

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Transições de Fase

Carlos Eugenio Imbassahy Carneiro

Resenha apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do título de Livre-Docente.

Abril de 1999

Sumário

1	Introdução	5
2	Fenomenologia das transições de fase	9
2.1	Conceitos básicos	9
2.2	Expoentes Críticos	15
2.3	A abordagem fenomenológica clássica: a teoria de Landau . . .	20
2.4	Teorema de flutuação dissipação	24
2.5	Teoria de Escala	25
3	Campo médio	31
3.1	Introdução	31
3.2	O modelo de Blume-Capel na aproximação de campo médio .	38
4	Trabalhos em campo médio	42
4.1	On the Equivalence of Different Landau Expansions, Physica A 162 (1989) 88.	42
4.2	(I) Comment on the Mean-Field Phase Diagram of the Spin-1 Ising Model in a Random Crystal Field, J. Phys.: Condensed Matter 1 (1989) 3687; (II) Mean-field phase diagram of the spin-1 Ising ferromagnet in a gaussian random crystal field, J. Phys. A: Math. Gen 23 (1990) 3383; (III) Global mean-field phase diagram of the spin-1 Ising fer- romagnet in a random crystal field, Physica A 230 (1996) 249.	43
4.3	Spin-glass nature of the chaotic phase of a system with com- peting interactions, Phys. Rev. A 43 (1990) 5691.	46

5	Teoria de Campos	50
5.1	Relação entre o modelo de Ising e a teoria ϕ^4	50
5.2	Expansão perturbativa e regras de Feynman	54
5.3	Regularização e Renormalização	63
5.4	Critério de Ginsburg-Landau e a descrição do ponto crítico . .	67
5.5	As equações do grupo de renormalização e a expansão em torno de T_c	70
5.6	Solução das equações do grupo de renormalização e os expoentes críticos	75
5.7	Universalidade	79
6	Trabalhos em Teoria de Campos	82
6.1	Thermal Replica Mixing and the Harris Criterion for Disordered Systems, University of Oxford preprint Ref: 64/82 (anexado no final desta resenha).	82
6.2	Renormalization group calculation for a spin-1 Ising model with bilinear and biquadratic exchange interactions, J. Phys. A: Math. Gen. 20 (1987) 189.	84
6.3	(I) Field-theoretic approach to the Lifshitz point, Phys. Rev. B 58 (1998) 6047; (II) Field-theoretic calculation of critical exponents for the Lifshitz point, Phys. Rev. B 59 (1999) 13954.	85
7	Simulações Numéricas	88
7.1	O Método de Monte Carlo para Sistemas Clássicos	88
7.2	O algoritmo de Metropolis	92
7.3	Dificuldades com simulações numéricas próximo de transições de fase	94
7.4	Algoritmos de <i>cluster</i>	95
7.5	Monte Carlo variacional para sistemas quânticos	99
8	Trabalhos em Simulações Numéricas	106
8.1	Eliminating metastability in first-order phase transitions, Phys. Rev. B 54 (1996) 359.	106

8.2	Hole spectrum in the two-dimensional Hubbard model, Physica C 166 (1990) 206.	108
8.3	Improved variational wave function for the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet, Phys. Rev. B 49 (1994) 3303.	109
8.4	Ground-State Energy of a Quantum Chain with Competing Interactions, J. Stat. Phys. 79 (1995) 347.	111
9	Conclusões e perspectivas	113

Capítulo 1

Introdução

Esta resenha tem por objetivo apresentar de uma forma razoavelmente completa a área de pesquisa à qual venho me dedicando nos últimos anos. Muito do que vai ser apresentado refere-se aos fenômenos críticos. Porém, o estudo de funções de onda variacionais para sistemas quânticos e a discussão de um algoritmo de *cluster*, capaz de eliminar a metaestabilidade em transições de fase de primeira ordem, fez com que eu adotasse para esta resenha um título mais geral—Transições de Fase.

Aproximadamente metade de minha produção científica versa sobre Teoria de Campos. Entre estes trabalhos, apenas os relativos a fenômenos críticos foram incluídos, os restantes são comentados no Memorial. Com isto, foi possível garantir um fio condutor através de meus trabalhos mais recentes que refletem melhor meus interesses atuais.

As transições de fase de primeira ordem, como a fusão de metais ou as transformações da água em gelo, ou vapor têm sido observadas e utilizadas desde os primórdios da humanidade. Uma outra classe de transições, bem mais sutis, as de segunda ordem, têm uma história mais recente. A primeira observação data de 1869 quando Andrews [1] descobriu que no diagrama de fases do dióxido de carbono existe um ponto em torno de 31°C e 73 atmosferas no qual as propriedades do líquido e do vapor se tornam indistinguíveis. Este ponto foi por ele denominado ponto crítico. Andrews também descreveu o comportamento das isotermas na vizinhança do ponto crítico, e observou que o dióxido de carbono nesta região espalha luz fortemente, adquirindo um aspecto opalescente. Atualmente, este fenômeno é chamado opalescência crítica e é uma das características das transições de segunda ordem. Nos anos que se seguiram encontraram-se outros sistemas que apresentavam comporta-

mento semelhante. Entre eles vale a pena ressaltar o caso do ferro. Em 1895, Pierre Curie [2] percebeu que este material também apresentava um ponto especial. Este ponto é caracterizado, a campo magnético nulo, por uma temperatura acima da qual o ferro não apresenta uma magnetização permanente (Esta temperatura é denominada temperatura de Curie). Também digno de nota é o fato de Curie ter percebido que as curvas de densidade×temperatura, a pressão constante, do dióxido de carbono são muito semelhantes às curvas de magnetização×temperatura a campo magnético constante do ferro. Este fenômeno de substâncias tão diferentes como o dióxido de carbono e o ferro apresentarem um comportamento crítico semelhante é denominado univversalidade. Voltaremos a todos estes tópicos mais adiante.

A primeira tentativa teórica para explicar os resultados de Andrews foi feita por Van der Waals [3] em 1873. A sua teoria prevê a existência do ponto crítico e explica a região de coexistência entre o líquido e o vapor. Maxwell [4] em 1874 melhorou a teoria de Van der Waals introduzindo a regra das áreas iguais para corrigir a curva pressão×volume na região de coexistência de fases.

Com relação aos materiais ferromagnéticos, houve um grande avanço em 1907 quando Weiss [5] postulou a existência de um campo interno bastante intenso agindo sobre os spins de materiais ferromagnéticos. Mais tarde, em 1928, Heisenberg [6] usando a mecânica quântica explicou a origem deste campo interno. No seu trabalho Weiss considerou este campo como sendo constante, desprezando flutuações. Este tipo de abordagem é conhecida atualmente como campo médio. Todas as teorias de campo médio fornecem os mesmos expoentes críticos—os expoentes clássicos.

Uma outra aproximação clássica, semelhante ao campo médio de Weiss, foi introduzida por Ornstein e Zernike [7] em 1914 para tratar a intensidade de espalhamento que é proporcional à transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos $G_c^{(2)}(\vec{r})$.

O período que se seguiu é marcado pelo aparecimento de modelos simples de spins que desempenham um papel importante no nosso entendimento de transições de fase. Sem dúvida alguma o mais famoso é o modelo de Ising [8], introduzido na verdade por Lenz [9] em 1920. Este modelo continua ainda hoje desempenhando um papel importante na mecânica estatística e em outras áreas. O argumento de Ising de que neste modelo os spin só se alinham para $T = 0$ é verdadeiro apenas em uma dimensão. Peierls [10] mostrou em 1936 que em duas dimensões a temperatura crítica é maior do que zero, tornando o modelo realmente interessante.

A teoria de Landau [11] proposta em 1937 pretendia ir além da teoria de campo médio mas fornece os mesmos expoentes clássicos.

O próximo fato notável neste desenvolvimento foi a solução exata do modelo de Ising bidimensional a campo nulo por Onsager [12] em 1944. Pela primeira vez, mostrou-se claramente que as teorias clássicas não eram confiáveis e isto serviu de estímulo para o desenvolvimento de teorias capazes de descrever corretamente o comportamento de sistemas nas vizinhanças de pontos críticos.

Pode-se modificar a teoria de Landau de várias maneiras. Uma tentativa que levou a resultados interessantes foi a teoria de escala, de Widom [13], proposta em 1965. Esta teoria que discutiremos em detalhe mais adiante tem várias consequências importantes, entre elas a existência de relações entre os expoentes críticos.

Entretanto uma solução realmente satisfatória do problema das transições de fase de segunda ordem só veio com a aplicação das ideias do grupo de renormalização por Wilson [14] em 1970. É interessante mencionar que o grupo de renormalização surgiu no contexto da física de partículas elementares nos trabalhos de Stueckelberg e Petermann (1953) ref. [15] e Gell-Mann e Low (1954) ref. [16]. Wilson identificou corretamente a causa da dificuldade no estudo do ponto crítico: o fato das flutuações relevantes não terem um comprimento característico. Assim, todos os comprimentos de onda variando do espaçamento atômico até o comprimento de correlação são essenciais. Wilson inspirou-se em uma ideia proposta por Kadanoff [17] em 1966, segundo a qual um ferromagneto próximo do ponto crítico poderia ser descrito em termos de blocos de spins interagindo entre si através de uma constante de acoplamento efetiva do tipo encontrada no modelo de Ising. Depois de tentar implementar esta ideia sem sucesso, Wilson percebeu que a interação efetiva é bem mais complexa do que a sugerida por Kadanoff, contendo interações entre segundos vizinhos, acoplamentos entre quatro spins, etc. Seu método faz algumas aproximações para estas interações. As técnicas do grupo de renormalização têm sido aplicadas com sucesso a um grande número de processos, veja por exemplo a ref. [18]. Nesta resenha daremos ênfase a uma outra técnica de grupo de renormalização, mais ligada a teoria de campos, desenvolvida por Brézin, Le-Guillou e Zinn-Justin [19]. Esta abordagem encontra-se bem explicada no livros de Amit [20] e Binney e colaboradores [21].

Um grande avanço que merece ser mencionado, mas que não será abordado nesta resenha, é a teoria de invariância conforme que permitiu um en-

tendimento bem mais profundo de muitos modelos clássicos bidimensionais e modelos quânticos unidimensionais, veja, por exemplo, as refs. [22] e [23]. Outra omissão refere-se à teoria das transições de fase de primeira ordem. Os desenvolvimentos recentes neste tema estão no trabalho de Borgs e Kotecky [24] de 1992.

Gostaria de discutir um aspecto desta resenha. Fiz um enorme esforço para não apenas dar uma visão geral da área, mas também apresentar de uma maneira didática as técnicas que empreguei em meus trabalhos. A tentativa de apresentar os tópicos de uma forma didática levou inevitavelmente ao aumento do tamanho desta resenha. Apesar disto, espero que a leitura seja agradável. Outro ponto importante diz respeito às referências. Como os trabalhos estão anexados ¹, e podem ser facilmente encontrados em no final de cada capítulo, procurei, com algumas exceções, não duplicar as citações. Na bibliografia no final desta resenha encontram-se as referências de caráter mais geral e histórico. As referências nos trabalhos anexados aprofundam os temas tratados e devem ser encarados como parte integrante da bibliografia.

Esta resenha está dividida em oito capítulos. No capítulo 2 apresentamos a fenomenologia das transições de fase, mais particularmente das transições de segunda ordem. Conceitos básicos, os expoentes críticos, a teorias de Landau e de escala, mencionados e tratados em detalhe nesta introdução. Este capítulo dá uma visão geral da área (utilizei as refs. [25], [26], e [27]). Após caracterizar o nosso objeto de estudo, apresentamos as três abordagens utilizadas: campo médio, grupo de renormalização e as simulações numéricas. O capítulo 3 trata da versão de Curie-Weiss do campo médio. O capítulo 4 discute minhas contribuições nesta área. No capítulo 5 abordo a teoria de campos no contexto dos fenômenos críticos. Os trabalhos nesta área são apresentados no capítulo 6. Faço uma introdução à área de simulações numéricas no capítulo 7, apresentando não apenas o algoritmo de Metropolis, mas também os algoritmos de *clusters*, também discuto em detalhe uma função de onda variacional para tratar sistemas quânticos. No capítulo 8 os trabalhos em simulação numérica são comentados. Finalmente, apresento as conclusões no capítulo 9.

¹Devido a problemas de direitos autorais, nesta versão “on line” da resenha só anexe o preprint do trabalho sobre o Critério de Harris. Os outros trabalhos podem ser encontrados nas revistas onde foram publicados.

Capítulo 2

Fenomenologia das transições de fase

2.1 Conceitos básicos

Ao pensarmos em transições de fase o primeiro exemplo que nos ocorre é o da água. Estamos bem familiarizados com as diferentes fases da água: sólida, líquida e gasosa, e em como elas podem se transformar entre si devido a variações de temperatura e pressão. Estas mudanças de fase da água desempenham um papel essencial no comportamento do clima e na manutenção da vida na Terra. Muitos exemplos de interesse tecnológico também vêm à mente: a fusão de metais, a evaporação de gasolina nos carburadores dos automóveis, a purificação de líquidos através da destilação, etc.

As mudanças entre as fases sólida, líquida e gasosa são **transições de fase de primeira ordem**. Este tipo de transição ocorre com a liberação ou absorção de calor, o chamado **calor latente**, em um intervalo de temperatura infinitesimalmente pequeno em torno da temperatura de transição. O funcionamento de refrigeradores e aparelhos de ar condicionado está baseado nesta propriedade. Em um refrigerador, líquido a baixa pressão passa para a fase gasosa no evaporador, absorvendo calor do interior do aparelho. Este vapor passa novamente para a fase líquida no condensador liberando calor para o ambiente através do radiador do aparelho.

A maior parte desta resenha será dedicada a uma outra classe de transições: as **transições de fase de segunda ordem**. Para caracterizá-las vamos começar analisando o sistema padrão que sofre este tipo de transição: o fer-

romagneto. O níquel, o ferro e o cobalto são materiais ferromagnéticos. Seus átomos possuem, devido a elétrons desemparelhados, momentos magnéticos não nulos. Abaixo de uma certa **temperatura crítica** T_c (354° C para o níquel, 770° C para o ferro e 1115° C para o cobalto), estes momentos tendem a se alinhar fazendo surgir uma **magnetização** M não nula. (Magnetização, por definição, é a soma dos momentos magnéticos de todos os átomos da amostra). A interação de troca entre os spins, um efeito quântico, é a responsável por este alinhamento. Esta magnetização, abaixo de T_c , não é usualmente observada porque do ponto de vista energético é mais interessante o sistema se dividir em domínios. Em cada domínio a magnetização é uniforme. Porém, a direção da magnetização nos diversos domínios é aleatória e a amostra como um todo se comporta como se estivesse desmagnetizada. Acima de T_c , as flutuações térmicas são suficientemente fortes para desordenar o sistema. O spin de cada átomo pode apontar em qualquer direção e conseqüentemente a magnetização é nula. Estas propriedades podem ser apresentadas de outra forma. Se um ferromagneto for submetido a um campo magnético H suficientemente forte os momentos magnéticos vão se alinhar com o campo. Isto ocorre em muitos outros materiais. O que distingue os ferromagnetos é que se desligarmos o campo a uma temperatura abaixo de T_c verificamos a presença de uma magnetização residual. Em contraste, em um **paramagneto** a magnetização vai a zero quando o campo H é desligado, em qualquer temperatura.

Desta discussão fica claro que um ferromagneto apresenta propriedades bastante distintas dependendo da temperatura em que ele se encontra. É conveniente, então, dizer que o ferromagneto apresenta duas fases. Uma **fase ferromagnética**, onde há magnetização espontânea e uma **fase paramagnética**, sem magnetização espontânea. Uma grandeza que caracteriza as diferentes fases de um sistema é chamada **parâmetro de ordem**. Usualmente a média térmica deste parâmetro é nula na fase de alta temperatura e diferente de zero abaixo de T_c . No caso do ferromagneto a magnetização espontânea $M_0(T) \equiv M(T, H \rightarrow 0)$ é o parâmetro de ordem. Para descrever a transição líquido-vapor um parâmetro conveniente é a diferença $\rho(\mathbf{x}) - \rho_{vap}(\mathbf{x})$, onde $\rho(\mathbf{x})$ é a densidade média em um pequeno volume centrado em \mathbf{x} e $\rho_{vap}(\mathbf{x})$ é a densidade do vapor na temperatura e na pressão média em torno de \mathbf{x} . É importante enfatizar que não é uma tarefa simples determinar o parâmetro de ordem apropriado para um sistema. Cada caso deve ser considerado separadamente.

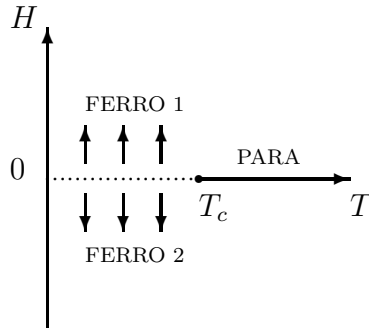


Figura 2.1: Diagrama de fases do modelo de Ising. O pontilhado sobre o eixo das temperaturas representa uma linha de transição de primeira ordem.

Nos ferromagnetos, a campo nulo, com o sistema inicialmente abaixo de T_c , a magnetização diminui suavemente à medida em que a temperatura aumenta e se anula para $T \geq T_c$. Ao cruzar T_c , o sistema sofre uma transição de fase. Transições nas quais o parâmetro de ordem varia suavemente são chamadas transições de fase de segunda ordem. Nas transições de fase de primeira ordem, como na líquido-vapor, o parâmetro de ordem muda descontinuamente quando passamos de uma fase para a outra. Vamos, agora, supor que o campo magnético aplicado varia apenas ao longo de uma direção fixa podendo também ser negativo. Neste caso podemos apresentar graficamente os resultados que discutimos através do **diagrama de fases** da fig. 2.1.

Cada ponto no semiplano $H \times T$ ($T \geq 0$) representa um possível estado do sistema. Em $T = 0$, na fase FERRO 1 (FERRO 2) todos os spins apontam no sentido de H ($-H$). Exatamente sobre a linha de primeira ordem na figura (linha tracejada) há uma coexistência das fases FERRO 1 e FERRO 2. Partes relativamente grandes do sistema (domínios) se encontram em fases diferentes. Esta coexistência de fases é uma das características das transições de primeira ordem. Para compreender melhor este diagrama vamos ver como a magnetização varia nas diversas regiões do diagrama.

Mantendo H fixo e variando T obtemos curvas como as da fig. 2.2, onde $H \rightarrow 0^+(0^-)$ significa que $H \rightarrow 0$ por valores positivos (negativos). A reta $M = 0$ (eixo T) é um eixo de simetria do conjunto de curvas. Assim, mantendo H constante e diferente de zero observamos que a magnetização vai

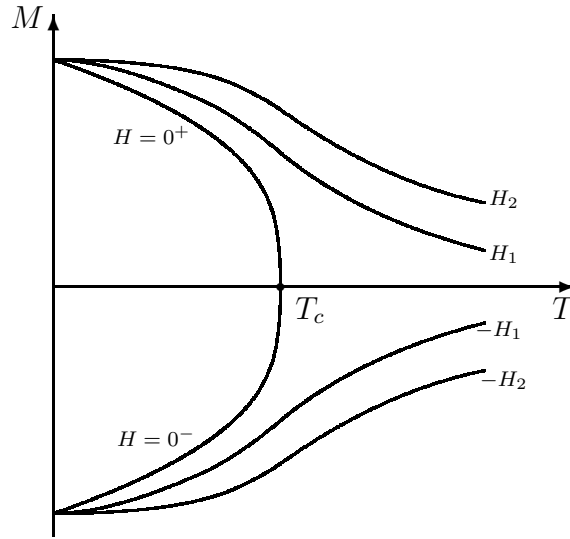


Figura 2.2: Curvas $M \times T$ para vários valores de H .

assintoticamente para zero quando $T \rightarrow \infty$. Porém, o comportamento para $H \rightarrow 0^+$ ou 0^- é qualitativamente diferente. Neste caso, que corresponde a nos movermos sobre o eixo das temperaturas, na fig. (2.1), a magnetização é nula para $T \geq T_c$.

Na fig. 2.3 mostramos várias curvas de magnetização a T constante. A tangente à curva $M(H)$ é vertical em $T = T_c$. Para $T < T_c$ não é possível passar de forma contínua, mantendo a temperatura constante, da fase FERRO1 para a FERRO2, onde a maioria dos spins aponta na direção oposta, a magnetização sofre um salto. Note, porém, que a descontinuidade desaparece para $T \geq T_c$.

Toda a discussão acima para ferromagnetos é análoga à que é feita para fluidos simples. Um diagrama de fases de um fluido está esquematizado na fig. 2.4. Este diagrama é mais rico do que o do ferromagneto. Há três fases separadas por três linhas de primeira ordem. Além do **ponto crítico**, que marca o fim da transição vapor-líquido, há também um ponto triplo onde as três fases coexistem. Para perceber melhor a analogia com o caso ferromagnético, vamos considerar apenas a linha de transição vapor-líquido (veja a fig. (2.5)).

Os diagramas das figs. 2.1 e 2.5 são qualitativamente semelhantes. Nos

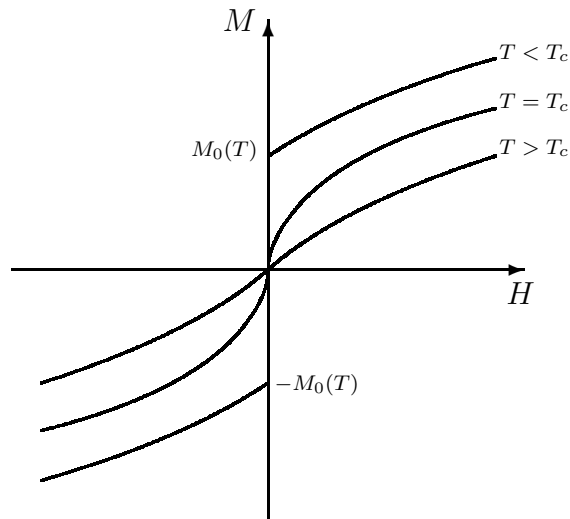


Figura 2.3: Curvas $M \times H$ na temperaturas crítica, T_c , e em temperaturas acima e abaixo de T_c .

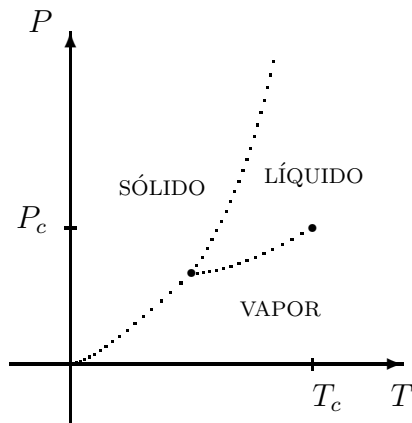


Figura 2.4: Diagrama de fases de um fluido simples. As coordenadas do ponto crítico são denotadas por (T_c, P_c) . O pontilhado representa linhas de transição de primeira ordem.

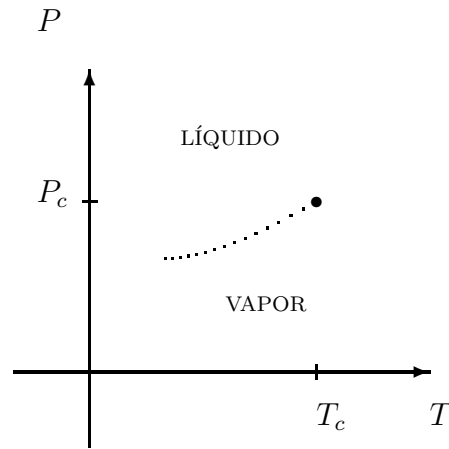


Figura 2.5: Linha de transição entre as fases líquida e de vapor de um fluido simples.

dois casos temos duas fases separadas por uma linha de transição de primeira ordem que termina em um ponto crítico. A pressão P desempenha o papel do campo H . Entretanto, uma das características que mais chama a atenção é a ausência de simetria no diagrama do fluido. Em contraste, no ferromagneto, além da simetria $H \longleftrightarrow -H$ do diagrama de fases, a transição de fase está relacionada com uma **quebra de simetria**. Na fase paramagnética $M = 0$ e há simetria rotacional. Na fase ferromagnética, ao contrário, $M \neq 0$ e a direção adotada pela magnetização quebra a invariância rotacional. Não existe nenhuma quebra de simetria análoga nas transições de fase de fluidos. Apesar disto, existem semelhanças profundas. Como no ferromagneto, escolhendo um caminho que contorne o ponto crítico, podemos passar continuamente de vapor para líquido. Além disto, se caminharmos sobre a linha de transição de primeira ordem, em direção ao ponto crítico, o parâmetro de ordem $\rho - \rho_{vap}$ varia como é mostrado na fig. 2.6. A semelhança com a curva $H = 0^+$, na figura é evidente. Na verdade a analogia é muito mais profunda, indo muito além de uma semelhança superficial. A forma com a qual o parâmetro de ordem vai a zero quando nos aproximamos de T_c é idêntica em ferromagnetos uniaxiais e em fluidos simples. Voltaremos a este ponto após introduzirmos o conceito de expoente crítico.

