto podemos escolher sem perda de generalidade v_0 e ψ_0 reais, isto é, $v_0 = v_0^* = v$ e $\psi_0 = \psi_0^* = \psi$. Com as observações feitas acima concluímos da Eq.(IV.6) que $\psi_0 \sim N_0^{1/2}$.

Mostramos na tabela IV os expoentes críticos obtidos por G.B. para o GIBE em dimensão arbitrária, sem spin e com o espec -

tro de uma partícula dado por $E(K) \sim K^\sigma$.

TABELA IV - Valores dos expoentes críticos obtidos por G.B. para o GIBE como função da dimensionalidade d do sistema e do parâmetro σ da relação de dispersão $E(K) \sim K^\sigma$ no caso de volume constante.

exp. crit. dim.	α_S	β	γ	δ	η	ν
$\sigma < d < 2\sigma$	$\frac{d-2\sigma}{d-\sigma}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sigma}{d-\sigma}$	$\frac{d+\sigma}{d-\sigma}$	$2-\sigma$	$\frac{1}{d-\sigma}$
$d > 2\sigma$	$\frac{2\sigma-d}{\sigma}$	$\frac{1}{2}$	1	3	$2-\sigma$	$\frac{1}{\sigma}$

A comparação das médias termodinâmicas dos termos que quebram a simetria da hamiltoniana usada por G.B. e a usada neste trabalho, permite-nos determinar as relações entre os dois conjuntos de expoentes críticos que são dadas na tabela V.

TABELA V - Relações entre os expoentes críticos

$\alpha_M^S = \alpha_S$		
$\alpha_M^h = \alpha_h$	$\beta_M = 2\beta$	$\gamma_M = \gamma - 1$
$2\delta_M = \delta - 1$	$\eta_M = \eta - \sigma$	$\nu_M = \nu$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- (1) PAIS, A., Rev.Mod.Phys. 51, 863 (1979).
- (2) LONDON, F., Superfluids. Dover, New York (1954), Vol.II.
- (3) GUNTON, J.D. e BUCKINGHAM, M.J., Phys.Rev. 166, 152 (1968).
- (4) LACOUR-GAYET, P. e TOULOUSE, G., J. de Physique, 35, 425 (1974).
- (5) SILVERA, I.F. e WALRAVEN, J.T.M., Phys.Rev.Lett. 44, 164 (1980).
- (6) HECHT, C.E., Physica 25, 1159 (1959).
- (7) SPRIK, R., WALRAVEN, J.T.M. e SILVERA, I.F., Phys.Rev.Lett. 51, 479 (1983).
- (8) MULLIN, W.J., Phys.Rev.Lett. 44, 1420 (1980).
- (9) YAMADA, K., Prog.Theor.Phys. 67, 443 (1982).
- (10) KUBO, R., Statistical Mechanics. North-Holland (1981).
- (11) GUNTHER, L., IMRY, Y. e BERGMAN, D.J., J.Stat.Phys. 10, 299 (1974).
- (12) GRANDY Jr., W.T e GOULART ROSA, Jr.S., Am.J.Phys. 49, 570 (1981).
- (13) LANDSBERG, P.T. e DUNNING-DAVIES, J., Phys.Rev. 138, 1049 (1965).
- (14) HALL, C.K., J.Stat.Phys. 13, 157 (1975).
- (15) MA, S.K., Modern Theory of Critical Phenomena. Benjamin (1976).
- (16) ROBINSON, J.E., Phys.Rev. 83, 678 (1951).
- (17) GRADSHTEYN, I.S. e RYZHIK, I.M., "Tables of Integral, Series and Productes", pag.558 (1980).
- (18) HUANG, K., Statistical Mechanics. John Wiley & Sons (1963).
- (19) DUNNING-DAVIES, J., J.Phys. 14, 3013 (1981).
- (20) CHURCHILL, R.V., Variáveis Complexas e suas Aplicações. McGraw-Hill (1981).