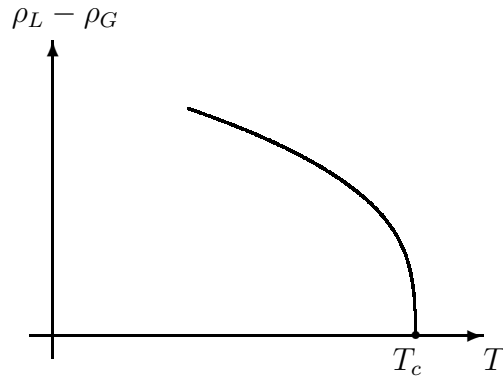


Figura 2.6: Variação do parâmetro de ordem em função da temperatura para um fluido simples ao longo da linha de transição vapor-líquido.

2.2 Expoentes Críticos

Quando apresentamos as curvas $M \times H$ para o ferromagneto, na fig. 2.2, mencionamos que para $T = T_c$ a tangente à curva $M(H)$, em $H = 0$, é vertical. Isto implica que a suscetibilidade $\chi(T, H = 0) = \partial M / \partial H|_{H=0}$ diverge. Assim, apesar do parâmetro de ordem variar continuamente na transição, a sua taxa de variação, a suscetibilidade, diverge. De uma forma geral, em transições de fase de segunda ordem, a taxa de variação do parâmetro de ordem em função do campo conjugado diverge no ponto crítico. Para todas elas, na região assintótica (T próximo de T_c), podemos escrever uma expressão do tipo

$$\chi(T, H = 0) \approx \begin{cases} C_+ |t|^{-\gamma} & \text{para } T > T_c \\ C_- |t|^{-\gamma'} & \text{para } T < T_c \end{cases}, \quad (2.1)$$

onde $t \equiv (T - T_c)/T_c$. Na expressão acima levamos em conta o fato de que podemos atingir T_c por valores superiores ($T \rightarrow T_c^+$) ou inferiores ($T \rightarrow T_c^-$). A teoria e os experimentos mostram que $\gamma = \gamma'$. Entretanto, as **amplitudes críticas** C_+ e C_- são diferentes. Para materiais magnéticos anisotrópicos,

com um eixo fácil de magnetização, e para fluidos, temos $1.23 \leq \gamma \leq 1.24$. Para materiais magnéticos altamente isotrópicos, $1.35 \leq \gamma \leq 1.38$. O expoente γ tem um caráter universal no sentido em que para um grande número de substâncias seu valor praticamente não muda. Ao contrário, as amplitudes C_+ e C_- dependem fortemente da substância. Porém, a razão C_+/C_- é universal. A propriedade notável dos sistemas críticos poderem ser divididos em um número razoavelmente pequeno de classes, caracterizadas pelo mesmo comportamento (mesmos expoentes, e mesmas razões de amplitudes críticas), é denominada **universalidade**.

Além da suscetibilidade, o calor específico também diverge no ponto crítico:

$$C_V(T, H = 0) \approx \begin{cases} A_+ |t|^{-\alpha} & \text{para } T > T_c \\ A_- |t|^{-\alpha'} & \text{para } T < T_c \end{cases}, \quad (2.2)$$

onde $\alpha = \alpha'$. Em geral, α é um número pequeno mas positivo. Também é possível uma divergência fraca, logarítmica, associada a $\alpha = 0$. Denotaremos este último tipo de divergência como $0(\log)$. Novamente, verifica-se que α e A_+/A_- têm um caráter universal.

Outros expoentes que também caracterizam a região crítica são β e δ , associados ao parâmetro de ordem e à isoterma crítica, respectivamente. Assim, próximo de T_c ,

$$M(T, H = 0) \approx B |t|^\beta = B \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^\beta, \quad T < T_c. \quad (2.3)$$

Lembre-se de que acima de T_c a magnetização a campo nulo é zero. Portanto, só interessa o comportamento abaixo de T_c .

O expoente δ é definido pela relação

$$H \sim |M(T = T_c, H)|^\delta. \quad (2.4)$$

Valores típicos dos expoentes críticos são apresentados na tabela 2.1.

Os expoentes α , β , γ e δ não são suficientes para descrever todas as propriedades da região crítica. Por exemplo, consideremos o éter etílico. Esta substância apresenta um ponto crítico à temperatura $T_c = 194^\circ C$ e à pressão $P_c = 35.5 \text{ atm}$. Neste ponto sua densidade é igual a $\rho_c = 0.263 \text{ g/cm}^3$. Se colocarmos uma quantidade apropriada de éter etílico em um tubo de ensaio fechado garantimos que o volume se mantém constante e que o sistema vai ter a densidade ρ_c em $T = T_c$. Desta forma, se começarmos acima de T_c e formos baixando a temperatura o sistema vai cruzar o ponto crítico.

Tabela 2.1: Valores típicos de expoentes críticos para líquidos, materiais magnéticos e para o modelo de Ising. CM significa campo médio.

Expoente	Experimental			Modelo de Ising		
	n=1	n=2	n=3	d=2	d=3	CM
α	≈ 0.11	≈ 0.0	≈ 0.14	$0(\log)$	0.125	0
β	≈ 0.32	≈ 0.34	0.35–0.37	1/8	0.312	1/2
γ	1.23–1.24	1.31–1.32	1.35–1.38	7/4	0.125	1
δ	≈ 4.8	≈ 4.7	≈ 4.6	15	5.00	3

Observamos a seguinte sequência. Acima de T_c o sistema está na fase gasosa e o tubo de ensaio apresenta-se razoavelmente transparente. Em um intervalo de temperatura pequeno em torno de T_c observa-se uma névoa azulada em uma faixa do tubo. Este fenômeno é chamado **opalescência crítica** e ocorre porque próximo de T_c existem grandes flutuações, altamente correlacionadas, da densidade do sistema. Conseqüentemente, a luz ao passar através do tubo de ensaio é fortemente espalhada. A névoa ocorre em uma faixa e não em todo o tubo devido ao campo gravitacional. Na parte superior do tubo a densidade é um pouco menor do que a densidade crítica, e um pouco maior na parte inferior. Abaixando ainda mais a temperatura a névoa desaparece e nesta região surge a superfície de separação entre as fases líquida e gasosa.

Um fenômeno análogo ocorre com substâncias magnéticas. Neste caso, próximo de T_c , a seção de choque para o espalhamento de nêutrons aumenta consideravelmente para pequenos ângulos de espalhamento. Em $T = T_c$ a intensidade diverge.

Para descrever este outro aspecto da criticalidade, que se manifesta em experiências de espalhamento, precisamos usar uma abordagem mais microscópica em termos de funções de correlação. Pode-se mostrar que a intensidade de luz espalhada no caso de fluidos, ou de nêutrons espalhados no caso de magnetos, é proporcional à transformada de Fourier $G_c^{(2)}(\mathbf{k})$ da função de correlação conexa de dois pontos.

$$G_c^{(2)}(\mathbf{k}) = \int d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} G_c^{(2)}(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

$$G_c^{(2)}(\mathbf{r}) \equiv \langle \phi(\mathbf{r})\phi(\mathbf{0}) \rangle - \langle \phi(\mathbf{r}) \rangle \langle \phi(\mathbf{0}) \rangle, \quad (2.6)$$

onde $\phi(\mathbf{r})$ é o parâmetro de ordem do sistema e, devido à invariância transla-

cional, $G_c^{(2)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ depende apenas da diferença $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \equiv \mathbf{r}$. Além disto,

$$\langle \phi(\mathbf{r}) \rangle = \langle \phi(\mathbf{0}) \rangle \equiv \bar{\phi} \quad (2.7)$$

e podemos escrever a eq. (2.6) como

$$G_c^{(2)}(\mathbf{r}) = \langle (\phi(\mathbf{r}) - \bar{\phi})(\phi(\mathbf{0}) - \bar{\phi}) \rangle \equiv \langle \delta\phi(\mathbf{r})\delta\phi(\mathbf{0}) \rangle \quad (2.8)$$

Assim, $G_c^{(2)}(\mathbf{r})$ mede a correlação de flutuações $\delta\phi$ do parâmetro de ordem em relação a seu valor de médio em pontos separados pelo vetor \mathbf{r} . Isto ainda fica mais claro se lembrarmos que duas grandezas A e B são descorrelacionadas se

$$\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle = 0 \quad (2.9)$$

O valor de $\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$ fornece uma medida do quanto as grandezas A e B estão correlacionadas. No nosso caso, $A = \delta\phi(\mathbf{r})$, $B = \delta\phi(\mathbf{0})$ e $\langle \delta\phi(\mathbf{r}) \rangle = \langle \delta\phi(\mathbf{0}) \rangle = 0$.

O aumento da intensidade de espalhamento está ligada a uma mudança drástica no comportamento da função de correlação no ponto crítico.

Exatamente no ponto crítico, $G_c^{(2)}(\mathbf{r})$ decai lentamente segundo uma lei de potência:

$$G_c^{(2)}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (\text{para } r \rightarrow \infty \text{ e } T = T_c). \quad (2.10)$$

A expressão (2.10) define o expoente η . Em contraste, fora do ponto crítico, $G_c^{(2)}(\mathbf{r})$ decai exponencialmente.

$$G_c^{(2)}(\mathbf{r}) \sim \frac{e^{-r/\xi}}{r^{\lambda_{\pm}}} \quad (\text{para } r \rightarrow \infty \text{ e } T \neq T_c), \quad (2.11)$$

onde

$$\xi \approx \begin{cases} f_+ |t|^{-\nu} & \text{para } T > T_c \\ f_- |t|^{-\nu'} & \text{para } T < T_c \end{cases}, \quad (2.12)$$

$\nu' = \nu$, e o **comprimento de correlação**, ξ , fornece a ordem de grandeza da distância a partir da qual as flutuações do parâmetro de ordem, em relação ao seu valor de equilíbrio, estão descorrelacionadas. Na temperatura crítica $\xi = \infty$ e obtemos um decaimento com uma lei de potência. A divergência de ξ é controlada pelo expoente ν . Na tabela 2.2 apresentamos alguns valores típicos de ν e η .

Se as relações (2.1)–(2.4) valessem apenas para ferromagnetos elas teriam um interesse limitado. O que é essencial é o seu caráter de universalidade. Estas relações, depois de fazermos as traduções apropriadas (por exemplo, $M \rightarrow \rho - \rho_{vap}$, $H \rightarrow \mu - \mu_{vap}$), têm a mesma forma para um número enorme de substâncias. Além disto, o valor dos expoentes também é o mesmo para materiais tão diversos como um ferromagneto anisotrópico e um fluido simples. Veja as tabelas 2.1 e 2.2.

Estas observações sugerem que os expoentes críticos sejam utilizados com a finalidade de classificação. Substâncias com expoentes críticos iguais podem ser colocados dentro de uma mesma **classe de universalidade**.

O resultado experimental de que sistemas extremamente diferentes apresentam um comportamento crítico semelhante mostra que este comportamento deve depender muito fracamente dos detalhes das interações microscópicas. O passo seguinte é descobrir que propriedades do sistema são importantes na determinação do comportamento crítico. Verificou-se que os expoentes críticos dependem essencialmente das três propriedades fundamentais listadas abaixo.

- **Dimensionalidade espacial, d , do sistema.** Compare os expoentes críticos do modelo de Ising bidimensional ($d = 2$) e tridimensional ($d = 3$) na tabela 2.1.
- **Número de componentes, n , do parâmetro de ordem,** que está diretamente relacionado com a **simetria do sistema**. Para um ferromagneto anisotrópico $n = 1$, em uma transição superfluida $n = 2$ e para ferromagnetos isotrópicos $n = 3$. Quando $n = 1$ dizemos que o sistema é do tipo Ising, $n = 2$ é do tipo XY e $n = 3$ é do tipo Heisenberg, onde os nomes se referem a sistemas de spin que possuem parâmetros de ordem com $n = 1, 2$ ou 3 componentes. Compare as três primeiras colunas da tabela 2.1.

Tabela 2.2: Valores típicos dos expoentes críticos η e ν .

Expoente	Experimental	Modelo de Ising		
		d=2	d=3	CM
η	0.03–0.1	1/4	0.05	0
ν	0.62–0.70	1	0.643	1/2

- **Alcance das forças microscópicas de interação.** O campo médio do modelo de Ising, última coluna das tabelas 2.1 e 2.2, corresponde a uma interação de alcance infinito. As colunas $d = 2$ e $d = 3$ correspondem a modelos de Ising com interação de curto alcance, apenas entre primeiros vizinhos. Há uma distinção clara entre curto alcance e alcance infinito.

Note que o modelo de Ising tridimensional apresenta expoentes muito próximos dos observados experimentalmente para sistemas com $n = 1$. Isto seria realmente de se esperar se os expoentes críticos dependessem fracamente dos detalhes das interações.

2.3 A abordagem fenomenológica clássica: a teoria de Landau

Uma das primeiras teorias utilizada para explicar as transições de fase de segunda ordem foi a teoria de Landau [11]. Este tipo de abordagem consiste em identificar o parâmetro de ordem da transição e em seguida expandir a energia livre apropriada em uma série de Taylor neste parâmetro. A altas temperaturas uma expansão deste tipo pode ser justificada rigorosamente. Próximo de T_c , esta expansão não é correta. Porém, em um número grande de casos ela permite obter resultados qualitativamente corretos. Não é possível prever de antemão se os resultados serão confiáveis ou não. Na teoria de Landau, assim como na teoria de campo médio, o ingrediente fundamental que é preservado é a simetria do sistema. É surpreendente o quanto pode ser obtido preservando apenas a simetria.

Vamos exemplificar o que foi dito acima com um exemplo: o do ferromagneto uniaxial. Neste caso assumimos que a energia livre de Helmholtz pode ser expandida em potências da magnetização, M . Assim,

$$F(M, T) = A(T) + B(T)M^2 + C(T)M^4 + \dots \quad (2.13)$$

onde as funções A , B e C são funções analíticas da temperatura. Devido à simetria sob a transformação $M \rightarrow -M$, devemos ter $F(-M, T) = F(M, T)$ e as potências ímpares de M não aparecem. Esta expansão é truncada em uma dada potência de M .

Acima de T_c , se B e C forem positivos, e desprezarmos potências mais altas de M (estamos interessados na região assintótica, $T \approx T_c$, na qual

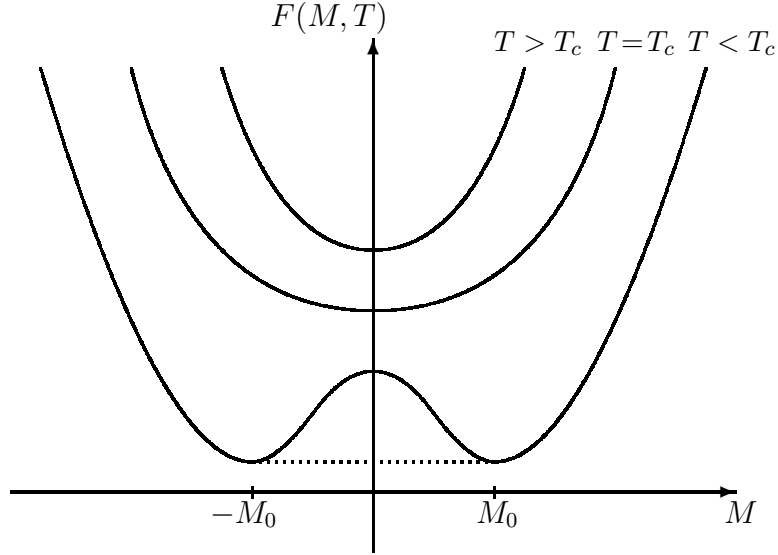


Figura 2.7: Variação da energia livre em função da magnetização M na teoria de Landau. A parte não convexa da curva para $T < T_c$ é substituída por sua envoltória convexa—a linha pontilhada.

$M \approx 0$), a curva de $F(M, T)$ é convexa e tem o aspecto da curva $T > T_c$ na fig. 2.7. O problema está em $T < T_c$. Neste caso deveríamos obter uma F com o fundo achatado, indicando uma região de coexistência de fases. Entretanto, com um polinômio, como o da eq. (2.13), o melhor que conseguimos é uma curva com o aspecto da curva $T < T_c$ da fig. 2.7, obtida com $B < 0$ e $C > 0$. Os mínimos ocorrem em $M = \pm M_0$ e $M = 0$ é um máximo local. A convexidade de F pode ser recuperada através da construção de Maxwell. Ela consiste em substituir o gráfico de F por sua envoltória convexa, a linha pontilhada da fig. 2.7.

O fato de B ter de mudar de sinal abaixo de T_c para produzir um mínimo diferente de zero implica que na vizinhança de T_c

$$B(T) \approx B_0(T - T_c) . \quad (2.14)$$

Desta forma, $B(T) > 0$ para $T > T_c$, e $B(T) < 0$ para $T < T_c$, como queremos. Além disto, devemos ter

$$C(T) \approx C(T_c) \equiv C_0 > 0 , \quad (2.15)$$

na vizinhança de T_c , para garantir a estabilidade do sistema. Substituindo as eqs. (2.14) e (2.15) na (2.13), e nos restringindo à vizinhança de T_c , onde M é pequeno, podemos escrever

$$F(M, T) \approx A(T) + B_0(T - T_c)M^2 + C_0M^4 . \quad (2.16)$$

Agora podemos obter os expoentes críticos. Começemos calculando a magnetização residual $M_0 = M(T, H = 0)$. Obtemos $M = M(T, H)$ usando a relação termodinâmica

$$\left(\frac{\partial F}{\partial M} \right)_T = H . \quad (2.17)$$

A magnetização M_0 é determinada colocando-se $H = 0$ na equação acima. Portanto, M_0 deve corresponder aos mínimos de $F(M, T)$ a T constante,

$$\left(\frac{\partial F}{\partial M} \right)_{T, M=M_0} = [2B_0(T - T_c) + 4C_0M_0^2] M_0 = 0 . \quad (2.18)$$

Assim, a solução nula está associada a $T \geq T_c$ e a solução diferente de zero a $T < T_c$ e podemos escrever

$$M_0 = \begin{cases} 0 & \text{para } T \geq T_c \\ [B_0/(2C_0)]^{1/2} (T_c - T)^{1/2} & \text{para } T < T_c \end{cases} . \quad (2.19)$$

Da equação (2.19) e da (2.3), que define β , decorre que

$$\beta = \frac{1}{2} . \quad (2.20)$$

A suscetibilidade, χ , é obtida através da relação

$$\chi^{-1} = \left(\frac{\partial H}{\partial M} \right)_{T, M=M_0} = \left(\frac{\partial^2 F}{\partial M^2} \right)_{T, M=M_0} = 2B_0(T - T_c) + 12C_0M_0^2 . \quad (2.21)$$

Utilizando-se a eq. (2.19), que fornece M_0 acima e abaixo de T_c , obtemos

$$\chi_{H=0} = \begin{cases} (2B_0)^{-1} (T - T_c)^{-1} & \text{para } T > T_c \\ (4B_0)^{-1} (T - T_c)^{-1} & \text{para } T < T_c \end{cases} , \quad (2.22)$$

Da eq. (2.22) e da (2.1), que define γ , segue que

$$\gamma = 1 , \quad \text{e} \quad \frac{C_+}{C_-} = 2 . \quad (2.23)$$

Observe que os "detalhes" do sistema, contidos em B_0 , se cancelam na razão C_+/C_- .

Novamente, usando a eq. (2.17) podemos escrever

$$2B_0(T - T_c)M + 4C_0M_0^3 = H. \quad (2.24)$$

Na isoterma crítica $T = T_c$ e portanto

$$H = 4C_0M_0^3. \quad (2.25)$$

A eq. (2.25) e a (2.4), que define δ , fornecem

$$\delta = 3. \quad (2.26)$$

Finalmente, vamos calcular o expoente α definido a campo nulo.

$$c_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{H=0} = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_{H=0}. \quad (2.27)$$

Neste caso é mais conveniente trabalhar com $G(T, H)$ —a transformada de Legendre de $F(T, M)$ —,

$$G(T, H) = F(T, M(T, H)) - HM(T, H). \quad (2.28)$$

Como só queremos c_V a campo nulo a expressão (2.28) se simplifica consideravelmente:

$$G(T, 0) = F(T, M_0(T)) = A(T) + B_0(T - T_c)M_0^2 + C_0M_0^4. \quad (2.29)$$

Usando a eq. (2.19), que fornece M_0 acima e abaixo de T_c , podemos escrever

$$G(T, 0) = \begin{cases} A(T) & \text{para } T > T_c \\ A(T) - [B_0^2/(2C_0)](T - T_c)^2 & \text{para } T < T_c \end{cases}. \quad (2.30)$$

Da equação acima e da (2.27), que expressa c_V em termos de derivadas de G , obtemos

$$c_V = \begin{cases} -\frac{Td^2A}{dT^2} & \text{para } T > T_c \\ -\frac{Td^2A}{dT^2} + \frac{TB_0^2}{2C_0} & \text{para } T < T_c \end{cases}. \quad (2.31)$$

Em $T = T_c$ o calor específico sofre um salto igual a $T_c B_0^2/2C_0$ mas não diverge. Portanto, a partir da eq. (2.2), que define α , concluímos que na teoria de Landau

$$\alpha = 0. \quad (2.32)$$

2.4 Teorema de flutuação dissipação

Usaremos este teorema inúmeras vezes nesta resenha. Assim, é conveniente apresentar sua demonstração. Mostraremos a relação entre a suscetibilidade e a transformada de Fourier a momento zero da função de correlação $G_c^{(2)}$.

Trabalharemos com sistemas de spins que são descritos por uma Hamiltoniana da forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0(\{\sigma\}) - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.33)$$

onde σ_i denota o spin no sítio i de uma rede hipercúbica d -dimensional, H é o campo magnético, e $\{\sigma\}$ denota a configuração de spins da rede.

Mais adiante, quando apresentarmos a teoria de campos, precisaremos da versão contínua da eq. (2.33):

$$A = \int d^d \mathbf{x} \mathcal{H}_0(\phi(\mathbf{x})) - H \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}). \quad (2.34)$$

A função de partição no caso discreto é dada por

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta \mathcal{H}}, \quad (2.35)$$

e no caso contínuo por

$$Z = Tr e^{-A}, \quad (2.36)$$

onde Tr denota uma integral funcional sobre o campo $\phi(\mathbf{x})$.

A magnetização M é dada por

$$M = \begin{cases} (1/\beta) \partial \ln Z[H] / \partial H = \langle \sum_i \sigma_i \rangle & \text{(caso discreto)} \\ \partial \ln Z[H] / \partial H = \langle \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \rangle & \text{(caso contínuo)} \end{cases}. \quad (2.37)$$

Como M em geral diverge no limite termodinâmico, é conveniente trabalhar com a magnetização por spin no caso discreto, ou com a magnetização por unidade de volume no caso contínuo. Denotaremos ambas por m :

$$m \equiv \begin{cases} M/N & \text{(caso discreto)} \\ M/V & \text{(caso contínuo)} \end{cases}, \quad (2.38)$$

onde N é o número de spins e V o volume do sistema.

Faremos a demonstração para o caso contínuo. A demonstração para o caso discreto é análoga.

Usando as eqs. (2.38) e (2.36) obtemos

$$m = \frac{1}{ZV} \text{Tr} \left\{ \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) e^{-A} \right\} . \quad (2.39)$$

A suscetibilidade por unidade de volume é definida como

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial m}{\partial H} \\ &= \frac{1}{ZV} \text{Tr} \left\{ \left(\int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) \right) \left(\int d^d \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}') \right) e^{-A} \right\} \\ &\quad - \frac{1}{Z^2 V} \text{Tr} \left\{ \int d^d \mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) e^{-A} \right\} \text{Tr} \left\{ \int d^d \mathbf{x}' \phi(\mathbf{x}') e^{-A} \right\} \\ &= \frac{1}{V} \int d^d \mathbf{x} \int d^d \mathbf{x}' \langle \phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}') \rangle - \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle \langle \phi(\mathbf{x}') \rangle \end{aligned} \quad (2.40)$$

Devido à invariância translacional, a função de dois pontos só depende da diferença entre as coordenadas \mathbf{x} e \mathbf{x}' ,

$$\langle \phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}') \rangle - \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle \langle \phi(\mathbf{x}') \rangle = G_c^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G_c^{(2)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}') . \quad (2.41)$$

Substituindo a eq. (2.41) na (2.40), que fornece χ , e em seguida fazendo a mudança de variável

$$\mathbf{x} = \mathbf{R} + \mathbf{x}' . \quad (2.42)$$

obtemos

$$\chi = \frac{1}{V} \int d^d \mathbf{x} \int d^d \mathbf{R} G_c^{(2)}(\mathbf{R}) = \int d^d \mathbf{R} G_c^{(2)}(\mathbf{R}) . \quad (2.43)$$

A última integral na eq. (2.43) é proporcional à transformada de Fourier a momento zero de $G_c^{(2)}$. Portanto,

$$\chi = G_c^{(2)}(\mathbf{k} = \mathbf{0}) . \quad (2.44)$$

2.5 Teoria de Escala

Widom [13] introduziu a hipótese de escala postulando que próximo de T_c a função f , da equação de estado $M = f(T, H)$, é uma função homogênea generalizada de $t \equiv |T - T_c|/T_c$ e H . Este fato tem várias consequências importantes, entre elas a existência de relações entre os expoentes críticos.

Vamos derivar as relações entre os expoentes partindo não da equação de estado mas da energia livre $G = G(T, H)$.

Começamos supondo que a parte mais singular de G , na região $T \approx T_c$, é uma função homogênea generalizada de t e H . A parte singular, G_s , da energia livre G é definida como

$$G_s \equiv - \frac{G - G_r}{k_B T V} , \quad (2.45)$$

onde G_r é a parte regular de G . Dizer que G_s é uma função homogênea generalizada de t e H significa que

$$G_s(t, H) = \lambda G_s(\lambda^a t, \lambda^b H) , \quad (2.46)$$

onde λ é arbitrário e a, b são parâmetros que serão fixados a posteriori.

Como λ é arbitrário, podemos escolhê-lo de tal forma que

$$\lambda^a t = 1 \implies \lambda = t^{-1/a} . \quad (2.47)$$

Substituindo este valor de λ na eq. (2.46) obtemos

$$G_s(t, H) = t^{-1/a} G_s\left(1, \frac{H}{t^{b/a}}\right) . \quad (2.48)$$

Definimos, em seguida,

$$G_s(1, x) \equiv A_{\pm} Y_{\pm}(D_{\pm} x) , \quad -1/a \equiv 2 - \alpha , \quad b/a \equiv \Delta , \quad (2.49)$$

onde A_{\pm} e D_{\pm} são amplitudes não universais que dependem dos detalhes do sistema. O subscrito \pm é necessário uma vez que a forma de G_s é diferente acima (sinal $+$) e abaixo (sinal $-$) de T_c . A razão de não absorvemos A_{\pm} e D_{\pm} na definição de Y_{\pm} é a seguinte: desde que fatorizemos o A_{\pm} e D_{\pm} apropriados para cada sistema, a função Y_{\pm} resultante tem um caráter universal. Voltaremos a este importante ponto no final desta seção. Com as definições acima podemos escrever

$$G_s(t, H) = A_{\pm} |t|^{2-\alpha} Y_{\pm}\left(D_{\pm} \frac{H}{|t|^{\Delta}}\right) . \quad (2.50)$$

Colocamos $-1/a \equiv 2 - \alpha$ porque isto faz com que $G_s \sim |t|^{2-\alpha}$ e a campo nulo sabemos que

$$c_V \sim T \left(\frac{\partial^2 G_s}{\partial T^2} \right)_{H=0} \sim |t|^{-\alpha} . \quad (2.51)$$

Note que isto obriga $Y_+(0)$ e $Y_-(0)$ serem finitos.

Falta identificar o expoente Δ . Lembremos que

$$M \sim \left(\frac{\partial G_s}{\partial H} \right)_T = A_{\pm} D_{\pm} |t|^{2-\alpha-\Delta} Y'_{\pm} \left(D_{\pm} \frac{H}{|t|^{\Delta}} \right). \quad (2.52)$$

A campo nulo, para $T < T_c$, $M_0 \sim |t|^{\beta}$. Assim,

$$\beta = 2 - \alpha - \Delta. \quad (2.53)$$

Além disto, para $H = 0$ e $T > T_c$, $M_0 = 0$ e portanto $Y'_+(0) = 0$. Por outro lado, na isoterma crítica $t = 0$ e a dependência entre M e H é dada pela expressão

$$M \sim H^{1/\delta}. \quad (2.54)$$

Desta forma, o comportamento de $Y'_{\pm}(y)$ na eq. (2.51) para $y \equiv DH/|t|^{\Delta} \rightarrow \infty$ deve fornecer um fator $H^{1/\delta}$, isto implica que

$$Y'_{\pm}(y) \sim y^{1/\delta}, \quad \text{para } y \rightarrow \infty. \quad (2.55)$$

Ao mesmo tempo, o fator $|t|^{2-\alpha-\Delta}$ deve se cancelar. Isto só é possível se

$$\frac{\Delta}{\delta} = 2 - \alpha - \Delta. \quad (2.56)$$

As eqs. (2.52) e (2.56) permitem calcular Δ ,

$$\Delta = \beta\delta, \quad (2.57)$$

e podemos reescrever a eq. (2.50) como

$$G_s(t, H) = A_{\pm} |t|^{2-\alpha} Y_{\pm} \left(D_{\pm} \frac{H}{|t|^{\beta\delta}} \right). \quad (2.58)$$

Vamos mostrar agora como a eq. (2.58) leva a uma série de relações entre os expoentes críticos.

Derivando em relação a H a eq. (2.52), que fornece a magnetização, obtemos, após substituirmos Δ por $\beta\delta$, a seguinte expressão para a suscetibilidade

$$\chi_H = \frac{\partial M}{\partial H} \sim |t|^{2-\alpha-2\beta\delta} Y''_{\pm} \left(D_{\pm} \frac{H}{|t|^{\beta\delta}} \right). \quad (2.59)$$

Como $\chi_{H=0} \sim |t|^{-\gamma}$, devemos ter

$$2 - \alpha - 2\beta\delta = -\gamma \quad (2.60)$$

A relação (2.53), após colocarmos $\Delta = \beta\delta$, pode ser combinada com a (2.60) de modo a fornecer as duas equações equivalentes

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad \text{lei de escala de Rushbrook,} \quad (2.61)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1) \quad \text{lei de escala de Widom.} \quad (2.62)$$

Podemos estender a ideia de escala para as funções de correlação e assumir que, para $T \approx T_c$,

$$G_c^{(2)}(r, |t|) \approx \frac{1}{r^{d-2+\eta}} F\left(\frac{r}{\xi}\right), \quad (2.63)$$

onde $\xi \sim |t|^{-\nu}$ é o comprimento de correlação e F é adimensional. Como $G_c^{(2)}$ depende apenas do módulo de \mathbf{r} , e não de sua direção, sua transformada de Fourier vai depender apenas de $k \equiv |\mathbf{k}|$,

$$G_c^{(2)}(k, |t|) \approx \int d^d \mathbf{r} \frac{1}{r^{d-2+\eta}} F\left(\frac{r}{\xi}\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.64)$$

A análise dimensional fornece

$$[k] = [L^{-1}], \quad [\xi] = [L]. \quad (2.65)$$

Usando os dois parâmetros dimensionais k e ξ podemos escrever

$$G_c^{(2)}(k, |t|) \sim \xi^{2-\eta} R(k\xi), \quad (2.66)$$

onde R é adimensional.¹ O teorema de flutuação dissipação, demonstrado na seção 2.4, fornece

$$G_c^{(2)}(k=0, |t|) \sim \chi \sim |t|^{-\gamma}. \quad (2.67)$$

Portanto,

$$R(0) \neq 0, \text{ e é finito para } x \rightarrow 0, \quad (2.68)$$

¹Podéríamos também ter colocado $G_c^{(2)}(k, |t|) \sim Q(k\xi)/k^{2-\eta}$. Porém, redefinindo Q , $Q(k\xi) \equiv R(k\xi)(k\xi)^{2-\eta}$, recaímos na eq. (2.66).

Assim,

$$G_c^{(2)}(k=0, |t|) \sim \xi^{2-\eta} \sim |t|^{-\nu(2-\eta)}. \quad (2.69)$$

Comparando as eqs. (2.69) e (2.67) obtemos mais uma relação entre os expoentes críticos:

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad \text{lei de escala de Fisher.} \quad (2.70)$$

Assim, a hipótese de que $G_s(t, H)$ e $G_c^{(2)}(r, |t|)$ são funções homogêneas generalizadas de suas variáveis leva a grandes simplificações e a várias relações entre os expoentes críticos. Falta ainda derivar a relação de hiper-escala, também conhecida como lei de Josephson. A sua derivação não pode ser feita como as anteriores e precisaríamos usar o grupo de renormalização. Aqui, porém, vamos apresentar apenas uma argumentação heurística que fornece a expressão correta. Começamos observando que próximo do ponto crítico o único comprimento característico de um sistema é o comprimento de correlação, ξ . O comprimento ξ vai definir a escala em relação à qual todos os outros comprimentos serão medidos. Portanto, uma grandeza com dimensão $[L^D]$ dever ser proporcional a ξ^D próximo do ponto crítico.

Lembrando que $G/k_B T$ é adimensional, é fácil ver que $G_s \equiv -(G - G_r)/(k_B T V)$ tem dimensão de inverso de volume, $[G_s] = [L^{-d}]$. Assim, próximo de T_c ,

$$G_s \sim \xi^{-d} \sim |t|^{\nu d}. \quad (2.71)$$

Por outro lado, a relação (2.50) afirma que

$$G_s \sim |t|^{2-\alpha}. \quad (2.72)$$

Portanto,

$$2 - \alpha = \nu d \quad \text{relação de hiper-escala.} \quad (2.73)$$

É interessante observar que os expoentes críticos de campo médio satisfazem as leis de escala e a relação de hiper-escala com $d = 4$. A relação de hiper-escala é peculiar no sentido em que é a única onde a dimensionalidade do sistema aparece explicitamente. Ela só foi melhor compreendida com o advento do grupo de renormalização.

Assim, como existem quatro equações relacionando os expoentes críticos, dos seis expoentes: α , β , γ , δ , η , e ν , apenas dois são independentes. O conhecimento de apenas dois deles permite calcular os quatro restantes.

Existe outra consequência bastante interessantes da hipótese de escala. Para explorá-la voltemos para a equação de estado, fornecida na (2.51).

Lembrando que $2 - \alpha - \Delta = \beta$ (veja a eq. (2.52)), $\Delta = \beta\delta$ e definindo $W_{\pm}(x) \equiv Y'_{\pm}(x)$, podemos reescrever a eq. (2.51) da seguinte forma

$$\frac{M}{|t|^{\beta}} \approx B_{\pm} W_{\pm} \left(D_{\pm} \frac{H}{|t|^{\beta\delta}} \right), \quad (2.74)$$

onde $B_{\pm} \equiv A_{\pm} D_{\pm}$ são amplitudes não universais.

A equação (2.74) sugere que usemos as variáveis $M/(B_{\pm}|t|^{\beta})$ e $D_{\pm}H/|t|^{\beta\delta}$ para graficar os resultados experimentais. Se isto for feito, os dados *colapsam* sobre as curvas W_{+} ou W_{-} , dependendo de T ser maior ou menor do que T_c . As funções W_{\pm} são universais. Evidentemente W_{\pm} dependem da classe de universalidade da substância. Por exemplo, ferromagnetos com parâmetro de ordem com um número de componentes $n = 1$ (tipo Ising) têm funções W_{\pm} diferentes de ferromagnetos com $n = 2$ (tipo XY) ou com $n = 3$ (tipo Heisenberg).

Capítulo 3

Campo médio

3.1 Introdução

As teorias de Landau e de escala são bastante gerais, não se restringindo a nenhum modelo ou sistema em particular. Porém, aplicam-se apenas a transições de fase de segunda ordem. Gostaríamos de desenvolver um método que forneça para qualquer modelo, mesmo que de forma aproximada, as linhas de transição de primeira e segunda ordem e que nos permita, desta forma, construir um diagrama de fases. Isto é precisamente o que a teoria de campo médio faz. Esta abordagem, por não levar em conta as flutuações do parâmetro de ordem, tem inúmeras limitações. Entretanto, sua simplicidade faz com que ela seja recomendada como uma primeira aproximação na determinação de diagramas de fases. Em um número grande de casos os resultados de campo médio estão qualitativamente corretos. Porém, exatamente como no caso da teoria de Landau, não é possível saber a priori se eles estão qualitativamente corretos. O campo médio preserva a simetria do sistema. É surpreendente o quanto dos resultados é determinado apenas pela simetria. Iremos nos concentrar na versão de **campo médio de Curie-Weiss**. Esta versão torna mais claro a conexão entre o campo médio e a teoria de campos: os resultados do campo médio são equivalentes à da aproximação de árvore da teoria de campos.

Vamos apresentar a teoria através do **modelo de Ising** que descreve a interação de spins $1/2$ entre si e com um campo magnético externo. Sua hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i, \quad (3.1)$$

onde $\sigma_i \pm 1$, J e H são constantes com dimensão de energia, H é proporcional ao campo magnético aplicado, e a soma, no termo de troca, proporcional a J , é sobre primeiros vizinhos em uma rede hipercúbica d -dimensional.

A dificuldade para se calcular a função de partição deste modelo,

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left\{ \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta H \sum_i \sigma_i \right\} \quad (3.2)$$

reside no termo de troca que acopla os primeiros vizinhos. Em uma rede hipercúbica d -dimensional o spin no sítio i interage com $2d \equiv z$ vizinhos e podemos reescrever o termo de troca como

$$\frac{1}{2} \beta J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sum_{j=1}^d \sigma_{j \pm \hat{e}_j}, \quad (3.3)$$

onde \hat{e}_j , $j = 1, 2, \dots, d$, são versores de um sistema cartesiano d -dimensional, e o fator $1/2$ foi colocado para compensar a dupla contagem dos pares de spin. A aproximação de campo médio de Curie-Weiss consiste em fazer a substituição

$$\sigma_i \sum_{j=1}^d \sigma_{j \pm \hat{e}_j} \rightarrow \sigma_i \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j, \quad (3.4)$$

ou seja, ao invés de interagir apenas com os primeiros vizinhos, o spin σ_i interage com todos os outros spins da rede, inclusive com ele mesmo, com a mesma intensidade. No caso do spin $1/2$ a auto-interação produz apenas uma constante uma vez que $\sigma_i^2 = 1$, e desta forma qualquer configuração de spins adiciona a mesma constante à hamiltoniana. Note que o fator $1/N$ na eq. (3.4) é importante para garantir a existência do limite termodinâmico bem definido. Sem este fator o termo de interação entre os spins seria proporcional a N^2 enquanto que o termo de interação com o campo H seria proporcional a N . Isto traria problemas no limite $N \rightarrow \infty$. Também podemos interpretar a (3.4) dizendo que o spin σ_i interage com o campo médio $\bar{H} \equiv \sum_{j=1}^N \sigma_j / N$. Esta aproximação bastante drástica, permite resolver o problema resultante exatamente.

Assim, em vez de calcular a função de partição (3.2) calcularemos a função de partição de campo médio

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left\{ \frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 + \beta H \sum_i \sigma_i \right\}. \quad (3.5)$$

Podemos reduzir facilmente o termo quadrático que aparece na (3.5) através da identidade

$$\exp\left(\frac{a^2}{2}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2} + ax\right). \quad (3.6)$$

Usando a eq. (3.6) reescrevemos a eq. (3.5) como

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(2\pi)^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{2}} \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left\{x \left(\frac{\beta J}{N}\right)^{1/2} \sum_i \sigma_i + \beta H \sum_i \sigma_i\right\}. \quad (3.7)$$

Pretendemos calcular a energia livre de Gibbs por spin, $g(T, H)$, definida através da relação $Z \equiv \exp[-\beta N g(T, H)]$. Assim, é conveniente fatorar o termo βN . Para isto fazemos a mudança de variável

$$\left(\frac{\beta J}{N}\right)^{1/2} \equiv \beta J y. \quad (3.8)$$

Desta forma, a eq. (3.7) pode ser escrita como

$$Z = \left(\frac{\beta J N}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\beta J N y^2/2} \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left[(\beta J y + \beta H) \sum_i \sigma_i\right]. \quad (3.9)$$

Nesta etapa podemos efetuar a soma sobre configurações

$$\begin{aligned} \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\left[(\beta J y + \beta H) \sum_i \sigma_i\right] &= \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_i \exp[(\beta J y + \beta H)\sigma_i] \\ &= \prod_i \sum_{\sigma_i} \exp[(\beta J y + \beta H)\sigma_i] = \prod_i 2 \cosh(\beta J y + \beta H) \\ &= [2 \cosh(\beta J y + \beta H)]^N. \end{aligned} \quad (3.10)$$

A única passagem não trivial nas igualdades acima foi a comutação da produtoria com a soma sobre configurações, que se torna uma soma sobre os valores do spin σ_i . Esta igualdade pode ser demonstrada observando que $\exp[(\beta J y + \beta H)\sigma_i] \equiv a_i$ só assume dois valores: $\exp[\beta J y + \beta H] \equiv a_+$ e $\exp[-\beta J y - \beta H] \equiv a_-$. Assim,

$$\begin{aligned} \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_i \exp[(\beta J y + \beta H)\sigma_i] &= \sum_{\{\sigma_i\}} a_1 a_2 \dots a_N \\ &= (a_+ + a_-)(a_+ + a_-) \dots (a_+ + a_-). \end{aligned} \quad (3.11)$$

De fato, quando calculamos o último termo da eq.(3.11) fazemos aparecer todas as configurações contidas no primeiro termo, cada configuração aparecendo uma única vez. Por exemplo, a configuração $a_+ a_+ \dots a_+$ é obtida tomando-se o a_+ de cada um dos termos $a_+ + a_-$ da eq.(3.11). Mas o último termo também pode ser escrito como $\prod_i \sum_{\sigma_i} a_i c d$ o que completa a demonstração.

Substituindo a eq.(3.10) na eq.(3.9) obtemos

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{\beta J N}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\beta J N y^2 / 2} [2 \cosh \beta (J y + H)]^N \\ &= \left(\frac{\beta J N}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\{-\beta N g_L(y; T, H)\}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

onde

$$g_L(y; T, H) \equiv \frac{J y^2}{2} - \frac{1}{\beta} \ln 2 \cosh \beta (J y + H) \quad (3.13)$$

é o **funcional de Landau**.

No limite $N \rightarrow \infty$ apenas a vizinhança de \bar{y} , o valor de y que minimiza g_L , contribui para a integral na eq.(3.12). Assim, podemos substituir $g_L(y; T, H)$ por sua expansão em torno de \bar{y} . Para $y \approx \bar{y}$

$$g_L(y; T, H) \approx g_L(\bar{y}; T, H) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 g_L(\bar{y}; T, H)}{\partial \bar{y}^2} (y - \bar{y})^2. \quad (3.14)$$

Inserindo a eq.(3.14) na eq.(3.12) obtemos

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{\beta J N}{2\pi} \right)^{1/2} \exp\{-\beta N g_L(\bar{y}; T, H)\} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp\left\{-\frac{\beta N}{2} \frac{\partial^2 g_L(\bar{y}; T, H)}{\partial \bar{y}^2} (y - \bar{y})^2\right\} \end{aligned} \quad (3.15)$$

A integral gaussiana é facilmente calculada após definirmos a nova variável $y' \equiv y - \bar{y}$ e integrarmos sobre y' . (É necessário também verificarmos se $\partial^2 g_L(\bar{y}; T, H) / \partial \bar{y}^2 > 0$.) A função de partição assume então a forma

$$Z = \left(\frac{1}{J} \frac{\partial^2 g_L(\bar{y}; T, H)}{\partial \bar{y}^2} \right)^{-1/2} \exp\{-\beta N g_L(\bar{y}; T, H)\}, \quad (3.16)$$

onde lembramos que \bar{y} satisfaz

$$\frac{\partial g_L(\bar{y}; T, H)}{\partial \bar{y}} = 0 . \quad (3.17)$$

No caso do modelo de Ising a eq.(3.17) se escreve como

$$\bar{y} = \tanh \beta(J\bar{y} + H) . \quad (3.18)$$

Como $Z = \exp[-\beta N g(H, T)]$ e o fator que multiplica a exponencial na eq.(3.16) é $\mathcal{O}(N^0)$, concluímos que no limite $N \rightarrow \infty$

$$g(T, H) = g_L(\bar{y}; T, H) = \frac{J\bar{y}(T, H)}{2} - \frac{1}{\beta} \ln\{2 \cosh \beta[J\bar{y}(T, H) + H]\} . \quad (3.19)$$

Assim, o funcional de Landau, $g_L(y; T, H)$, calculado no mínimo, fornece a energia livre de Gibbs por spin. Além disto, o funcional $g_L(y; T, H)$ fornece, exatamente como a energia livre de Helmholtz, $f(m, T)$, as equações das linhas críticas e de primeira ordem, assim como as coordenadas dos pontos críticos e multicríticos. Em muitos casos $g_L(y; T, H)$ pode ser calculado mais facilmente do que $f(m, T)$. Esta é a razão principal para utilizá-lo. Antes de mostrar que $g_L(y; T, H)$ fornece as mesmas informações que $f(m, T)$ vamos completar esta seção calculando esta última.

A energia livre de Helmholtz, $f(m, T)$, pode ser obtida de $g(H, T)$ através de uma transformada de Legendre:

$$f(m, T) = g(H, T) + Hm = g_L(\bar{y}(H, T); T, H) + Hm , \quad (3.20)$$

onde $\bar{y}(H, T)$ é calculado com a eq. (3.18).

Começemos mostrando que podemos identificar \bar{y} e m . A Termodinâmica fornece a relação

$$m = - \left(\frac{\partial g}{\partial H} \right)_T . \quad (3.21)$$

Usando a eq. (3.19), que fornece g em função de g_L , e a eq. (3.18) obtemos

$$m = -[J\bar{y} - J \tanh \beta(J\bar{y} + H)] \frac{\partial \bar{y}}{\partial H} - \tanh \beta(J\bar{y} + H) = \bar{y} . \quad (3.22)$$

Portanto, podemos substituir \bar{y} por m na (3.18) e chegamos a

$$m = \tanh \beta(Jm + H) , \quad (3.23)$$

que nos permite calcular $H(m, T)$ e completar o cálculo de $f(m, T)$. Da eq. (3.23) decorre

$$H = kT \tanh^{-1}(m) - Jm = \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{1+m}{1-m} \right) - Jm . \quad (3.24)$$

Depois de substituir a eqs. (3.19) e (3.24) na eq. (3.20) e reescrever o $\cosh \beta(Jm + H)$ como

$$\cosh \beta(Jm + H) = \left[\frac{1}{1 - \tanh^2 \beta(Jm + H)} \right]^{1/2} = \left(\frac{1}{1 - m^2} \right)^{1/2} , \quad (3.25)$$

obtemos finalmente a expressão de $f(m, T)$:

$$f(m, T) = -\frac{Jm^2}{2} - kT \ln 2 + \frac{kT}{2} \ln(1 - m^2) + \frac{kT}{2} m \ln \left(\frac{1+m}{1-m} \right) . \quad (3.26)$$

É conveniente expressar f , g_L , kT e H em unidades de J . Assim,

$$\frac{f(m, T)}{J} = -\frac{m^2}{2} - \tau \ln 2 + \frac{\tau}{2} \ln(1 - m^2) + \frac{\tau}{2} m \ln \left(\frac{1+m}{1-m} \right) , \quad (3.27)$$

$$\frac{g_L(y; \tau, h)}{J} = \frac{y^2}{2} - \tau \ln 2 - \tau \ln \cosh \left(\frac{y}{\tau} + \frac{h}{\tau} \right) , \quad (3.28)$$

onde definimos as variáveis adimensionais

$$\tau \equiv \frac{kT}{J} \quad \text{e} \quad h \equiv \frac{H}{J} . \quad (3.29)$$

É interessante chamar a atenção para um ponto importante. Foi uma tarefa razoavelmente simples obter a forma exata de $f(m, \tau)$, dada na eq. (3.27), porque conseguimos determinar facilmente h em função de m e τ a partir da equação

$$m = - \left(\frac{\partial g}{\partial h} \right)_{\tau} . \quad (3.30)$$

Isto é uma particularidade do modelo de Ising. Para outros modelos este cálculo é mais difícil. Entretanto, é quase sempre fácil obter uma expansão de h em potências de m a partir da eq. (3.30). Uma vez obtida esta expansão,

determinamos $f(m, \tau)$ integrando em m a expansão de h . O resultado da integração, graças à relação termodinâmica

$$h = \left(\frac{\partial f}{\partial m} \right)_\tau, \quad (3.31)$$

fornece a expansão de $f(m, \tau)$ em potências de m , a menos de uma constante aditiva. Esta constante só depende da temperatura e é igual a $g_L(y = 0; \tau, h = 0)$. A expansão, porém, não é suficiente para a determinação das linhas de primeira ordem. Neste caso, a magnetização sofre uma descontinuidade ao cruzarmos a linha de transição, mas não é necessariamente pequena e a expansão em m não fornece resultados confiáveis. O procedimento correto consiste em achar todas as magnetizações m que são soluções da eq. (3.30) e ver qual delas minimiza a energia livre. A fase que o sistema vai escolher corresponde à magnetização que minimiza a energia livre.

Alguns autores trabalham exclusivamente com a eq. (3.30), obtendo o diagrama de fases seguindo as variações de m . Este método tem vários inconvenientes. Em particular, existem regiões no espaço de parâmetros de alguns modelos em que a eq. (3.30) tem mais de duas soluções. Sem a expressão da energia livre é muito difícil ter uma ideia clara do que está ocorrendo.

O cálculo do funcional de Landau é razoavelmente simples e direto para qualquer modelo de spin. Portanto, é de grande importância mostrar que podemos trabalhar diretamente com o funcional de Landau, sem calcular a energia livre. Este é o assunto do primeiro trabalho desta resenha. Antes, porém, vamos falar um pouco mais sobre as expansões da energia livre e do funcional de Landau.

Vamos agora expandir $f(m, \tau)$ e $g_L(y; \tau, h)$ em potências de m e y , respectivamente. Próximo ao ponto crítico a magnitude de m é pequena e isto sugere uma expansão $f(m, \tau)$ em potências de m . Esta expansão, truncada no termo de sexta ordem, toma a forma

$$\frac{f(m, \tau)}{J} = -\tau \ln 2 + \frac{1}{2}(\tau - 1)m^2 + \frac{\tau}{12}m^4 + \frac{\tau}{30}m^6. \quad (3.32)$$

A temperatura crítica pode ser determinada a partir da eq. (3.32). O argumento é igual ao que apresentamos quando discutimos a teoria de Landau: em $T = T_c$ o coeficiente do termo proporcional a m^2 se anula. Ou seja,

$$\tau_c - 1 = 0 \Rightarrow \tau_c = 1 \Leftrightarrow T_c = J_c/k, \quad (3.33)$$

onde usamos a eq. (3.29) que define τ em termos de T .

Mostremos que a expansão de $g_L(y; H = 0, \tau)$ em potências de y fornece a mesma temperatura crítica para o modelo de Ising. Expandindo a eq. (3.28) em potências de y obtemos

$$g_L(y; 0, \tau) = -\tau \ln 2 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) y^2 + \frac{1}{12\tau^3} y^4 - \frac{1}{15\tau^5} y^6. \quad (3.34)$$

O coeficiente de y^2 se anula quando $\tau = \tau_c = 1$, como no caso anterior. Note, porém, que as expansões (3.32) e (3.34) são diferentes. Em particular, os termos de sexta ordem têm sinais opostos. Para formular a equivalência entre as duas expansões de uma maneira mais geral vamos fazê-lo dentro do contexto do modelo de Blume-Capel

3.2 O modelo de Blume-Capel na aproximação de campo médio

O modelo de Blume-Capel descreve a interação de partículas de spin-1 entre si, com um campo cristalino e com um campo magnético. Sua hamiltoniana é dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mu_i \mu_j + \Delta \sum_i \mu_i^2 - \sum_i \mu_i, \quad (3.35)$$

onde $\mu_i = \pm 1, 0$ e Δ é proporcional à intensidade do campo cristalino que surge devido ao campo elétrico dos íons vizinhos. Este campo elétrico altera o movimento orbital do elétron e pode afetar o alinhamento do spin do elétron através do acoplamento spin-órbita, proporcional a $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, onde \mathbf{L} é o momento angular do elétron. O campo cristalino cria uma direção preferencial de alinhamento e pode ser representado pelo termo proporcional a Δ da hamiltoniana efetiva (3.35). O diagrama de fases do modelo de Blume-Capel está esboçado na fig. 3.1. Ao invés de um único ponto crítico, como no modelo de Ising, existe toda uma linha de pontos críticos (a linha contínua no plano $T \times \Delta$). Neste plano, na região A, delimitada pelos eixos T , Δ e pelas linhas de transições de primeira e segunda ordem, o sistema se encontra na fase ferromagnética.¹ Fora da região A, a fase é paramagnética. A transição entre a fase paramagnética e a fase ferromagnética por qualquer caminho

¹Apesar de não indicado na figura, a região A se prolonga indefinidamente no semiplano $\Delta < 0$.

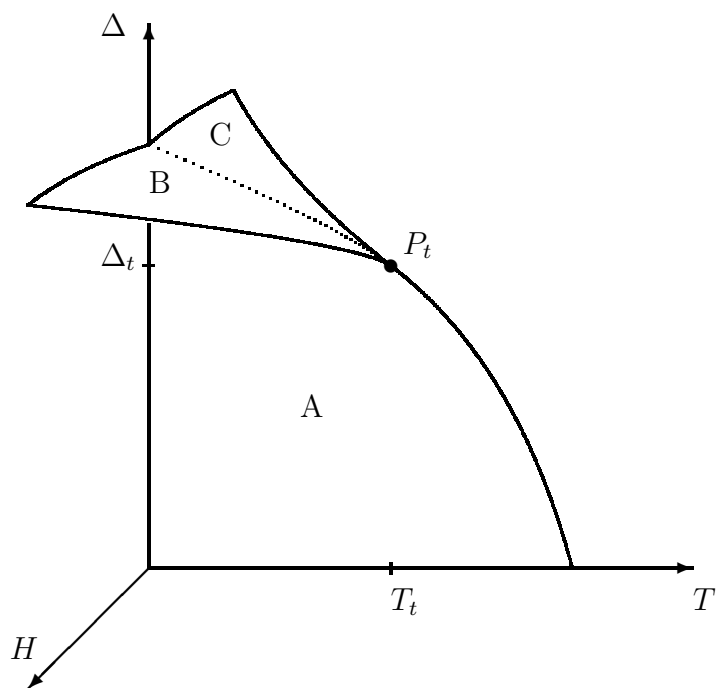


Figura 3.1: Esboço do diagrama de fases do modelo de Blume–Capel. A linha pontilhada denota transições de primeira ordem. As linhas contínuas, transições de segunda ordem. As superfícies B, C (“asas”) e A são de primeira ordem. As coordenadas do ponto tricrítico são indicadas por (T_t, Δ_t) .

que cruze a linha contínua é de segunda ordem. A linha de primeira ordem (linha pontilhada) termina em um **ponto tricrítico**. A razão deste nome decorre do fato de que as bordas das "asas" B e C no diagrama são linhas de segunda ordem. Assim, três linhas de segunda ordem convergem para o ponto tricrítico. As superfícies A, B e C são superfícies de transição de primeira ordem. A magnetização sofre um salto quando atravessamos uma destas superfícies.

Podemos facilmente calcular o funcional de Landau para o modelo de Blume-Capel, de modo análogo ao que fizemos para o modelo de Ising na seção anterior. A maior diferença consiste em os spins assumirem, além dos valores ± 1 , o valor 0. O resultado, em unidades de J , é

$$\frac{g_L(y; \tau, h)}{J} = \frac{y^2}{2} - \tau \ln \left[1 + 2e^{D/\tau} \cosh \left(\frac{y}{\tau} + \frac{h}{\tau} \right) \right] \quad (3.36)$$

onde

$$\tau \equiv \frac{kT}{J}, \quad h \equiv \frac{H}{J} \quad e \quad D \equiv \frac{\Delta}{\tau}. \quad (3.37)$$

Através de $g_L(y; \tau, D, h)$ podemos obter $f(m, \tau, D)$.

As expansões da energia livre e do funcional de Landau para o modelo de Blume-Capel, em unidades de J , assumem a forma

$$f(m, \tau, D) = A(\tau, D) + B(\tau, D)m^2 + C(\tau, D)m^4 + D(\tau, D)m^6 + \dots, \quad (3.38)$$

$$g_L(y; m, \tau, D, h = 0) = A'(\tau, D) + B'(\tau, D)y^2 + C'(\tau, D)y^4 + D'(\tau, D)y^6 + \dots. \quad (3.39)$$

É interessante verificar como surge a linha de segunda ordem deste modelo. Conforme já discutimos na seção que trata da teoria de Landau, a energia livre deve ter dois mínimos na fase ferromagnética e apenas um na fase paramagnética. Isto só é possível se o coeficiente do termo proporcional a m^2 se anular para $T = T_c$ e for positivo para $T > T_c$ e negativo para $T < T_c$. Além disto para garantir a estabilidade termodinâmica o termo proporcional a m^4 deve ser positivo. Portanto, a linha de segunda ordem é determinada pelas condições

$$B(\tau_c, D_c) = 0, \quad (3.40)$$

$$C(\tau_c, D_c) > 0. \quad (3.41)$$

Como agora temos dois parâmetros, D e τ , obtemos uma linha de pontos críticos ao invés de um ponto isolado. A eq. (3.40) fornece a D_c como função de τ_c , ou seja, a equação de uma linha.

Uma pergunta que ocorre naturalmente é o que ocorre quando o coeficiente do termo proporcional a m^4 , $C(\tau_c, D_c)$, também se anula. Se o coeficiente do termo proporcional a m^6 for positivo a estabilidade termodinâmica está garantida e temos um **ponto tricrítico**. Suas coordenadas, τ_t e D_t , são determinadas pelas equações

$$B(\tau_t, D_t) = 0, \quad (3.42)$$

$$C(\tau_t, D_t) = 0, \quad (3.43)$$

$$D(\tau_t, D_t) > 0. \quad (3.44)$$

Uma vez determinados τ_t e D_t , através das eqs. (3.42) e (3.43), precisamos ainda verificar se a eq. (3.44) está satisfeita.

Para determinar a linha de primeira ordem não podemos usar a expansão de $f(m, \tau)$ em potências de m , uma vez que m não é necessariamente pequeno. Devemos, desta forma, resolver numericamente equações transcendentais. Começamos determinando as raízes da equação

$$\left(\frac{\partial f}{\partial m} \right)_\tau = h. \quad (3.45)$$

Por exemplo, no modelo de Blume-Capel, a campo nulo, temos sempre três raízes: $m = 0$ e $m_\pm = \pm m_0(D, \tau)$, a primeira associada à fase paramagnética e as outras duas à fase ferromagnética. O sistema escolhe a fase cuja magnetização minimiza a energia livre f . Na fronteira entre as duas fases devemos ter

$$f(0, \tau, D) = f(\pm m_0, \tau, D). \quad (3.46)$$

As eqs. (3.45) e (3.46) determinam a linha de primeira ordem.

Após estas considerações estamos em condições de comentar os quatro primeiros trabalhos desta resenha.

Capítulo 4

Trabalhos em campo médio

4.1 On the Equivalence of Different Landau Expansions, *Physica A* 162 (1989) 88.

Neste trabalho mostramos, em colaboração com V. B. Henriques e S. R. Salinas, que as expansões do funcional de Landau, $g_L(T, H; y)$, em potências de y e da energia livre, $f(m, T)$, em potências de m , apesar de apresentarem diferentes coeficientes, a campo nulo, levam às mesmas predições sobre o comportamento crítico e multicrítico. As séries, no trabalho, são escritas da seguinte forma

$$f(T, m) = f_0 + f_2 m^2 + f_4 m^4 + \dots, \quad (4.1)$$

$$g_L(T, H = 0; y) = g_0 + g_2 y^2 + g_4 y^4 + \dots. \quad (4.2)$$

Obtivemos a seguinte relação entre os coeficientes das duas séries

$$g_0 = f_0, \quad (4.3)$$

$$g_2 = (1 + 2f_2)^{-1} f_2, \quad (4.4)$$

$$g_4 = (1 + 2f_2)^{-4} f_4, \quad (4.5)$$

$$g_6 = (1 + 2f_2)^{-6} [f_6 - 8(1 + 2f_2)^{-1} f_4^2]. \quad (4.6)$$

Examinando as relações acima é simples verificar que as condições para criticalidade ($f_2 = 0, f_4 > 0$) e tricriticalidade ($f_2 = f_4 = 0$ e $f_6 > 0$) implicam em ($g_2 = 0, g_4 > 0$) e ($g_2 = g_4 = 0$ e $g_6 > 0$), respectivamente. O

conjunto de coeficientes $\{f_n\}$ também pode ser escrito em termos de $\{g_n\}$. Os dois conjuntos de coeficientes são inteiramente equivalentes. A expansão de $g_L(T, 0; y)$ é usada com frequência na literatura, porém, sua equivalência com a expansão de f não havia sido mostrada. Esta equivalência não é imediata, apenas no mínimo g_L é igual à energia livre $g(T, H)$. Além disto, apenas o valor de y que minimiza a energia livre tem um significado físico—a magnetização do sistema

4.2 (I) Comment on the Mean-Field Phase Diagram of the Spin-1 Ising Model in a Random Crystal Field,

J. Phys.: Condensed Matter 1 (1989) 3687;

(II) Mean-field phase diagram of the spin-1 Ising ferromagnet in a gaussian random crystal field,

J. Phys. A: Math. Gen 23 (1990) 3383;

(III) Global mean-field phase diagram of the spin-1 Ising ferromagnet in a random crystal field,

Physica A 230 (1996) 249.

Nesta seção comentaremos três trabalhos sobre o diagrama de fases de um modelo semelhante ao de Blume-Capel, apresentado na seção 3.2, com desordem no termo de campo cristalino. O modelo é descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \sum_i \Delta_i S_i^2 - H \sum_i S_i, \quad (4.7)$$

onde a primeira soma é sobre primeiros vizinhos, $S_i = \pm 1, 0$, e os Δ_i são variáveis aleatórias independentes que obedecem à mesma distribuição de probabilidades $P(\Delta_i)$. Podemos descrever vários sistemas escolhendo $P(\Delta_i)$

convenientemente. Em particular, para

$$P(\Delta_i) = p\delta(\Delta_i - \Delta_0) + (1 - p)\delta(\Delta_i - \Delta_1) , \quad (4.8)$$

com $\Delta_0 < 0$ e $\Delta_1 > 0$, a hamiltoniana (4.7) modela a separação de fases de misturas de ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ em meios porosos. Nos três trabalhos usamos a aproximação de campo médio, na versão de Curie-Weiss, discutida em detalhe na seção . Fazemos a substituição descrita na eq. (3.4), e resolvemos o problema resultante exatamente.

O funcional de Landau é dado por

$$g(T, H, p, \{\Delta_i\}, m) = \frac{Jm^2}{2} - \frac{1}{N\beta} \sum_{i=1}^N \ln\{2e^{-\beta\Delta_i} \cosh[\beta(Jm + H)] + 1\} . \quad (4.9)$$

Note que a variável y do funcional de Landau apresentado na seção 3.1 é denotada por m . Esta notação acabou sendo consagrada pelo uso, apesar de não ser a melhor. Apenas o valor de y que minimiza o funcional de Landau é igual à magnetização.

Como neste modelo a desordem está localizada nos sítios, mais precisamente no campo cristalino, e não nas ligações, podemos utilizar no limite termodinâmico a **lei dos grandes números** e escrever a expressão (4.9) como

$$g(T, H, p, \{\Delta_i\}, m) = \frac{Jm^2}{2} - \frac{1}{N\beta} \langle \ln\{2e^{-\beta\Delta} \cosh[\beta(Jm + H)] + 1\} \rangle , \quad (4.10)$$

onde

$$\langle f(\Delta) \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta f(\Delta) P(\Delta) \quad (4.11)$$

é a média em relação à distribuição $P(\Delta)$.

Nos dois primeiros trabalhos examinamos o efeito da distribuição $P(\Delta_i)$ no diagrama de fases, trabalhando sempre com $H = 0$. No trabalho do apêndice 2 estudamos a distribuição de probabilidade

$$P(\Delta_i) = p\delta(\Delta_i - \Delta) + (1 - p)\delta(\Delta_i) , \quad (4.12)$$

enquanto no trabalho do apêndice 3 consideramos uma distribuição de probabilidade gaussiana:

$$P(\Delta_i) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}\sigma_0} \exp\left(-\frac{(D_i - D)^2}{2\sigma_0^2}\right) . \quad (4.13)$$

A adição de desordem no campo cristalino altera de maneira consideravelmente o diagrama de fases do modelo. Aparecem basicamente três tipos de diagramas, independentemente de usarmos a distribuição gaussiana (eq. (4.9)) ou a soma de deltas (eq. (4.10)). Para exemplificar consideremos os diagramas correspondentes à distribuição (4.9).

(a) Tipo 1, para $p < 8/9$, apresenta uma única linha de segunda ordem que se estende para valores arbitrariamente grandes de Δ , e uma linha de primeira ordem que termina em um ponto crítico. As linhas de primeira e de segunda ordem não se interceptam.

(b) Tipo 2, para $8/9 \leq p < 0.926$, tem uma semelhança com o diagrama do modelo de Blume-Capel, mas a linha de primeira ordem não encontra a de segunda em um ponto tricrítico. Ela penetra na fase ferromagnética e termina em um ponto crítico. A linha de segunda ordem encontra a de primeira em um ponto crítico terminal. A grande diferença reside na presença de uma segunda linha de segunda ordem que começa na de primeira ordem em um ponto crítico terminal e se estende para valores arbitrariamente grandes de Δ .

(c) Tipo 3, para $0.926 \leq p < 1$, é muito semelhante ao modelo de Blume-Capel, apresentando também um ponto tricrítico. Porém, este modelo apresenta também uma linha de segunda ordem adicional que se estende para valores arbitrariamente altos de Δ , como no tipo 2.

Para $p = 1$ recuperamos o modelo de Blume-Capel.

Em todos os três tipos de diagramas, exceto para $p = 1$, temos duas fases ferromagnéticas. É natural perguntar se todos estes novas características do diagrama de fases não são devidas à aproximação de campo médio. De fato, usando uma abordagem de campo efetivo correlacionado, mais preciso do que o campo médio, Kaneyoshi e Mielnicki [28] mostraram que a linha de segunda só se estende para o infinito para $p < p^* < 1$. Apenas no caso $p = 1$ (modelo de Blume-Capel) não obtivemos a linha de segunda ordem se estendendo para valores arbitrariamente grandes de Δ . Este caso ilustra bem as limitações da aproximação de campo médio.

Finalmente, no terceiro trabalho analisamos o efeito da desordem do campo cristalino nas "asas" de primeira ordem que aparecem no diagrama de fases no espaço $\Delta \times T \times H$. Surpreendentemente, o efeito da desordem é mínimo. As "asas" interceptam o plano $\Delta \times T$ na linha de primeira ordem contida neste plano, exatamente como no diagrama de fases do Blume-Capel usual. à medida que a concentração p muda, as asas se curvam cada vez mais até que atingem a curvatura máxima para $p = 1$. Qualitativamente, porém,

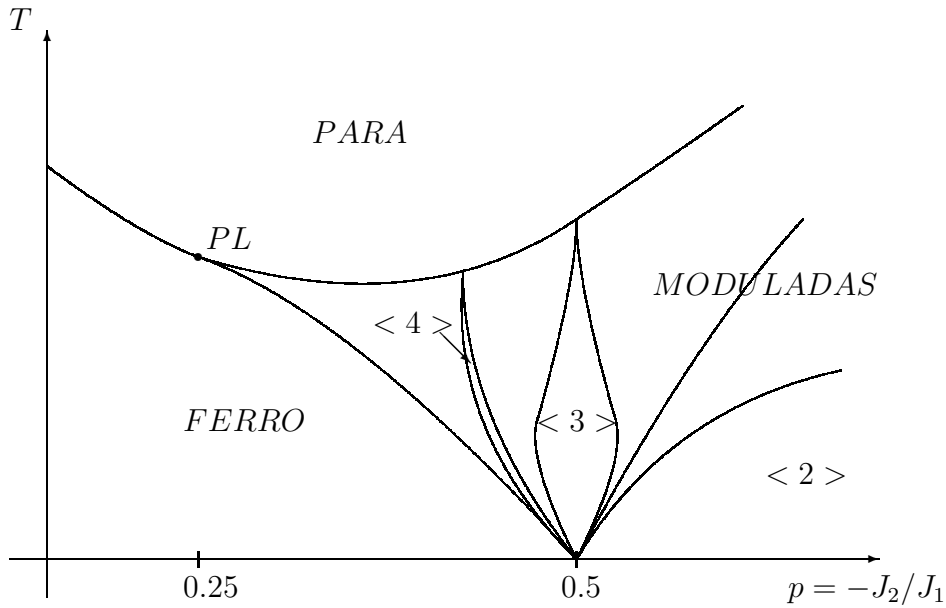


Figura 4.1: Esboço do diagrama de fases do modelo ANNNI. O ponto de Lifshitz é denotado por PL

os diagramas são semelhantes, quase não dependendo de p . Veja as figs. 1 e 2 no apêndice 4.

4.3 Spin-glass nature of the chaotic phase of a system with competing interactions, *Phys. Rev. A* 43 (1990) 5691.

O modelo ANNNI¹ é um dos modelos mais simples que exibem o ponto de Lifshitz (PL). Ele consiste de um modelo de Ising, com spin-1/2, em uma rede cúbica simples com interações ferromagnéticas (com intensidade $J_1 > 0$) entre primeiros vizinhos e interações antiferromagnéticas (com intensidade $J_2 < 0$) entre segundos vizinhos ao longo de uma das direções da rede, por exemplo na direção z . O estado fundamental deste modelo é ferromagnético, com todos os spins apontando na mesma direção, se $J_1 > 2J_2$, mas apresenta a configuração $++--++-- \equiv < 2 >$ se $J_1 < 2J_2$. Cada sinal $+$ representa uma camada (um plano) onde todos os spins apontam na direção positiva do eixo z e cada sinal $-$ uma camada onde todos os spins apontam na direção

¹A sigla ANNNI vem de *axial next-nearest-neighbor Ising*

contrária. Como o sistema não pode passar da fase ferromagnética para a fase $\langle 2 \rangle$ continuamente, esperamos que em $T = 0$ o sistema passe por uma transição de fase de primeira ordem em $p = -J_2/J_1 = 1/2$. À medida em que a temperatura aumenta ocorrem transições entre outras fases. Cada uma destas fases, denominadas moduladas, apresenta uma magnetização por camada $m(z)$ que tem uma variação praticamente senoidal, sendo bem descrita pelo harmônico principal de sua transformada de Fourier, com um vetor de onda \mathbf{k} . No caso da fase $\langle 2 \rangle$, $\mathbf{k} = (0, 0, \pi/2)$, ou simplesmente $k = \pi/2$ (nesta notação escrevemos apenas a componente z). Para outras fases mais complicadas podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle 3 \rangle &\equiv + + + - - - , \quad k = \frac{2\pi}{6} = \frac{\pi}{3} , \\ \langle 2, 3 \rangle &\equiv + + - - - + + + - - , \quad k = \frac{2\pi}{10} \times 2 = \frac{2\pi}{5} , \\ \langle 2^2, 3 \rangle &\equiv + + - - - - - + + + - - + + - - - , \quad k = \frac{2\pi}{14} \times 3 = \frac{3\pi}{7} . \end{aligned}$$

No plano T - p ($p = -J_2/J_1$) podemos esquematizar o diagrama de fases do modelo ANNNI como na fig. 4.1. A linha $T_1(p)$ que separa as fase ferromagnética das fases moduladas é de primeira ordem, as linhas $T_0(p)$ e $T_\lambda(p)$ são de segunda ordem. A linha de primeira ordem encontra as duas linhas de segunda ordem tangencialmente no ponto de Lifshitz (PL). Se nos deslocarmos ao longo da linha $T_\lambda(p)$ em direção ao PL a componente z do vetor de onda varia como $k \sim (T_L - T)^{\beta_k}$ para $T \rightarrow T_L^-$, definindo um novo expoente crítico β_k .

A determinação do diagrama de fases do modelo ANNNI é extremamente trabalhosa, mesmo na aproximação de campo médio. C. S. O. Yokoi, M. J. de Oliveira e S. R. Salinas (Phys. Rev. Lett. **54** (1985) 163), mostraram que é mais conveniente estudar o modelo em uma árvore de Cayley de coordenação infinita. Um exemplo de árvore de Cayley de coordenação $z = 3$ e com três gerações é mostrada na figura 4.2. Este tipo de rede se caracteriza pela simetria radial e pela ausência de ciclos fechados. Devido a esta última propriedade é possível escrever relações de recorrência exatas entre a magnetização x_r da geração r e a magnetização da geração $r + 1$. Para $z \rightarrow \infty$ (limite de coordenação infinita), $J_1 \rightarrow 0$ e $J_2 \rightarrow 0$, mantendo zJ_1 e z^2J_2 constantes, obtêm-se apenas duas equações acopladas para a magnetização.

$$\begin{aligned} x_{r+1} &= \tanh(1/T)(x_r - py_r + H) , \\ y_{r+1} &= x_r , \end{aligned} \tag{4.14}$$

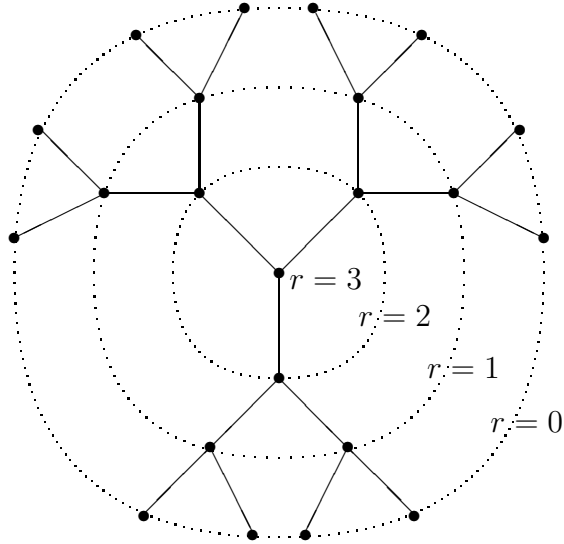


Figura 4.2: Exemplo de uma árvore de Cayley com coordenação $z = 3$. A letra r denota a geração.

onde T é a temperatura medida em unidades de zJ_1/k , e $p = -z^2 J_2/zJ_1$. Yokoi, Oliveira e Salinas descobriram que além das fases paramagnética, ferromagnética e moduladas, existe no plano p - T uma fase caótica caracterizada pelo fato de que iterações a partir de um ponto inicial $x_0 = y_0 = 1$, por exemplo, fluem para um atrator estranho de natureza fractal. A fase caótica ocupa uma faixa estreita próxima da fronteira entre as fases ferromagnética e moduladas. Nesta fase os spins se dispõem de maneira caótica ao longo da direção radial da árvore de Cayley.

Em colaboração com Walter F. Wreszinski do Depto. de Física Matemática do IFUSP mostramos que existe um parâmetro de ordem robusto, do tipo do de Edwards-Anderson, em termos do qual a transição da fase ferromagnética para a fase caótica é de primeira ordem. Este parâmetro é definido da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 E_{x_0} &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\
 &\equiv \int \int dx dy x^2 \rho_{\mathbf{x}_0}(x, y) - \left[\int \int dx dy x \rho_{\mathbf{x}_0}(x, y) \right]^2, \quad (4.15)
 \end{aligned}$$

onde $\rho_{\mathbf{x}_0}(x, y)$ é a densidade de probabilidade invariante sobre o atrator. Esta densidade é construída primeiro dividindo-se o quadrado $Q = [-1, 1] \times [-1, 1]$, que contém o atrator, em pequenas caixas. Em seguida, utiliza-se uma trajetória longa que começa no ponto $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0)$. A densidade ρ no ponto $\mathbf{x} = (x, y)$ é dada por

$$\rho_{\mathbf{x}_0}(\mathbf{x}) = n \frac{M}{N}, \quad (4.16)$$

onde n é o número total de caixas, N é o número total de pontos da trajetória, e M é o número de pontos da trajetória que pertencem à caixa que contém o ponto \mathbf{x} .

Testamos também um outro parâmetro proposto por Bray e Moore [29]:

$$V = \frac{\int \int dx dy \rho^{(1)}(x, y) \rho^{(2)}(x, y)}{[\int \int dx dy [\rho^{(1)}(x, y)]^2]^{1/2} [\int \int dx dy [\rho^{(2)}(x, y)]^2]^{1/2}}, \quad (4.17)$$

onde $\rho^{(1)}$ e $\rho^{(2)}$ correspondem às densidades calculadas em valores diferentes mas próximos de p . O parâmetro V mede o *overlap* das duas distribuições. Porém, neste segundo caso, devido a problemas numéricos, os resultados não foram conclusivos.

Capítulo 5

Teoria de Campos

5.1 Relação entre o modelo de Ising e a teoria

ϕ^4

Na seção anterior apresentamos a teoria de campo médio e apontamos suas limitações. A origem dos problemas está no fato do campo médio não levar em conta as flutuações no parâmetro de ordem. De fato, após permitirmos que os spins da rede interajam com todos os outros spins com a mesma intensidade obtemos uma teoria com um parâmetro de ordem uniforme que não apresenta flutuações. Por outro lado, sabemos das experiências de espalhamento de luz e de nêutrons que flutuações se constituem em uma característica essencial dos fenômenos críticos. Podemos corrigir o problema tratando o termo de interação entre os spins de uma maneira mais cuidadosa.

Por comodidade vamos reescrever a função de partição do modelo de Ising da seguinte forma

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left\{ \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right\} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left\{ \sum_{\langle i,j \rangle} K_{ij} \sigma_i \sigma_j \right\}, \quad (5.1)$$

onde por simplicidade colocamos o campo magnético igual a zero e a matriz K_{ij} é definida como

$$K_{ij} = \begin{cases} \beta J & \text{se } i \text{ e } j \text{ forem primeiros vizinhos,} \\ 0 & \text{nos outros casos.} \end{cases} \quad (5.2)$$

Podemos agora usar a identidade abaixo, válida para qualquer matriz simétrica,

$$\exp\left(1/2 \sum_{ij} \sigma_i K_{ij} \sigma_j\right) = \prod_{l=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_l}{(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-1/2 \sum_{i=1}^N x_i^2 - \sum_{i,j=1}^N x_i K_{ij}^{1/2} \sigma_j\right), \quad (5.3)$$

onde $\sum_j K_{ij}^{1/2} K_{jk}^{1/2} = K_{ik}$. Com a eq. (5.3) podemos reescrever a (5.2) do seguinte modo

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{l=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_l}{(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-1/2 \sum_i x_i^2 - \sum_{i,j} x_i K_{ij}^{1/2} \sigma_j\right). \quad (5.4)$$

Note que agora a dependência na variável de spin σ_i é linear e podemos efetuar a soma sobre as configurações de spin exatamente como fizemos na eq. (2.10) na seção 4 sobre campo médio. Com isto obtemos o resultado

$$Z = \prod_{l=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_l}{(2\pi)^{1/2}} \exp\left\{-1/2 \sum_i x_i^2 + \sum_i \ln \left[2 \cosh\left(\sum_j x_j K_{ji}^{1/2}\right)\right]\right\}. \quad (5.5)$$

A expressão acima é exata. Porém, é analiticamente intratável. Para o estudo do modelo de Ising próximo do ponto crítico podemos fazer algumas aproximações. A primeira delas consiste em expandir o termo $\ln \cosh(\sum_j x_j K_{ji}^{1/2})$ em potências de x_i até termos de ordem x_i^4 , no caso do modelo de Ising. As potências de ordem mais altas são irrelevantes para o comportamento crítico do modelo de Ising próximo da dimensão crítica superior ($d_u = 4$). Apresentaremos uma justificativa para desprezar estas potências mais altas quando tratarmos a renormalização do modelo. Supondo que a expansão pode ser feita e lembrando que

$$\ln \cosh(y) \approx \frac{y^2}{2} - \frac{y^4}{12} + \text{termos de ordem } y^6, \quad (5.6)$$

obtemos facilmente a seguinte expressão para a função de partição

$$Z = \prod_{l=1}^N \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx_l}{(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_i x_i (\delta_{ij} - K_{ij}) x_j - \frac{1}{12} \sum_{ijklm} x_j K_{ji}^{1/2} x_k K_{ki}^{1/2} x_l K_{li}^{1/2} x_m K_{mi}^{1/2}\right). \quad (5.7)$$

Introduzimos agora a transformada de Fourier discreta

$$\begin{aligned}
x_i &= \frac{1}{N} \sum_k e^{-ik \cdot r_i} X_k , \\
X_k &= \sum_{r_i} e^{ik \cdot r_i} x_i , \\
\delta_{k,k'} &= \frac{1}{N} \sum_{r_i} e^{-i(k-k') \cdot r_i} ,
\end{aligned} \tag{5.8}$$

onde a componente α do vetor k é dada por $k_\alpha = 2\pi n_\alpha/L$ e L é o número de pontos em cada uma das direções da rede hipercúbica, de modo que $L^d = N$. No espaço de momentos

$$\begin{aligned}
Z &\propto \prod_k \int_{-\infty}^{\infty} dX_k \exp \left(-\frac{1}{2N} \sum_k X_{-k} (1 - K(k)) X_k \right. \\
&\quad - \frac{1}{12N^3} \sum_{k_1 k_2 k_3} X_{k_1} K^{1/2}(-k_1) X_{k_2} K^{1/2}(-k_2) X_{k_3} K^{1/2}(-k_3) \\
&\quad \left. \times X_{-k_1-k_2-k_3} K^{1/2}(-k_1 - k_2 - k_3) \right)
\end{aligned} \tag{5.9}$$

e $K(k)$ é a transformada de Fourier de $K_{ij} = K(r_i - r_j)$. Denotando por a o espaçamento da rede e lembrando da definição (5.2) de K_{ij} obtemos

$$K(k) = 2\beta (J \cos(k_1 a) + J \cos(k_2 a) + \dots + J \cos(k_d a)) . \tag{5.10}$$

No espaço de momentos K é diagonal, assim $K^{1/2}(k) = (K(k))^{1/2}$. Próximo da transição entre as fases ferro e paramagnética, podemos expandir K e $K^{1/2}$ em torno do vetor de onda principal, $k = 0$. Substituindo as expansões

$$\begin{aligned}
K(k) &\approx \beta J (2d + k_1^2 + k_2^2 + \dots + k_d^2) = \beta J (2d + k^2) , \\
K^{1/2}(k) &\approx K^{1/2}(0) \equiv K_0^{1/2} ,
\end{aligned} \tag{5.11}$$

na eq. (5.9) chegamos a

$$\begin{aligned}
Z &\propto \prod_k \int_{-\infty}^{\infty} dX_k \exp \left(-\frac{1}{2N} \sum_k X_{-k} (1 - 2d\beta J - \beta J k^2 a^2) X_k \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{12N^3} (K_0^{1/2})^4 \sum_{k_1 k_2 k_3} X_{k_1} X_{k_2} X_{k_3} X_{-k_1-k_2-k_3} \right) .
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Note que para $T = 2dJ \equiv T_0$ o coeficiente do termo quadrático em $X_{k=0}$ se anula e as flutuações nesta componente de Fourier podem se tornar arbitrariamente grandes. Em outras palavras ela se torna instável. A temperatura crítica de campo médio é T_0 . Expandindo em torno de T_0 obtemos

$$\begin{aligned} 1 - 2d\beta J &\approx \frac{T - T_0}{T_0}, \\ \beta J &\approx \frac{1}{2d}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Lembrando que a é o espaçamento da rede, podemos escrever o volume do sistema como $Na^d = V$. Além disto, definindo

$$\begin{aligned} X_k &\equiv \frac{(2d)^{1/2}}{a^{d/2+1}} \phi_k, \\ \frac{(K_0^{1/2})^4}{12N^3 a^{2d+4}} &\equiv \frac{1}{V^3} \frac{\lambda}{4!}, \\ \frac{2dT - T_0}{a^2 T_0} &\equiv \mu^2, \end{aligned} \quad (5.14)$$

a equação (5.12) assume a forma

$$\begin{aligned} Z \propto \prod_k \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_k \exp \left(-\frac{1}{2N} \sum_k \phi_{-k} (\mu^2 + k^2) \phi_k \right. \\ \left. - \frac{\lambda}{4!V^3} \sum_{k_1 k_2 k_3} \phi_{k_1} \phi_{k_2} \phi_{k_3} \phi_{-k_1 - k_2 - k_3} \right). \end{aligned} \quad (5.15)$$

No limite do contínuo

$$\frac{1}{V} \sum_k \rightarrow \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}, \quad \prod_k \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_k \rightarrow \int D\phi \quad (5.16)$$

e chegamos ao resultado bastante conhecido da função de partição da teoria ϕ^4 expressa em termos de integrais de trajetória:

$$\begin{aligned} Z = \mathcal{N} \int D\phi \exp \left[-\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{2} \phi(-k) (\mu^2 + k^2) \phi(k) \right. \\ \left. - \frac{\lambda}{4!} \int \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \frac{d^d k_2}{(2\pi)^d} \frac{d^d k_3}{(2\pi)^d} \phi(k_1) \phi(k_2) \phi(k_3) \phi(-k_1 - k_2 - k_3) \right], \end{aligned} \quad (5.17)$$

onde \mathcal{N} é uma constante.

Conforme mostramos, várias aproximações foram feitas para, partindo do modelo de Ising, chegarmos à teoria ϕ^4 . Recordando: expandimos a expressão função de partição exata até $\mathcal{O}(x^4)$ desprezando potências mais altas (na linguagem do grupo de renormalização desprezamos **operadores** de ordem maior do que 4); em seguida, expandimos em torno de $k = 0$. Fica claro que após todas estas expansões perdemos contato com a teoria microscópica original. Esperamos, porém, que quantidades universais como os expoentes críticos e as razões de amplitudes críticas, que independem dos detalhes microscópicos do sistema não sejam afetados.

5.2 Expansão perturbativa e regras de Feynman

Não se consegue calcular exatamente a função de partição da teoria ϕ^4 . Neste capítulo apresentaremos a abordagem perturbativa de teoria de campos que consiste em expandir o termo quártico em potências de λ . Com isto as integrais resultantes são todas gaussianas e podem em princípio ser calculadas. O problema é que, exceto em ordem mais baixa, os termos desta expansão divergem. Antes de mostrar como podemos dar sentido a estes termos divergentes, precisamos obtê-los.

A maneira mais didática de apresentar a expansão perturbativa é através do formalismo de integrais de trajetória. Esta abordagem tem um enorme valor heurístico, as regras de Feynman são derivadas de uma forma bastante natural e decorrem diretamente das propriedades das derivadas funcionais. Em particular, em teorias de gauge, a derivação do termo de Fadeev-Popov e a razão porque ele deve ser incluído na Lagrangiana tornam-se muito claras. Entretanto, a dedução é um pouco longa e portanto inadequada para esta resenha. Ao invés disto adotaremos o ponto de vista de 't Hooft e Veltman, apresentada de maneira muito elegante no DIAGRAMMAR. Nesta abordagem, são postuladas certas prescrições para a obtenção das regras de Feynman diretamente da Lagrangiana. É importante enfatizar que a abordagem diagramática é completamente equivalente à abordagem através de integrais de trajetória no que se refere à expansão perturbativa. Além disto, é através de diagramas que trabalhamos em teoria perturbativa de campos. Eles são os objetos fundamentais da teoria.

Para uma hamiltoniana com um termo de interação do tipo ϕ^r , dada no espaço de momentos pela expressão

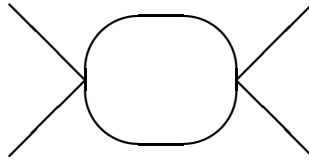
$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{2} \phi(-k) v(q) \phi(k) \\ &+ \frac{\lambda_r}{r!} \int \frac{d^d k_1}{(2\pi)^d} \dots \int \frac{d^d k_{r-1}}{(2\pi)^d} \phi(k_1) \dots \phi(k_{r-1}) \phi(-k_1 - \dots - k_{r-1}), \\ v(q) &= \mu^2 + k^2, \end{aligned} \quad (5.18)$$

os diagramas são construídos a partir de dois elementos básicos: propagadores e vértices, associados a $v(q)$ e ao termo de interação, ϕ^r , respectivamente.

Em cada vértice, representado por um ponto do qual saem r linhas, há conservação de momento. O propagador livre, representado por uma linha, é igual ao inverso da função $v(q)$ na eq. (5.18):

$$G(q) = (v(q))^{-1} = \frac{1}{\mu^2 + k^2}. \quad (5.19)$$

A cada termo da expansão perturbativa corresponde um diagrama feito apenas com estes dois elementos: vértices e propagadores. Na teoria ϕ^4 temos apenas um vértice de quatro pernas: \times , e o propagador livre: $—$. Por exemplo, na expansão da função de Green conexa de 4 pontos, $G_c^{(4)}$, em ordem λ^2 temos o diagrama

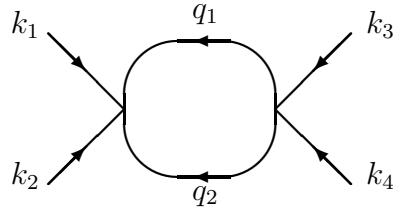


onde aparecem dois vértices e seis propagadores.

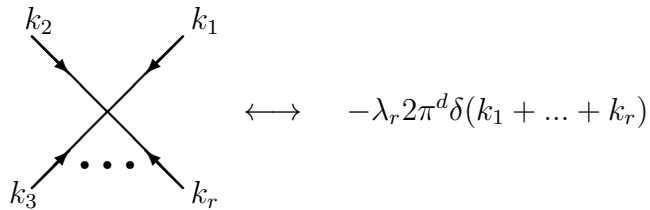
Para obter a expressão analítica associada a este diagrama, utilizamos as **regras de Feynman**, apresentadas a seguir.

Regras de Feynman no espaço dos momentos

1. Atribuímos a cada linha do diagrama uma letra que denotará o momento que flui por ela. A direção do fluxo também deve ser indicada (esta direção para campos escalares reais é arbitrária). No exemplo de $G_c^{(4)}$, discutido acima, podemos atribuir os seguintes momentos:



2. Há um fator $-\lambda_r(2\pi)^d\delta(k_1 + \dots + k_r)$ associado a cada vértice. Se o momento entra no vértice ele tem um sinal positivo, se sai, negativo.

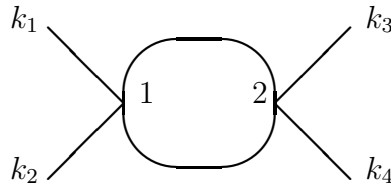


3. Há um fator $G(q) = (\mu^2 + q^2)^{-1}$ para cada linha, onde q é o momento que flui pela linha.

$$\text{---} \xrightarrow{q} \text{---} \longleftrightarrow 1/(\mu^2 + q^2)$$

4. Integramos sobre os momentos das linhas internas.
5. Existe um fator combinatório, calculado como indicado abaixo

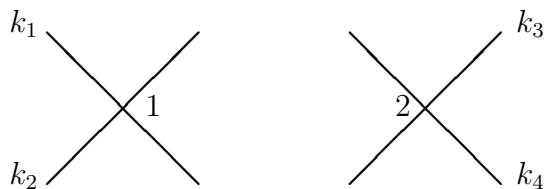
- Escreva os momentos externos e numere os vértices. No nosso exemplo temos



- Desmembre o gráfico em seus vértices constituintes.



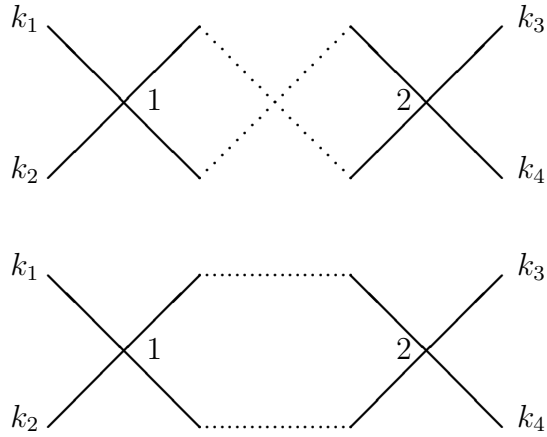
- Determine o número de modos equivalentes de colocar os momentos externos e de numerar os vértices.



$$2 \times 4 \times 3 \times 4 \times 3$$

Há 2 maneiras distintas de se numerar os vértices. Uma vez numerados os vértices, os momentos k_1 e k_2 devem ser colocados no vértice 1, e os momentos k_3 e k_4 no vértice 2. Há 4 pernas onde podemos colocar k_1 no vértice 1. Uma vez colocado k_1 restam 3 pernas para o momento k_2 . Um raciocínio análogo se aplica aos momentos k_3 e k_4 .

- Selecione dois vértices quaisquer e veja de quantas maneiras equivalentes podemos juntar suas linhas para montar a parte do gráfico ao qual pertencem.



$$2 \times 4 \times 3 \times 4 \times 3 \times 2$$

Há duas maneiras equivalentes de unir as duas linhas internas dos vértices 1 e 2, indicados na figura acima.

- Divida o resultado por $(r!)^{v_r} v_r!$, onde v_r é o número de vértices do tipo ϕ^r do diagrama. No exemplo acima, $r = 4$ e $v_4 = 2$. Portanto, o fator combinatório, C , é dado pela expressão

$$C = \frac{2 \times 4 \times 3 \times 4 \times 3 \times 2}{(4!)^2 2!} = \frac{1}{2}$$

Para o diagrama considerado, as regras de Feynman associam a seguinte expressão

$$G^{(4)}(k_1, k_2, k_3, k_4) = \frac{\lambda^2}{2} G(k_1) G(k_2) G(k_3) G(k_4) (2\pi)^{2d} \times \int_{q_1} \int_{q_2} \delta(k_1 + k_2 + q_1 + q_2) \delta(k_3 + k_4 - q_1 - q_2) G(q_1) G(q_2), \quad (5.20)$$

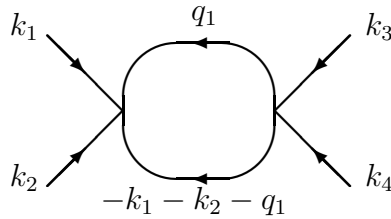
onde

$$\int_q \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^d q}{(2\pi)^d}. \quad (5.21)$$

A integral sobre um dos momentos internos pode ser feita de forma trivial, graças à função δ .

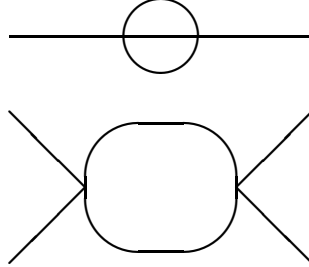
$$G^{(4)}(k_1, k_2, k_3, k_4) = \frac{\lambda^2}{2} G(k_1)G(k_2)G(k_3)G(k_4) \times (2\pi)^d \delta(k_1 + k_2 + k_3 + k_4) \int_{q_1} G(q_1)G(k_1 + k_2 + q_1) . \quad (5.22)$$

Na dedução acima usamos a propriedade $G(-q) = G(q)$. Note que, após efetuarmos as integrais, sobra uma função δ que garante a conservação de momento do diagrama como um todo. Isto acontece para todos os diagramas. Após usarmos todas as funções δ , resta em cada **loop** (circuito fechado do diagrama) um único momento de integração. Tendo este fato em mente, o trabalho pode ser simplificado consideravelmente. Podemos colocar



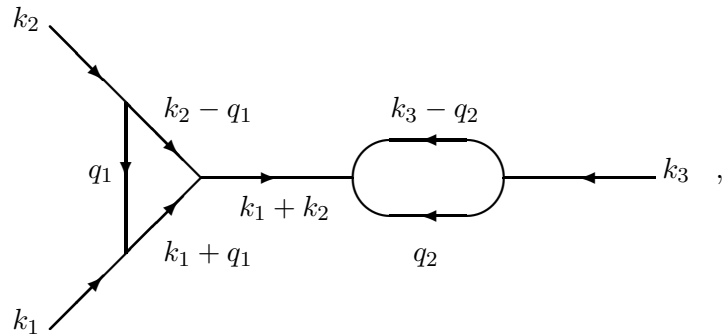
e escrever a expressão (5.22) diretamente. Observe que a dependência do diagrama nos propagadores das linhas externas é trivial—resume-se a fatores multiplicativos.

O número de diagramas aumenta rapidamente com a ordem de perturbação. Porém, nem todos os diagramas que aparecem trazem novas propriedades. Por exemplo, um diagrama que contribui para $G^{(6)}$ em $\mathcal{O}(\lambda^4)$, mostrado na figura abaixo



é o produto de um diagrama que contribui em $\mathcal{O}(\lambda^2)$ para $G^{(2)}$ por um diagrama que contribui em $\mathcal{O}(\lambda^2)$ para $G^{(4)}$. Gráficos deste tipo são chamados **diagramas desconexos**. Para calculá-los basta conhecer os **diagramas conexos** que os compõem. Um diagrama conexo de N pernas é denotado por $G_c^{(N)}(k_1, \dots, k_N)$.

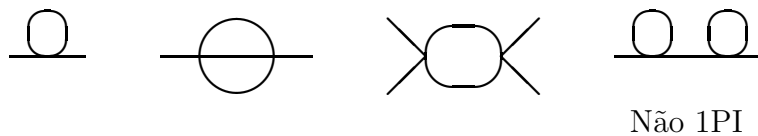
Porém, os diagramas conexos não são os mais básicos da teoria. Considere, por exemplo, o gráfico



proveniente de uma teoria com interação $\lambda\phi^3$. Omitindo os fatores λ dos vértices, o fator combinatório, e a função δ que garante a conservação de momento, associamos a este diagrama a seguinte expressão:

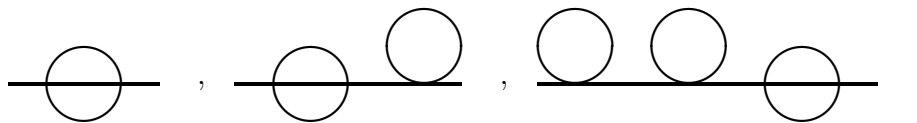
$$\begin{aligned}
 & G(k_1)G(k_2) \left[\int_{q_1} G(q_1)G(k_1 + q_1)G(k_2 - q_1) \right] \\
 & \times G(k_1 + k_2) \left[\int_{q_2} G(q_2)G(k_3 - q_2) \right] G(k_3) , \quad (5.23)
 \end{aligned}$$

onde, $k_1 + k_2 + k_3 = 0$. Para calcular o diagrama basta conhecer o propagador livre, $G(k)$, e as expressões entre colchetes que representam os diagramas de 3 pernas (triângulo), e o de 2 pernas (oval), sem os propagadores $G(k)$ nas linhas externas. Note que, devido à conservação de momento, pela linha que conecta as duas partes não triviais do diagrama, associada a $G(k_1 + k_2)$, só fluem momentos externos, não havendo nenhum momento de integração. Qualquer diagrama que seja composto de duas partes ligadas por uma única linha vai poder ser decomposto de uma maneira análoga. Portanto, os diagramas básicos, através dos quais podemos gerar toda a expansão perturbativa, são aqueles que não podem ser separados em dois diagramas desconexos eliminando-se uma linha interna. Estes diagramas são chamados **1PI (one particle irreducible)**. Alguns exemplos são mostrados a seguir

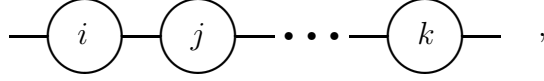


Por definição, removemos os propagadores das pernas externas dos diagramas 1PI e multiplicamos a expressão final, obtida através das regras de Feynman, por -1 . Os diagramas 1PI com N pernas assim obtidos são denotados por $\Gamma^{(N)}(k_1, k_2, \dots, k_N)$.

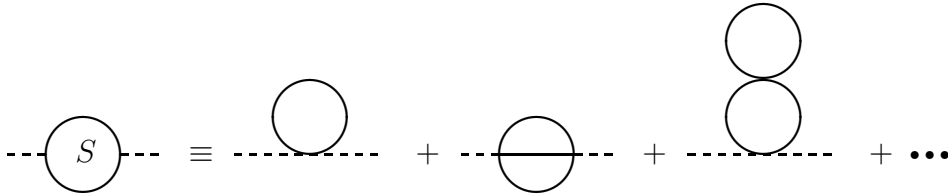
Para terminar esta seção, vamos estabelecer a relação entre $\Gamma^{(2)}$ e $G_c^{(2)}$. Gráficos que contribuem para $G_c^{(2)}$, na teoria ϕ^4 são mostrados abaixo.



Observe que o segundo e o terceiro diagramas podem ser escritos como produtos de diagramas 1PI ligados por propagadores livres. A estrutura mais geral de um diagrama de $G_c^{(2)}$ é a seguinte:



onde cada círculo representa um único diagrama 1PI e as linhas são propagadores livres. O primeiro diagrama é de ordem λ^i , o segundo de ordem λ^j , e assim por diante. Se denotarmos por um círculo com um S , a soma de todos os diagramas 1PI com duas pernas dos quais removemos os propagadores das pernas externas,



então podemos escrever uma expansão gráfica para $G_c^{(2)}$:

$$\begin{aligned}
 G_c^{(2)} &= \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \dots \\
 &= \text{---} \left[1 + \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \dots \right] \\
 &= \text{---} \left[1 - \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \right]^{-1} = \left[(\text{---})^{-1} - \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \right]^{-1}
 \end{aligned}$$

A última expressão entre colchetes é por definição $\Gamma^{(2)}$. Em outras palavras,

$$\Gamma^{(2)}(k) = [G_c^{(2)}(k)]^{-1}. \tag{5.24}$$

Em particular, usando o teorema de flutuação-dissipação demonstrado na seção , podemos expressar o inverso da suscetibilidade em termos de $\Gamma^{(2)}$,

$$\chi^{-1} = \Gamma^{(2)}(0) . \quad (5.25)$$

A demonstração que acabamos de apresentar ilustra bem como podemos trabalhar com diagramas usando apenas sua estrutura topológica, sem utilizar as expressões analíticas a eles associadas. Obviamente, as operações que efetuamos acima só fazem sentido se os termos da série estiverem bem definidos. Se trabalharmos de uma maneira ingênua isto não ocorre. Todos os diagramas com pelo menos um loop são divergentes. Vamos mostrar como dar um sentido a estes diagramas na próxima seção.

5.3 Regularização e Renormalização

Começemos analisando a correção de ordem mais baixa para a função $\Gamma^{(2)}(k)$. Até ordem λ podemos escrever

$$\Gamma^{(2)}(k) = (\text{---})^{-1} - \text{---} \circ \text{---} .$$

A expressão analítica associada aos diagramas acima é dada por

$$\Gamma^{(2)}(k) = k^2 + \mu^2 + \frac{\lambda}{2} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \mu^2} . \quad (5.26)$$

Como a integração sobre cada uma das componentes do momento q é feita no intervalo $] - \infty, \infty[$, a integral na eq. (5.26) diverge para $d \geq 2$. Para podermos lidar com integrais deste tipo é necessário antes de mais nada **regularizar** a teoria. Em outras palavras, precisamos achar procedimentos para tornar finitas estas integrais para que possamos manipulá-las.

O procedimento mais simples que podemos adotar consiste em impor um **cutoff** nas integrais. Assim, ao invés de integrarmos sobre todo o espaço dos momentos, vamos integrar apenas sobre os momentos cujo módulo seja menor do que um certo cutoff Λ ($|\mathbf{q}| < \Lambda$).

Este procedimento parece muito arbitrário e precisamos, por esta razão, fazer alguns comentários. Na mecânica estatística, chegamos à teoria ϕ^4

partindo do modelo de Ising definido em uma rede hipercúbica com espaçamento a . Assim, temos um cutoff natural $\Lambda \sim 1/a$. Não faz sentido considerar componentes de Fourier com momento $q > 1/a$. A situação é diferente em teoria de campos, onde a teoria ϕ^4 é construída a partir de considerações de simetria, sem nenhuma menção a um modelo microscópico subjacente. Neste caso, o cutoff é completamente arbitrário. Felizmente, existe uma classe de teorias onde podemos absorver a dependência forte no cutoff em alguns parâmetros, entre eles a constante de acoplamento λ e a massa μ . Estas teorias são chamadas **renormalizáveis** e o procedimento para absorver a dependência forte no cutoff é denominado **renormalização**. Antes de renormalizar devemos regularizar a teoria para que possamos lidar com as integrais divergentes. Em seguida, eliminamos a dependência forte no cutoff através da renormalização.

A renormalização é essencial em teoria de campos, mas não na mecânica estatística que já possui um cutoff natural. Entretanto, é conveniente renormalizar também na mecânica estatística. A razão é a seguinte: estamos interessados em calcular quantidades universais, como expoentes críticos e razões de amplitudes críticas que independem dos detalhes microscópicos do sistema, entre eles o espaçamento da rede. Assim, é interessante eliminarmos quantidades irrelevantes logo de saída. Além disto, podemos importar todas as técnicas bastante poderosas desenvolvidas no contexto de teoria de campos.

É importante mencionar que existem outras maneiras de regularizar as integrais divergentes. A introdução de um cutoff, apesar de simples, é bastante inconveniente. Atualmente, prefere-se usar a **regularização dimensional**, introduzida por Bolini e Gianbiagi [31] e por 't Hooft e Veltman [32]. Vamos ilustrar o método com a integral divergente da eq. (5.26). A ideia básica consiste em notar que a integral está bem definida para $d < 2$. Nestas condições podemos calcular a integral e obtemos

$$\int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \mu^2} = \frac{\pi^{d/2} \Gamma(1 - d/2)}{(\mu^2)^{1-d/2}}, \quad (5.27)$$

onde $\Gamma(x)$ é a função gama usual. A função $\Gamma(x)$ possui polos nos inteiros negativos e em zero. Assim, o lado direito da (5.27) só não está definido para $d = 2n$, onde n é um inteiro positivo. Em contraste, o lado esquerdo diverge para $d \geq 2$. Obviamente, a igualdade entre os dois lados da equação vale apenas para $d < 2$. O que se faz em regularização dimensional é *definir* a integral divergente como sendo igual ao lado direito da eq. (5.27) para todos

os valores de d . Assim, usamos a função gama para obter uma extensão analítica das integrais de Feynman. Ao invés de absorver termos dependentes do cutoff Λ nos parâmetros da teoria absorvemos os polos da função gama.

Tanto em mecânica estatística como em teoria de campos temos interesse em calcular a teoria ϕ^4 em torno de $d = 4$,¹ um dos polos da integral que estamos considerando. Se estamos próximos de um inteiro negativo, como é o caso, usamos repetidamente a expressão

$$\Gamma(x + 1) = x\Gamma(x) , \quad (5.28)$$

até ficarmos perto de zero e em seguida utilizamos a expansão

$$\Gamma(\epsilon) \approx \frac{1}{\epsilon} - \gamma , \quad (5.29)$$

onde $|\epsilon| \ll 1$ e $\gamma = -\Gamma'(1)$ é a constante de Euler. Por exemplo, para $d = 4 - \epsilon$

$$\begin{aligned} \Gamma(1 - d/2) &= \Gamma(-2 + \epsilon) = \frac{1}{-2 + \epsilon} \frac{1}{-1 + \epsilon} \Gamma(\epsilon) \\ &\approx \frac{1}{2\epsilon} - \frac{3}{4} - \frac{\gamma}{2} . \end{aligned} \quad (5.30)$$

São os polos do tipo $1/\epsilon$, como o da eq. (5.30), que devem ser removidos pelo processo de renormalização.

Na teoria ϕ^4 , em $d = 4$, existe um número finito de diagramas 1PI divergentes, graças a este fato podemos absorver as partes divergentes destas funções redefinindo alguns parâmetros da teoria. Antes de escrever as equações que definem as funções renormalizadas precisamos fazer alguns comentários sobre o operador ϕ^2 . O calor específico pode ser calculado através da expressão

$$c_v \sim \left\langle \frac{1}{2} \int \phi^2(r) \frac{1}{2} \int \phi^2(r) \right\rangle - \left\langle \frac{1}{2} \int \phi^2(r) \right\rangle^2 . \quad (5.31)$$

Esta expressão é a função de Green conexa $G_c^{(0,2)}(p, -p, \lambda, \Lambda)$, onde o superescrito $(0, 2)$ significa que inserimos duas vezes operador ϕ^2 em um diagrama sem nenhuma perna externa. Uma vez que todos os diagramas que contribuem para $G_c^{(0,2)}$ são 1PI vale a relação $G_c^{(0,2)} = -\Gamma^{(0,2)}$. Mostramos a seguir diagramas que contribuem para $\Gamma^{(0,2)}$ e $\Gamma^{(2,1)}$. Este último é o resultado da inserção de um único operador ϕ^2 em um diagrama com duas pernas

¹Esta é a dimensão crítica superior da teoria, conforme mostraremos na seção seguinte.

externas. A linha em zigue-zague indica o ponto onde o operador ϕ^2 foi inserido.



Pode-se mostrar que os únicos diagramas divergentes na teoria ϕ^4 são $\Gamma^{(2,0)}$, $\Gamma^{(4,0)}$, $\Gamma^{(2,1)}$ e $\Gamma^{(0,2)}$.²

A teoria de renormalização garante que as funções renormalizadas, $\Gamma_R^{(N,L)}$, são finitas no limite $\Lambda \rightarrow \infty$. Elas são obtidas a partir das funções não renormalizadas através das prescrições

$$\Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, m^2, g) = Z_\phi^{\frac{N}{2}} Z_{\phi^2}^L \left[\Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \mu^2(m^2, g, \Lambda), \lambda(m^2, g, \Lambda), \Lambda) - \delta_{N,0} \delta_{L,2} \Gamma^{(0,2)}(0, 0, \mu^2, \lambda, \Lambda) \right], \quad (5.32)$$

onde m é a massa renormalizada, g é a constante de acoplamento renormalizada; $Z_\phi = Z_\phi(m^2, g, \Lambda)$ e $Z_{\phi^2} = Z_{\phi^2}(m^2, g, \Lambda)$ são constantes de renormalização. A dependência explícita de μ^2 , λ , Z_ϕ , e Z_{ϕ^2} em m^2 , g , e Λ é obtida através das seguintes **prescrições de renormalização**

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k=0, m^2, g) = m^2, \quad (5.33)$$

$$\left. \frac{\partial \Gamma_R^{(2,0)}}{\partial k^2} \right|_{k^2=0} = 1, \quad (5.34)$$

$$\Gamma_R^{(4,0)}(k_i=0, m^2, g) = g, \quad (5.35)$$

$$\Gamma_R^{(2,1)}(k_i=0, p=0, m^2, g) = 1, \quad (5.36)$$

$$\Gamma_R^{(0,2)}(p=0, m^2, g) = 0. \quad (5.37)$$

²Se quisermos estudar funções de Green com inserções de outros operadores compostos, além de ϕ^2 , como por exemplo $\phi \partial^2 \phi$, haverá outros diagramas divergentes. Para o cálculo de expoentes críticos basta considerar o operador ϕ^2 .

Para ser mais explícito, a análise dimensional fornece $[\mu^2] = [\kappa^2]$, onde κ é uma constante com dimensão de massa, $[\lambda] = [\kappa^\epsilon]$, $[Z_\phi] = [\kappa^0]$, e $[Z_{\phi^2}] = [\kappa^0]$. Portanto,

$$\mu^2(m^2, g, \Lambda) = \Lambda^2 \hat{\mu}^2 \left(\frac{m}{\Lambda}, m^\epsilon g \right), \quad (5.38)$$

$$\lambda(m^2, g, \Lambda) = \Lambda^\epsilon \hat{\lambda} \left(\frac{m}{\Lambda}, m^\epsilon g \right), \quad (5.39)$$

$$Z_\phi(m^2, g, \Lambda) = \hat{Z}_\phi \left(\frac{m}{\Lambda}, m^\epsilon g \right), \quad (5.40)$$

$$Z_{\phi^2}(m^2, g, \Lambda) = \hat{Z}_{\phi^2} \left(\frac{m}{\Lambda}, m^\epsilon g \right), \quad (5.41)$$

onde as funções adimensionais $\hat{\mu}^2$, $\hat{\lambda}$, \hat{Z}_ϕ e \hat{Z}_{ϕ^2} são expandidas em séries em $m^\epsilon g$, com coeficientes que dependem apenas de m/Λ . São estes coeficientes que determinamos através das eqs. (5.33)–(5.37) e da (5.32).

Para resumir: o fato da teoria ϕ^4 ser renormalizável garante que qualquer função 1PI, $\Gamma^{(N,L)}$, é finita no limite $\Lambda \rightarrow \infty$ após substituirmos μ^2 e λ por suas expansões em termos de m^2 e g , e a multiplicarmos por $Z_\phi^N Z_{\phi^2}^{L/2}$, como prescreve a eq. (5.32).

A formulação que apresentamos é a usual em teoria de campos. Porém, ela não é a mais conveniente para o tratamento de fenômenos críticos. Mostraremos na próxima seção que para descrever o ponto crítico precisamos trabalhar com uma teoria de massa zero. Neste caso, as prescrições de renormalização, eqs. (5.33)–(5.37), não podem ser utilizadas porque as integrais de Feynman vão divergir para pequenos momentos, apresentando as chamadas **divergências infravermelhas**.

5.4 Critério de Ginsburg-Landau e a descrição do ponto crítico

Várias pontos precisam ser discutidos antes aplicarmos a teoria ϕ^4 para descrever a criticalidade do modelo de Ising. É evidente que o formalismo de teoria de campos é bastante complexo, muito mais difícil do que a teoria de campo médio. A primeira pergunta, extremamente pertinente, é a seguinte: Em que condições vale a pena utilizar teoria de campos? A segunda, relacionada com a primeira, é: Existem circunstâncias nas quais a abordagem

de campo médio fornece uma boa descrição da criticalidade? O critério de Ginsburg-Landau responde a estas perguntas como veremos abaixo.

Antes, porém, precisamos caracterizar o ponto crítico no formalismo de teoria de campos. Uma das características essenciais da criticalidade, conforme mencionamos na seção 2.2, é a divergência da suscetibilidade a campo nulo, χ . Mostramos, veja a eq. (5.25), que existe uma relação simples entre a suscetibilidade e a função 1PI $\Gamma^{(2,0)}$,

$$\chi^{-1} = \Gamma^{(2,0)}(k = 0, \lambda, \mu^2, \Lambda) . \quad (5.42)$$

Lembremos também que neste formalismo a temperatura aparece através do termo de massa, $\mu^2 = T - T_0$, onde T_0 é a temperatura crítica de campo médio. Devido às correções introduzidas pela teoria de campos, a nova temperatura crítica, T_c , não vai em geral coincidir com T_0 . Como χ deve divergir em T_c , isto implica que $\chi^{-1} = 0$ em T_c . Portanto T_c pode ser calculada através da equação

$$\Gamma^{(2,0)}(k = 0, \lambda, \mu_c^2, \Lambda) = 0 , \quad (5.43)$$

onde $\mu_c^2 \equiv T_c - T_0$.

Usando a eq. (5.26), correta até $\mathcal{O}(\lambda)$, podemos escrever

$$\chi^{-1} = \Gamma^{(2,0)}(k = 0, \lambda, \mu^2, \Lambda) = \mu^2 + \frac{\lambda}{2} \int^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \mu^2} , \quad (5.44)$$

Note que por simplicidade estamos trabalhando na teoria regularizada com um cutoff Λ .

A temperatura crítica é obtida resolvendo-se a equação

$$\mu_c^2 + \frac{\lambda}{2} \int^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \mu_c^2} = 0 . \quad (5.45)$$

Isto pode ser feito facilmente através de teoria de perturbação. Observe que em $\mathcal{O}(\lambda^0)$,

$$\Gamma^{(2,0)}(0, \lambda, \mu^2, \Lambda) = \mu^2 = T - T_0 \quad (5.46)$$

e portanto $T_c = T_0 + \mathcal{O}(\lambda)$, ou seja $\mu_c^2 = 0 + \mathcal{O}(\lambda)$. Assim, a temperatura crítica de campo médio reaparece na teoria de campos como a aproximação em ordem mais baixa na constante de acoplamento. Graças a este fato, podemos colocar $\mu_c^2 = 0$ no denominador da integral que aparece na equação (5.46), o erro cometido é de $\mathcal{O}(\lambda^2)$, e obtemos

$$\mu_c^2 = T_c - T_0 = -\frac{\lambda}{2} \int^{\Lambda} \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2} . \quad (5.47)$$

Assim, como era de se esperar, as flutuações térmicas fazem baixar a temperatura crítica em relação à temperatura de campo médio ($T_c < T_0$). É importante frisar que este novo valor para T_c não deve ser encarado como uma estimativa da temperatura crítica do modelo de Ising. Ao mapearmos o modelo de Ising próximo da criticalidade na teoria ϕ^4 , fizemos uma série de aproximações. A temperatura crítica, ao contrário dos expoentes e das razões de amplitudes críticas, não é uma grandeza universal e depende fortemente dos detalhes microscópicos do sistema. Além disto, as correções para T_c dependem também do método de regularização empregado. Por exemplo, na regularização dimensional, em todas as ordens de perturbação $T_c = T_0$. Para entender por que isto ocorre, voltemos para a integral na eq. (5.47). A dimensão desta integral é igual a $[\kappa^{d-2}]$. Por outro lado, em regularização dimensional $\Lambda \rightarrow \infty$ e portanto a integral não possui nenhum parâmetro dimensional. Só é possível evitar contradições se esta integral for identicamente nula. Um argumento análogo vale para as correções de ordens superiores.

Queremos expressar a suscetibilidade χ em função da diferença $T - T_c \equiv \delta T$ entre a temperatura e a temperatura crítica corrigida, e não em função de $T - T_0$. Para isto reescrevo μ^2 da seguinte forma:³ da seguinte forma:

$$\mu^2 = T - T_0 = T - T_c + T_c - T_0 \equiv \delta T + \mu_c^2. \quad (5.48)$$

Substituindo a eq. (5.48) na eq. (5.44), usando a (5.47) e lembrando que $\mu_c^2 = T_c - T_0 = 0 + \mathcal{O}(\lambda)$, obtemos

$$\begin{aligned} \chi^{-1} &= \delta T - \frac{\lambda}{2} \int^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2} + \frac{\lambda}{2} \int^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2 + \delta T} \\ &= \delta T - \frac{\delta T \lambda}{2} \int^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2(q^2 + \delta T)} \end{aligned} \quad (5.49)$$

A teoria de Landau, que é equivalente ao campo médio, fornece

$$\chi \sim (T - T_c)^{-1} \iff \chi^{-1} \sim \delta T. \quad (5.50)$$

Assim, ela vai deixar de valer no momento em que as flutuações, representadas pelo termo com a integral na eq. (5.49), forem da ordem de δT . Isto é equivalente a dizer que a teoria de campo médio falha quando

$$\frac{\lambda}{2} \int^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2(q^2 + \delta T)} \approx 1 \quad (\text{Critério de Ginsburg}). \quad (5.51)$$

³Vamos examinar o caso em que $T > T_c$, ou seja, cruzaremos o ponto crítico vindo da fase paramagnética. Portanto, $\delta T > 0$.

Note que $d^d q$ é o elemento de volume de uma integral d -dimensional,

$$d^d q = (\text{parte angular}) |q|^{d-1} d|q|, \quad (5.52)$$

onde $|q|$ é o módulo de q . Como na integral (5.51) só aparece $q^2 = |q|^2$, a integração na parte angular fornece apenas uma constante finita e podemos escrever

$$\frac{\lambda}{2} \int^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{q^2(q^2 + \delta T)} = c \lambda \int_0^\Lambda d|q| \frac{|q|^{d-3}}{|q|^2 + \delta T}. \quad (5.53)$$

Para $d > 4$ a integral (5.53) é bem comportada e finita no limite $\delta T \rightarrow 0$ (Basta colocar diretamente $\delta T = 0$ na integral e verificar que isto não leva a nenhuma divergência). Se λ for pequeno a contribuição desta integral é pequena e a teoria de Landau vale até mesmo na temperatura de transição.

Por outro lado, para $d < 4$, colocar $\delta T = 0$ na integral (5.53) leva a uma divergência no extremo inferior de integração (divergência infravermelha). Para qualquer valor de λ , a teoria de Landau, neste caso, deixa de valer à medida em que nos aproximamos da transição ($\delta T \rightarrow 0$).

A dimensão $d = 4$, que separa o comportamento de campo médio do regime em que as flutuações são importantes, é chamada **dimensão crítica superior** (d_s). A dimensão abaixo da qual os spins, a campo nulo, só se ordenam quando $T = 0$, é chamada **dimensão crítica inferior** (d_i). Para o modelo de Ising a dimensão crítica inferior é igual a 2.

Agora dever ter ficado claro nosso interesse, na seção anterior, pela dimensão $d = 4$. Também é interessante observar que a teoria ϕ^4 **não** é renormalizável para $d > 4$. Assim, um mau comportamento no ultravioleta implica em um bom comportamento no infravermelho e vice-versa. A razão intuitiva deste fato é a seguinte: uma integral que diverge no ultravioleta (para grandes momentos) tem muitas potências de momento no seu numerador e por esta razão não vai apresentar singularidades para pequenos momentos.

Como mostraremos na próxima seção, os expoentes críticos são calculados através de uma dupla expansão, na constante de acoplamento e na variável $\epsilon = d_s - d$, onde d_s é a dimensão crítica superior.

5.5 As equações do grupo de renormalização e a expansão em torno de T_c

A teoria ϕ^4 crítica, isto é, na temperatura crítica T_c , é uma teoria de massa zero. Lembremos que o termo de massa é dado por $\mu^2 = T - T_0$. Na

temperatura crítica, T_c , determinada através da eq. (5.43), a massa se torna igual a $\mu_c^2 = T_c - T_0$. Mostramos na seção anterior que usando regularização dimensional as correções para o valor de campo médio da temperatura crítica se anulam. Como $T_c = T_0$, $\mu_c^2 = 0$ em todas as ordens de perturbação. ⁴

O expoente crítico η é calculado precisamente em $T = T_c$. Assim, precisamos saber lidar com teorias de massa zero. O problema de teorias sem termo de massa é a divergência das funções de Green para pequenos momentos. Além das divergências ultravioletas aparecem divergências infravermelhas. Para evitá-las devemos modificar as condições de renormalização dadas nas eqs. (5.33)–(5.37). Para evitar as divergências infravermelhas não podemos, exceto na eq. (5.33) que não possui divergências infravermelhas em $d = 4$, tomar os momentos externos iguais a zero. Usaremos as prescrições abaixo.

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k=0, g) = 0, \quad (5.54)$$

$$\left. \frac{\partial \Gamma_R^{(2,0)}(k, g)}{\partial k^2} \right|_{k^2=\kappa^2} = 1, \quad (5.55)$$

$$\Gamma_R^{(4,0)}(k_i, g) \Big|_{SP} = g, \quad (5.56)$$

$$\Gamma_R^{(2,1)}(k_i, p=0, g) \Big|_{\overline{SP}} = 1, \quad (5.57)$$

$$\Gamma_R^{(0,2)}(p, g) \Big|_{p^2=\kappa^2} = 0, \quad (5.58)$$

onde SP denota um conjunto de quatro momentos tais que

$$SP: \quad k_i \cdot k_j = \frac{\kappa^2}{4}(4\delta_{ij} - 1), \quad (5.59)$$

e \overline{SP} , onde calculamos $\Gamma_R^{(2,1)}$, representa dois momentos k_1 e k_2 com as propriedades

$$\overline{SP}: \quad k_i^2 = \frac{3}{4}\kappa^2 \quad k_1 \cdot k_2 = -\frac{1}{4}\kappa^2, \quad (5.60)$$

esta última relação implica que $p^2 = (k_1 + k_2)^2 = \kappa^2$. A razão para essas escolhas de SP e \overline{SP} é tornar iguais várias integrais que aparecem nos cálculos de $\Gamma_R^{(4,0)}$ e $\Gamma_R^{(2,1)}$, reduzindo consideravelmente o trabalho de resolução do sistema de equações apresentado acima.

⁴Mesmo se não usarmos regularização dimensional, a teoria crítica é descrita por uma teoria de massa zero. Porém, o argumento é um pouco mais longo. Veja, por exemplo a seção 7-6 do livro de Amit [20].

Após determinar g , Z_ϕ e Z_{ϕ^2} de modo a satisfazer as condições de renormalização expressas nas eqs. (5.54)–(5.58), as funções de Green renormalizadas,

$$\Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, g, \kappa, \Lambda) = Z_\phi^{\frac{N}{2}} Z_{\phi^2}^L \left[\Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \lambda, \Lambda) - \delta_{N,0} \delta_{L,2} \Gamma^{(0,2)}(p, \lambda, \Lambda) \Big|_{p^2=\kappa^2} \right], \quad (5.61)$$

são finitas no limite $\Lambda \rightarrow \infty$.

Note que a eq. (5.54), que fixa a massa renormalizável igual a zero, é equivalente à condição que determina a temperatura crítica, eq. (5.43). De fato, se multiplicarmos a eq. (5.43) por Z_ϕ^2 e substituirmos λ por uma expansão apropriada em potências de g , obteremos, devido à eq. (5.61), a eq. (5.54). Assim, a condição de criticalidade é obtida impondo-se que a massa renormalizada seja igual a zero.

Vamos obter, agora, a equação do grupo de renormalização para a teoria crítica. Pretendemos dar uma ideia razoável dos métodos empregados mas não pretendemos esgotar o assunto. Sem nenhum prejuízo para o entendimento, vamos deixar de lado o calor específico, ligado à função $\Gamma^{(0,2)}$ que não se renormaliza multiplicativamente. Na prática, não precisamos do expoente α . Basta calcular η e ν , e depois usar as relações de escala para determinar todos os outros expoentes.

A eq. (5.61) pode ser invertida para fornecer a função de Green não renormalizada, $\Gamma^{(N,L)}$, em termos da função renormalizada, $\Gamma_R^{(N,L)}$

$$\Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \lambda, \Lambda) = Z_\phi^{-N/2} Z_{\phi^2}^{-L} \Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, g, \kappa, \Lambda), \quad (5.62)$$

onde a dependência em κ nas funções renormalizadas provém das condições de renormalização, eqs. (5.54)–(5.58). Conforme discutimos acima, estamos excluindo a função $\Gamma^{(0,2)}$.

Nesta etapa é conveniente introduzir constantes de acoplamento adimensionais, u_0 e u , definidas como

$$\begin{aligned} \lambda &= \kappa^\epsilon u_0, \\ g &= \kappa^\epsilon u, \end{aligned} \quad (5.63)$$

onde $\epsilon = 4 - d$. Em seguida, regularizamos dimensionalmente as funções $\Gamma^{(N,L)}$ para podermos passar ao limite $\Lambda \rightarrow \infty$. A eq. (5.62) torna-se então

$$\Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \lambda = \kappa^\epsilon u_0) = Z_\phi^{-N/2} Z_{\phi^2}^{-L} \Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, u, \kappa). \quad (5.64)$$

A equação do grupo de renormalização é obtida aplicando-se o operador $(\kappa\partial/\partial\kappa)_\lambda$ à eq. (5.64). Observe que

$$\left(\kappa\frac{\partial}{\partial\kappa}\Gamma^{(N,L)}(k_i, p_j, \lambda = u_0\kappa^\epsilon)\right)_{\lambda=u_0\kappa^\epsilon} = 0, \quad (5.65)$$

uma vez que a única dependência de $\Gamma^{(N,L)}$ em κ é através de $\lambda = u_0\kappa^\epsilon$ e esta combinação é mantida fixa pela derivada parcial. Portanto, o operador derivada atuando no lado direito da eq. (5.64) leva à seguinte equação

$$\left[\kappa\frac{\partial}{\partial\kappa} + \beta(u)\frac{\partial}{\partial u} - \frac{N}{2}\gamma_\phi(u) + L\gamma_{\phi^2}(u)\right]\Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_j, u, \kappa) = 0, \quad (5.66)$$

onde definimos as seguintes funções

$$\beta(u) \equiv \kappa\left(\frac{\partial u}{\partial\kappa}\right)_\lambda, \quad (5.67)$$

$$\gamma_\phi(u) \equiv \kappa\left(\frac{\partial \ln Z_\phi}{\partial\kappa}\right)_\lambda, \quad (5.68)$$

$$\gamma_{\phi^2}(u) \equiv -\kappa\left(\frac{\partial \ln Z_{\phi^2}}{\partial\kappa}\right)_\lambda, \quad (5.69)$$

finitas no limite $\epsilon \rightarrow 0$.

Tudo o que fizemos até agora aplica-se apenas a $T = T_c$. Apenas o expoente η é calculada exatamente na temperatura crítica. Para determinar os outros expoentes precisamos das funções de Green nas vizinhanças de T_c . E. Brézin, J. C. Le Guillou e J. Zinn-Justin, mostraram como expandir as funções de Green em torno de T_c .⁵

Para $T > T_c$, podemos escrever

$$\Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \mu^2, u_0\kappa^\epsilon) = \sum_{J=0}^{\infty} \frac{1}{J!} (\delta T)^J \Gamma^{(N,L+J)}(k_i, p_i, q_i = 0, \mu_c^2, u_0\kappa^\epsilon), \quad (5.70)$$

onde usamos $\mu^2 \equiv \delta T + \mu_c^2$, veja a eq. (5.48). No esquema de regularização dimensional $\mu_c^2 = T_c - T_0 = 0$ e por esta razão vamos omiti-lo daqui por diante.

⁵Veja, por exemplo, a seção 7-7 do livro de D. J. Amit.

A eq. (5.48), permite demonstrar que as funções de Green com $T > T_c$ são renormalizadas com as mesmas constantes Z_ϕ e Z_{ϕ^2} da teoria crítica, determinadas através das eqs. (5.54)–(5.58). De fato, multiplicando os dois lados da eq. (5.70) por $Z_\phi^{N/2} Z_{\phi^2}^L$ obtemos

$$Z_\phi^{N/2} Z_{\phi^2}^L \Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \mu^2, u_0 \kappa^\epsilon) = \sum_{J=0}^{\infty} \frac{1}{J!} t^J \Gamma_R^{(N,L+J)}(k_i, p_i, q_i = 0, u) , \quad (5.71)$$

onde usamos a eq. (5.64) para expressar as funções não renormalizadas, $\Gamma^{(N,L)}$, em termos das renormalizadas, $\Gamma_R^{(N,L)}$, e

$$t \equiv Z_{\phi^2}^{-1} \delta T , \quad (5.72)$$

é a diferença de temperatura renormalizada. Observe que se t for finito o lado direito da equação da eq. (5.71) também será finito; em outras palavras, para $T > T_c$,

$$\Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, t, u) = Z_\phi^{N/2} Z_{\phi^2}^L \Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \mu^2, u_0 \kappa^\epsilon) , \quad (5.73)$$

e podemos usar as constantes de renormalização da teoria crítica (sem massa). Finalmente, usando a eq. (5.73) podemos reescrever a (5.71) como

$$\Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, t, u) = \sum_{J=0}^{\infty} \frac{1}{J!} t^J \Gamma_R^{(N,L+J)}(k_i, p_i, q_i = 0, u) . \quad (5.74)$$

Para $T < T_c$ a situação é mais complicada, pois a magnetização é diferente de zero, ou seja, $\langle \phi \rangle \equiv \bar{\phi} \neq 0$. As funções de Green vão depender de $\bar{\phi}$. Também é possível, neste caso, expandir estas funções de Green em torno da teoria crítica,

$$\begin{aligned} & \Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \mu^2, \bar{\phi}, u_0 \kappa^\epsilon) \\ &= \sum_{I,J=0}^{\infty} \frac{1}{I!J!} (\bar{\phi})^I (\delta T)^J \Gamma^{(N+I,L+J)}(k_i, l_i = 0, p_i, q_i = 0, u_0 \kappa^\epsilon) . \end{aligned} \quad (5.75)$$

De uma forma análoga ao que foi feito para as temperaturas acima de T_c , multiplicamos a eq. (5.75) por $Z_\phi^{N/2} Z_{\phi^2}^L$ e chegamos a

$$\begin{aligned}
& \Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, t, M, u) \\
&= \sum_{I,J=0}^{\infty} \frac{1}{I!J!} M^I t^J \Gamma_R^{(N+I,L+J)}(k_i, l_i = 0, p_i, q_i = 0, u_0 \kappa^\epsilon) ,
\end{aligned} \tag{5.76}$$

onde t foi definido na eq. (5.72),

$$M \equiv Z_\phi^{-1/2} \bar{\phi} , \tag{5.77}$$

e as funções $\Gamma_R^{(N,L)}$ para $T < T_c$ são dadas por

$$\Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, t, M, u) = Z_\phi^{N/2} Z_{\phi^2}^L \Gamma^{(N,L)}(k_i, p_i, \mu^2, \bar{\phi}, u_0 \kappa^\epsilon) . \tag{5.78}$$

Usando as expansões (5.74), (5.78) e lembrando que as funções de Green em T_c são soluções da eq. (5.66) é simples verificar que as funções $\Gamma_R^{(N,L)}$, para $T > T_c$ satisfazem a seguinte equação do grupo de renormalização:

$$\left[\kappa \frac{\partial}{\partial \kappa} + \beta(u) \frac{\partial}{\partial u} - \frac{N}{2} \gamma_\phi(u) + \gamma_{\phi^2}(u) \left(L + t \frac{\partial}{\partial t} \right) \right] \Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, t, u, \kappa) = 0 , \tag{5.79}$$

enquanto que para $T < T_c$ aparece um termo extra, devido à magnetização $M \neq 0$,

$$\begin{aligned}
& \left[\kappa \frac{\partial}{\partial \kappa} + \beta(u) \frac{\partial}{\partial u} - \frac{1}{2} \gamma_\phi(u) \left(N + M \frac{\partial}{\partial M} \right) + \gamma_{\phi^2}(u) \left(L + t \frac{\partial}{\partial t} \right) \right] \\
& \quad \times \Gamma_R^{(N,L)}(k_i, p_i, t, M, u, \kappa) = 0 . \tag{5.80}
\end{aligned}$$

5.6 Solução das equações do grupo de renormalização e os expoentes críticos

Os fenômenos críticos estão ligados a uma invariância sob transformações de escala. Assim, precisamos descobrir como as funções de Green se transformam quando mudamos a escala dos momentos. Em particular, precisamos

analisar o sistema a distâncias cada vez maiores, ou, equivalentemente, para momentos cada vez menores. Para isto é necessário resolver a equação do grupo de renormalização. Vamos exemplificar o método com a função $\Gamma_R^{(2,0)}$, com $T > T_c$. Neste caso, a eq. (5.79) se escreve como

$$\left[\kappa \frac{\partial}{\partial \kappa} + \beta(u) \frac{\partial}{\partial u} - \gamma_\phi(u) + \gamma_{\phi^2}(u) t \frac{\partial}{\partial t} \right] \Gamma_R^{(2,0)}(k, t, u, \kappa) = 0. \quad (5.81)$$

Nesta seção, k denotará o módulo do vetor k , uma vez que $\Gamma_R^{(2,0)}$ só depende, devido à invariância rotacional, do módulo de k .

A solução desta equação pode ser achada através do método das características. Introduzindo as funções $u(s)$ e $t(s)$ que satisfazem as equações

$$s \frac{du(s)}{ds} = \beta(u(s)) \quad , \quad u(s=1) = u, \quad (5.82)$$

$$s \frac{dt(s)}{ds} = \gamma_{\phi^2}(u(s))t(s) \quad , \quad t(s=1) = t, \quad (5.83)$$

pode-se mostrar que

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k, t, u, \kappa) = \exp \left[- \int_1^s \gamma_\phi(u(s')) \frac{ds'}{s'} \right] \Gamma_R^{(2,0)}(k, t(s), u(s), s\kappa). \quad (5.84)$$

Para descobrir como as funções de Green se comportam sob transformações de escala a eq. (5.84) não é suficiente. Precisamos combiná-la com alguns resultados de análise dimensional. A função de Green $\Gamma_R^{(2,0)}$ e o parâmetro t têm dimensão de massa ao quadrado. Lembrando que s e $u(s)$ são adimensionais podemos escrever

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k, t, u, \kappa) = (s\kappa)^2 \exp \left[- \int_1^s \gamma_\phi(u(s')) \frac{ds'}{s'} \right] \Gamma_R^{(2,0)} \left(\frac{k}{s\kappa}, \frac{t(s)}{(s\kappa)^2}, u(s), 1 \right). \quad (5.85)$$

Na eq. (5.85), o momento k é arbitrário. Assim, podemos colocá-lo igual a $s\kappa$ e, depois de absorver o parâmetro κ de volta na função $\Gamma_R^{(2,0)}$, chegamos

a

$$\Gamma_R^{(2,0)}(sk, t, u, \kappa) = s^2 \exp \left[- \int_1^s \gamma_\phi(u(s')) \frac{ds'}{s'} \right] \Gamma_R^{(2,0)} \left(k, \frac{t(s)}{s^2}, u(s), \kappa \right). \quad (5.86)$$

Analisando a expressão acima, vemos que uma mudança na escala do momento multiplica $\Gamma_R^{(2,0)}$ pelo fator de escala s^2 , introduz um fator exponencial complicado, substitui a constante de acoplamento u por uma constante de acoplamento efetiva $u(s)$ e temperatura t por uma função $t(s)$. O resultado não é nada simples. Em particular, se colocarmos $t = 0$, não há sinal do comportamento $\Gamma_R^{(2,0)} \sim k^{2+\eta}$, típico da função de dois pontos no ponto crítico. Porém, existem circunstâncias em que obtemos um comportamento simples por transformações de escala. Isto ocorre quando ao variarmos s a constante de acoplamento atinge um valor limite u^* não mudando mais. Lembrando a eq. (5.82), que fornece a dependência de $u(s)$ com a escala s , é fácil ver que neste caso u^* deve ser um zero da função β ,

$$\beta(u^*) = 0. \quad (5.87)$$

Os valores de u que satisfazem a eq.(5.87) são chamados **pontos fixos**.

A eq. (5.81) em $u = u^*$ simplifica-se consideravelmente,

$$\left[\kappa \frac{\partial}{\partial \kappa} - \gamma_\phi^* + \gamma_{\phi^2}^* t \frac{\partial}{\partial t} \right] \Gamma_R^{(2,0)}(k, t, u^*, \kappa) = 0, \quad (5.88)$$

com $\gamma_\phi^* \equiv \gamma_\phi(u^*)$ e $\gamma_{\phi^2}^* \equiv \gamma_{\phi^2}(u^*)$. A solução da (5.87) é dada por

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k, t, u^*, \kappa) = \kappa^{\gamma_\phi^*} \Phi^{(2,0)}(k, \kappa^{\gamma_{\phi^2}^*} t, u^*), \quad (5.89)$$

onde $\Phi^{(2,0)}$ é uma função arbitrária.

Seja ρ uma constante com dimensão de massa. A análise dimensional nos permite escrever

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k, t, u^*, \kappa) = \rho^2 \Gamma_R^{(2,0)} \left(\frac{k}{\rho}, \frac{t}{\rho^2}, u^*, \frac{\kappa}{\rho} \right). \quad (5.90)$$

Combinando as eqs. (5.89) e (5.90) obtemos

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k, t, u^*, \kappa) = \rho^{2-\gamma_\phi^*} \kappa^{\gamma_\phi^*} \Phi^{(2,0)} \left(\frac{k}{\rho}, \frac{t \kappa^{-\gamma_{\phi^2}^*}}{\rho^{2-\gamma_{\phi^2}^*}}, u^* \right). \quad (5.91)$$

O expoente η é calculado na temperatura crítica, T_c . Colocando $t = 0$ na eq. (5.91) e escolhendo $\rho = k$ (lembre-se de que ρ é arbitrário) chegamos a

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k, 0, u^*, \kappa) = k^{2-\gamma_\phi^*} \kappa^{\gamma_\phi^*} \Phi^{(2,0)}(1, 0, u^*) . \quad (5.92)$$

Em T_c , $\Gamma_R^{(2,0)} \sim k^{2-\eta}$. Esta propriedade pode ser deduzida calculando-se a transformada de Fourier da eq. (2.10) e lembrando que $\Gamma_R^{(2,0)}$ é o inverso de $G_c^{(2)}$. Portanto,

$$\eta = \gamma_\phi^* \equiv \gamma_\phi(u^*) \quad (5.93)$$

com γ_ϕ definida na eq. (5.68).

Para identificar ν voltamos para a eq. (5.91), mas desta vez mantendo $t \neq 0$. Escolhendo o parâmetro ρ tal que

$$\frac{t \kappa^{-\gamma_{\phi^2}^*}}{\rho^{2-\gamma_{\phi^2}^*}} = 1 \iff \rho = \kappa \left(\frac{t}{\kappa^2} \right)^{1/(2-\gamma_{\phi^2}^*)} , \quad (5.94)$$

a equação (5.91) se escreve como

$$\Gamma_R^{(2,0)}(k, t, u^*, \kappa) = \kappa^2 \left(\frac{t}{\kappa^2} \right)^{(2-\gamma_\phi^*)/(2-\gamma_{\phi^2}^*)} \Phi^{(2,0)} \left(\frac{k}{\kappa} \left(\frac{t}{\kappa^2} \right)^{-1/(2-\gamma_{\phi^2}^*)} , 1, u^* \right) . \quad (5.95)$$

Note que esta expressão tem exatamente a forma da eq. (2.66), $G_c^{(2)}(k, |t|) \sim \xi^{2-\eta} R(k\xi) \Rightarrow \Gamma_R^{(2,0)}(k, |t|) \sim \xi^{-2+\eta} / R(k\xi)$, apresentada quando discutimos a teoria de escala. Assim, podemos identificar

$$\xi = \kappa^{-1} \left(\frac{t}{\kappa^2} \right)^{-1/(2-\gamma_{\phi^2}^*)} \sim t^{-1/(2-\gamma_{\phi^2}^*)} . \quad (5.96)$$

Por outro lado, $\xi \sim t^{-\nu}$, e podemos finalmente escrever

$$\nu = (2 - \gamma_{\phi^2}^*)^{-1} \equiv (2 - \gamma_{\phi^2}(u^*))^{-1} , \quad (5.97)$$

onde $\gamma_{\phi^2}(u)$ foi definido na eq. (5.69).

Tendo identificado os expoentes η e ν , podemos calcular os outros quatro expoentes usando as relações de escala apresentadas na seção 2.5. Estas relações podem também ser deduzidas das equações do grupo de renormalização. Por exemplo, colocando $k = 0$ na eq. (5.95) e usando as eqs. (5.93) e (5.97), que identificam os expoentes η e ν , respectivamente, chegamos a

$$\Gamma_R^{(2,0)}(0, t, u^*, \kappa) = \kappa^2 \left(\frac{t}{\kappa^2} \right)^{\nu(2-\eta)} \Phi^{(2,0)}(0, 1, u^*) . \quad (5.98)$$

Lembrando que $\Gamma_R^{(2,0)}(k=0) = \chi^{-1} \sim t^\gamma$, reobtemos a lei de escala de Fisher,

$$\gamma = \nu(2 - \eta) . \quad (5.99)$$

As outras relações de escala podem ser obtidas examinando outras funções de Green.

5.7 Universalidade

Este é um bom momento para recapitular o que fizemos. Primeiramente, combinamos a solução da eq. do grupo de renormalização com análise dimensional para descobrir como as funções de Green se comportam sob uma mudança de escala. O resultado, dado na eq. (5.86), não é simples. Entre outros efeitos, o mais interessante é a substituição da constante de acoplamento u por uma constante de acoplamento efetiva que depende do fator de escala s . Notamos, em seguida, que existem circunstâncias nas quais o comportamento das funções de Green sob mudanças de escala é simples. Isto ocorre se à medida em que $s \rightarrow 0$ (em fenômenos críticos estamos interessados no comportamento a grandes distâncias) $u(s) \rightarrow u^*$, o que implica em $\beta(u^*) = 0$, uma vez que o fluxo de $u(s)$ é controlado pela função β . Neste caso, recuperamos as expressões de escala da seção 2.5 e conseguimos identificar os expoentes críticos.

O fluxo de $u(s)$ em direção ao ponto fixo é uma das causas da universalidade, a outra é a irrelevância, para o comportamento crítico, de um grande número de operadores. De fato, para chegar na teoria ϕ^4 a partir do modelo de Ising, na seção 5.1, desprezamos todas as potências de ϕ maiores do que 4. Assim, o último vestígio da hamiltoniana de partida ficou na constante de acoplamento, λ , e depois em sua versão renormalizada, u . Outros modelos, com as mesmas simetrias do modelo de Ising, são também mapeados na teoria ϕ^4 . Cada um deles vai ter uma constante de acoplamento diferente. Porém, com o fluxo de $u(s)$ para o ponto fixo o último resquício do modelo original desaparece e todos eles apresentarão os mesmos expoentes críticos. Lembre-se de que os expoentes são calculados exatamente em u^* . Esta é em linhas gerais o mecanismo da universalidade.

Para concluir esta apresentação sobre o uso de teoria de campos em fenômenos críticos vamos discutir em mais detalhe o fluxo em direção ao ponto fixo.

Suponha que a função β tem um zero simples em $u = u^*$, isto é $\beta(u^*) = 0$. Nas vizinhanças de u^* podemos escrever

$$\beta(u) \approx b(u - u^*), \quad (5.100)$$

$$s \frac{du(s)}{ds} = \beta(u(s)) \approx b[u(s) - u^*], \quad (5.101)$$

onde $b \equiv \beta'(u^*)$. A solução da eq. (5.101) que satisfaz à condição de contorno $u(s=1) = u$, é dada por

$$u(s) = u^* + (u - u^*) s^b. \quad (5.102)$$

O que vai acontecer nos limites $s \rightarrow 0$ (grandes distâncias) e $s \rightarrow \infty$ (pequenas distâncias) depende crucialmente do sinal de b . Distinguimos dois casos

(a) $b = \beta'(u^*) > 0$, temos um ponto fixo estável no infravermelho e

$$\begin{aligned} s \rightarrow 0 &\Rightarrow u(s) \rightarrow u^* \text{ para qualquer sinal de } u - u^*, \\ s \rightarrow \infty &\Rightarrow \begin{cases} u(s) & \text{aumenta se } u - u^* > 0, \\ u(s) & \text{diminui se } u - u^* < 0; \end{cases} \end{aligned}$$

(b) $b = \beta'(u^*) < 0$, temos um ponto fixo estável no ultravioleta e

$$\begin{aligned} s \rightarrow 0 &\Rightarrow \begin{cases} u(s) & \text{aumenta se } u - u^* > 0, \\ u(s) & \text{diminui se } u - u^* < 0, \end{cases} \\ s \rightarrow \infty &\Rightarrow u(s) \rightarrow u^* \text{ para qualquer sinal de } u - u^*. \end{aligned}$$

Estas duas situações são ilustradas na fig. 5.1. Se a constante renormalizada, u , está próxima de um ponto estável no infravermelho e $s \rightarrow 0$, u flui para este ponto. A região onde a constante de acoplamento flui para o ponto fixo é chamada **bacia de atração do ponto fixo**. Se, ao invés de fazermos $s \rightarrow 0$, fizermos $s \rightarrow \infty$ u se afasta do ponto infravermelho e se move para um ponto fixo estável no ultravioleta. Estas observações são essenciais para o entendimento de fenômenos críticos e de experiências de espalhamento altamente inelástico em física de partículas. De fato, verificou-se que em experiências de espalhamento elétron-próton, em altas energias, os quarks que constituem o próton comportam-se em primeira aproximação como se fossem livres. Isto significa que a grandes momentos ($s \rightarrow \infty$) a constante de acoplamento efetiva da QCD flui para $u = 0$. Mostrou-se que as únicas

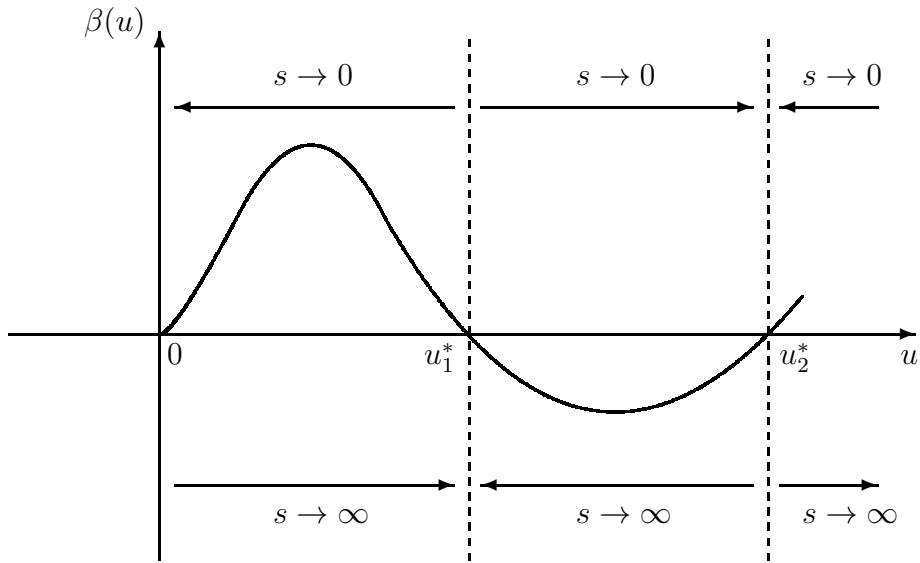


Figura 5.1: Função β com pontos fixos infravermelhos, 0 e u_2^* ; e um ponto fixo ultravioleta, u_1^* .

teorias onde o zero é um ponto fixo estável no ultravioleta são as teorias de gauge não abelianas. Assim, as ideias de grupo de renormalização serviram para selecionar as teorias candidatas a descrever as partículas elementares e, hoje em dia, permeiam praticamente todas as áreas da física.

Capítulo 6

Trabalhos em Teoria de Campos

6.1 Thermal Replica Mixing and the Harris Criterion for Disordered Systems, University of Oxford preprint Ref: 64/82 (anexado no final desta resenha).

Neste trabalho, feito em colaboração com Giancarlo Jug, apresentamos uma prova do critério de Harris válida em todas as ordens de perturbação. Este critério, demonstrado fenomenologicamente por Harris, diz que a introdução de desordem não muda o comportamento crítico de um sistema ferromagnético desde que o expoente crítico do calor específico, α_p , do sistema puro seja negativo. Consequentemente um sistema com $\alpha_p > 0$ apresentará um novo comportamento crítico quando a desordem for introduzida. Cálculos de grupo de renormalização, e a expansão ϵ até ordem ϵ^4 , indicavam a equivalência entre o expoente α_p e o expoente de *crossover* ϕ , que descreve como o sistema se afasta do comportamento do sistema puro. Mostramos que em todas as ordens de perturbação $\phi = \alpha_p$.

Para utilizar as técnicas de teoria de campos neste problema é preciso mapear o modelo de spins original em uma teoria de campos. Um modelo de interesse é aquele onde em cada sítio i de uma rede existe, com probabilidade p , um spin com m componentes, \vec{S}_i , e, com probabilidade $1 - p$, nenhum spin (*site diluted m-component spin model*). A desordem é introduzida através da

diluição de sítios. A hamiltoniana que descreve este modelo é dada por

$$\beta\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{ij} p_i p_j \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (6.1)$$

a variável aleatória p_i no sítio i tem o valor 1 se o sítio está ocupado e 0 se o sítio está vazio. Quando $p_i = 1$ para todo i , recuperamos o modelo puro. Grinstein e Luther mostraram que o modelo descrito pela eq. (6.1) pode ser mapeado em uma teoria de campos com a densidade de hamiltoniana

$$H = \sum_{\alpha=1}^n \left\{ \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{\phi}^\alpha)^2 + \frac{1}{2} \mu^2 (\vec{\phi}^\alpha)^2 + \frac{\lambda_0}{4!} [(\vec{\phi}^\alpha)^2]^2 \right\} - \frac{\Delta}{4!} \left[\sum_{\alpha=1}^n (\vec{\phi}^\alpha)^2 \right]^2, \quad (6.2)$$

onde $\mu^2 \sim T - T_c(p)$, $\Delta \sim 1 - p$, e α denota o índice das réplicas. O truque das réplicas foi utilizado para lidar com a desordem *quenched* do modelo; no final dos cálculos o limite $n \rightarrow 0$ deve ser tomado. O termo proporcional a Δ acopla as réplicas e é proporcional à concentração de impurezas $c = 1 - p$. Sem este termo a hamiltoniana (6.2) representa a superposição de n cópias idênticas do sistema puro. Desta forma, a questão da desordem afetar ou não o comportamento crítico é equivalente, em teoria de campos, à pergunta sobre se o operador $[\sum_{\alpha=1}^n (\vec{\phi}^\alpha)^2]^2/4!$, que mistura as réplicas, é uma perturbação relevante para a teoria

$$H = \sum_{\alpha=1}^n \left\{ \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{\phi}^\alpha)^2 + \frac{1}{2} \mu^2 (\vec{\phi}^\alpha)^2 + \frac{\lambda_0}{4!} [(\vec{\phi}^\alpha)^2]^2 \right\}. \quad (6.3)$$

É conveniente absorver os termos do operador A_1 proporcionais a $[(\vec{\phi}^\alpha)^2]^2$ no termo proporcional a λ_0 do sistema puro. Desta forma chegamos com a

$$H = \sum_{\alpha=1}^n \left\{ \frac{1}{2} (\partial_\mu \vec{\phi}^\alpha)^2 + \frac{1}{2} \mu^2 (\vec{\phi}^\alpha)^2 + \frac{\lambda}{4!} [(\vec{\phi}^\alpha)^2]^2 \right\} - \frac{\Delta}{4!} \sum_{\alpha \neq \beta} (\vec{\phi}^\alpha)^2 (\vec{\phi}^\beta)^2. \quad (6.4)$$

Outra maneira de analisar a relevância do operador que mistura réplicas é através do expoente de *crossover* no ponto crítico de Ising. No caso em que $\Delta = 0$ o comportamento do sistema é determinado pelo ponto crítico de Ising. Precisamos descobrir em que condições, quando $\Delta \neq 0$, o sistema é atraído para outro ponto fixo.

De um modo geral, o comportamento de escala de qualquer variável termodinâmica $f(t, \Delta, \dots)$ pode ser escrito como

$$f(t, \Delta, \dots) = t^\psi \bar{f}(\Delta/t^\phi, \dots), \quad (6.5)$$

onde ψ é o expoente crítico da variável f no sistema puro ($\Delta = 0$) e ϕ é o expoente de *crossover*. Para Δ finito, no limite $t \rightarrow 0$, há dois casos simples:¹

(a) $\phi > 0$, e para $t \rightarrow 0$ obtém-se $f \sim t^\Delta$, ou seja o comportamento do sistema puro.

(b) $\phi < 0$, o argumento de f tende a infinito para $t \rightarrow 0$ e $\Delta \neq 0$, neste caso a interação é relevante e leva a um comportamento diferente daquele do sistema puro (*crossover*).

Neste trabalho mostramos que em todas as ordens de perturbação $\phi = \alpha$. Assim, fica claro porque o expoente α deve ser positivo para que haja uma mudança no comportamento crítico do sistema diluído. A demonstração pode ser encontrada no paper em anexo.

6.2 Renormalization group calculation for a spin-1 Ising model with bilinear and bi-quadratic exchange interactions, J. Phys. A: Math. Gen. 20 (1987) 189.

Neste trabalho em colaboração com S. R. Salinas e V. B. Henriques estudamos, utilizando o grupo de renormalização em espaço de momentos de Wilson, o modelo descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - J_4 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2, \quad (6.6)$$

onde as somas são sobre primeiros vizinhos e $S_i = 0, \pm 1$. Esta é a hamiltoniana efetiva de alguns modelos de Ising compressíveis simples.

Neste modelo a teoria de campo médio deve ser aplicada com bastante cuidado. Dependendo de como a implementamos, pode surgir ou não um ponto tricrítico. Os vários resultados discordantes em campo médio nos levaram a um estudo detalhado do modelo utilizando o grupo de renormalização.

Mostramos que a hamiltoniana (6.6) pode ser mapeada na do metamagneto com campo staggered nulo, estudada por D. R. Nelson e M. E. Fisher (Phys. Rev. B **11** (1975) 1030). Como no trabalho de Nelson e Fisher existe

¹A análise de D. Amit que estamos utilizando não se aplica ao caso marginal $\phi = 0$.

um grande número de erros tipográficos refizemos todos os cálculos. O resultado principal do grupo de renormalização é o de que o ponto tricrítico não pode ser atingido sem a inclusão de um termo de íon único na hamiltoniana (6.6).

**6.3 (I) Field-theoretic approach to the Lifshitz point,
Phys. Rev. B 58 (1998) 6047;
(II) Field-theoretic calculation of critical exponents for the Lifshitz point,
Phys. Rev. B 59 (1999) 13954.**

Estes trabalhos, feitos com Carlos Mergulhão Jr., apresentam os resultados de sua tese de doutorado.

O ponto de Lifshitz (PL) foi introduzido por R. M. Hornreich, M. Luban, e S. Shtrikman em Phys. Rev. Lett. **35**, (1975) 1678. Neste ponto multicrítico, as fases paramagnética e ferromagnética usuais coexistem com fases moduladas caracterizadas por um vetor de onda \mathbf{k} (veja a seção 4.3). O LP divide a linha de segunda ordem que separa as fases paramagnética e ferromagnética das fases moduladas em dois ramos. Em um dos ramos, o vetor de onda \mathbf{k} das fases moduladas vai continuamente a zero, à medida que nos aproximamos do PL, segundo a lei $|\mathbf{k}| \sim |(p - p_L)/p_L|^{\beta_k}$, onde p é um parâmetro externo. Para ter em mente um exemplo mais concreto, lembre-se do modelo ANNNI, na seção 4.3, onde $p = -J_2/J_1$ é a razão entre os acoplamentos ferromagnético e antiferromagnético. O PL aparece não apenas em sistemas magnéticos, mas também em cristais líquidos e cristais ferroelétricos.

Todos os cálculos de grupo de renormalização são baseados na hamiltoniana de Ginsburg-Landau dada por

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2} \int_q v(q) \vec{\Phi}_{-q} \cdot \vec{\Phi}_q + \frac{\lambda}{4!} \int_{q_1} \int_{q_2} \int_{q_3} (\vec{\Phi}_{q_1} \cdot \vec{\Phi}_{q_2})(\vec{\Phi}_{q_3} \cdot \vec{\Phi}_{-q_1-q_2-q_3}), \\
 v(q) &= r_0 + q_\beta^2 + c_0 q_\alpha^2 + \sigma_0 (q_\alpha^2)^2, \\
 q_\alpha^2 &\equiv \sum_{\mu=1}^m q_\mu^2, \quad q_\beta^2 \equiv \sum_{\mu=m+1}^d q_\mu^2,
 \end{aligned} \tag{6.7}$$

onde $\vec{\Phi}_q$ é um campo com n componentes, e σ_0 é um parâmetro adimensional. Os parâmetros r_0 e c_0 estão relacionados com a temperatura e com o parâmetro p através das expressões $r_0 = T - T_{0L}$ e $c_0 \sim p - p_{0L}$, e T_{0L} e p_{0L} são as coordenadas do PL no plano p - T . Note que espaço é dividido em dois subespaços: um subespaço α com dimensão m e um subespaço β com dimensão $d - m$. Muitos modelos são descritos pela hamiltoniana (6.7), cada um parametrizado por um valor diferente de n e m , $1 \leq m \leq 8$. Por exemplo, o modelo ANNNI corresponde ao caso $m = n = 1$. Um PL está associado a uma instabilidade nas m componentes do vetor de onda no subespaço α . No PL r_0 e c_0 se anulam simultaneamente e o termo q_α^4 deve ser mantido. Desta forma, acabamos com um propagador do tipo $[\sigma_0 q_\alpha^4 + q_\beta^2]^{-1}$ que contém um termo quártico e que não possui simetria rotacional. A simetria rotacional fica restrita aos subespaços α e β . A dificuldade do problema decorre deste propagador peculiar.

Utilizando a técnica de grupo de renormalização de Wilson e uma expansão ϵ em torno da dimensão crítica superior, $d_u(m) = 4 + m/2$, $m \leq 8$, Hornreich, Luban and Shtrikman calcularam, para todo m , os expoentes $\nu_{\ell 2}$ e $\nu_{\ell 4}$ até ordem ϵ , e, para $m = 8$, $\nu_{\ell 2}$, $\nu_{\ell 4}$ e $\eta_{\ell 4}$ até ordem ϵ^2 , onde o subscrito $\ell 4$ ($\ell 2$) refere-se ao subespaço α (β). Mukamel determinou $\eta_{\ell 2}$ e $\eta_{\ell 4}$ até ordem ϵ^2 para todos os m , e β_k até ordem ϵ^2 para $m < 6$. Hornreich and Bruce calcularam para $m = 1$, os expoentes $\eta_{\ell 2}$ e $\eta_{\ell 4}$ até ordem ϵ^2 e o expoente β_k até ordem ϵ^2 e seu resultado concorda com o de Mukamel. Entretanto, Sak and Grest fizeram um cálculo independente, para $m = 2$ e $m = 6$, de $\eta_{\ell 2}$, $\eta_{\ell 4}$ e β_k até ordem ϵ^2 , obtendo resultados diferentes dos de Mukamel.

Todos os cálculos citados acima utilizaram a técnica de grupo de renormalização de Wilson, onde as integrais associadas aos diagramas de Feynman são calculadas sobre cascas (*shells*) no espaço de momentos. Isto torna o cálculo extremamente difícil e em todos os trabalhos mencionados foram utilizadas diferentes aproximações. Devido à dificuldade de julgar quais aproximações forneciam os resultados corretos, decidimos calcular exatamente as integrais utilizando teoria de campos. A vantagem é que nesta abordagem as integrais são calculadas sobre todo o espaço e não apenas sobre cascas. O preço a pagar por esta simplificação é que precisamos descobrir como renormalizar a teoria em todas as ordens de perturbação. Isto decorre, como mostramos na seção 5.6, do fato dos expoentes críticos serem determinados a partir das soluções das equações do grupo de renormalização. Estas, por sua vez, são obtidas aplicando-se o operador $(\kappa d/d\kappa)_\lambda$ à expressão que relaciona as funções de Green renormalizadas e as não renormalizadas. Assim, o

conhecimento desta relação é essencial.

O primeiro trabalho é dedicado precisamente ao estudo da renormalização da teoria de campos descrita pela hamiltoniana (6.7). Devido ao propagador com o termo quártico e sem simetria rotacional, muito pouco das técnicas usuais de teoria de campos pode ser aplicada. Tivemos de desenvolver uma maneira de (a) calcular a divergência dos diagramas, e mostrar que o número de diagramas divergente é finito; (b) encontrar prescrições de renormalização válidas para todas as ordens de perturbação, em particular, foi essencial achar um conjunto de prescrições que independe do parâmetro σ —o parâmetro σ_0 renormalizado—; (c) adaptar para o PL a técnica de Zinn-Justin, originalmente desenvolvida para pontos críticos; (d) finalmente, e esta foi a parte mais simples, resolver as equações do grupo de renormalização e identificar os expoentes críticos. Os resultados mostraram que as aproximações corretas eram as de Sak e Grest. No segundo trabalho, apresentamos em detalhe as técnicas que desenvolvemos para calcular diagramas com o propagador $[\sigma_0 q_\alpha^4 + q_\beta^2]^{-1}$. Graças a elas pudemos pela primeira vez calcular os expoentes $\nu_{\ell 2}$ e $\nu_{\ell 4}$ até ordem ϵ^2 , e solucionamos a controvérsia que perdurava por mais de vinte anos sobre as correções em ordem ϵ^2 para os expoentes $\eta_{\ell 2}$, $\eta_{\ell 4}$ para os casos $m = 2$ e $m = 6$.

Capítulo 7

Simulações Numéricas

7.1 O Método de Monte Carlo para Sistemas Clássicos

Um dos problemas básicos em Mecânica Estatística é o cálculo de valores esperados envolvendo somas do tipo

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\{\vec{x}\}} O(\vec{x}) e^{-\beta H(\vec{x})}}{\sum_{\{\vec{x}\}} e^{-\beta H(\vec{x})}}, \quad (7.1)$$

onde O é um operador, \vec{x} é um vetor que caracteriza a configuração do sistema, e $H(\vec{x})$ é a hamiltoniana. Por exemplo, para o modelo de Ising em uma rede com N sítios, $\vec{x} \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ e σ_i é o valor do spin no sítio i . Neste caso existem 2^N configurações.

Com raras exceções, estas somas não podem ser calculadas analiticamente. Resta, então, a abordagem numérica. Entretanto, devido ao número enorme de configurações, estas somas não podem ser calculadas diretamente gerando-se todas as configurações no computador. Para dar um exemplo, considere o modelo de Ising em uma rede quadrada com 100 spins. O número total de configurações é igual a $2^{100} \approx 10^{30}$. Um computador que gerasse uma configuração a cada $10^{-6}s$ levaria um tempo superior a 10^{22} anos para gerar todas elas.

Uma solução seria simplesmente escolher aleatoriamente M configurações

e aproximar o valor esperado de O por

$$\langle O \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^M O(\vec{x}_i) e^{-\beta H(\vec{x}_i)}}{\sum_{i=1}^M e^{-\beta H(\vec{x}_i)}} . \quad (7.2)$$

Porém, esta aproximação é muito ruim porque para a maioria das configurações escolhidas aleatoriamente o fator $\exp[-\beta H(\vec{x})]$ vai ser muito pequeno. Em outras palavras, estaremos utilizando, quase sempre, configurações de baixa probabilidade na eq. (7.2). Isto vai levar a uma má estimativa de $\langle O \rangle$.

A resposta para todos estes problemas é o método da **amostragem por importância**. Nesta técnica continuamos gerando apenas M configurações, mas as configurações são geradas de acordo com a distribuição de Boltzmann ($\sim \exp[-\beta H(\vec{x})]$). Desta forma, as configurações mais prováveis são geradas mais vezes e as menos prováveis menos vezes. Como a probabilidade de cada configuração está sendo levada em conta automaticamente no processo de geração,

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M O(\vec{x}_i) , \quad (7.3)$$

e o valor esperado se reduz a uma média aritmética.

Precisamos, então, desenvolver algoritmos eficientes para gerar configurações \vec{x}_i de acordo com a distribuição de Boltzmann. Começaremos apresentando as propriedades mínimas que um algoritmo deve satisfazer para que isto ocorra.

Os algoritmos mais utilizados são constituídos de duas etapas: (a) a partir de uma configuração arbitrária \vec{x}_m é gerada uma nova configuração \vec{x}_n ; (b) a nova configuração é aceita com probabilidade $W(\vec{x}_m \rightarrow \vec{x}_n) \equiv W_{nm}$. A essência do algoritmo está contida na **probabilidade de transição** W_{nm} .

As propriedades que W_{nm} deve satisfazer são as seguintes:

- **Ergodicidade:** Dadas duas configurações \vec{x}_m e \vec{x}_n quaisquer que satisfazem $\exp[-\beta H(\vec{x}_m)] > 0$ e $\exp[-\beta H(\vec{x}_n)] > 0$, existe um inteiro k tal que $W_{nm}^k > 0$, onde

$$W_{nm}^k = \underbrace{(W W \dots W)}_{k \text{ fatores}}_{nm}$$

é o resultado de k aplicações da matriz W . Em outras palavras, sempre é possível atingir qualquer configuração, independentemente da configuração inicial. Basta aplicar o algoritmo um número suficientemente grande de vezes.

- **Normalização:** $\sum_n W_{nm} = 1$, ou seja, a soma das probabilidades para fazer a transição da configuração m para qualquer outra configuração n , ou permanecer nela mesma, é igual a 1.
- **Balço:** $\sum_m W_{nm} e^{-\beta H_m} = e^{-\beta H_n}$, isto é equivalente a dizer que $\exp(-\beta H_m)$ é um autovetor de W_{nm} .

Vamos mostrar que um algoritmo com uma probabilidade de transição que satisfaz as três propriedades acima gera configurações de acordo com a distribuição de Boltzmann. Usaremos uma demonstração de Creutz [33].

Começamos definindo o ensemble de Boltzmann \mathcal{C}^B como um ensemble onde

$$P^B(\vec{x}_n) \equiv P_n^B = c e^{-\beta H_n} \quad , \quad \sum_n P_n^B = 1 \quad , \quad (7.4)$$

ou seja, em \mathcal{C}^B a probabilidade $P^B(\vec{x}_n)$ de encontrar a configuração \vec{x}_n é proporcional ao fator de Boltzmann. Se pudéssemos gerar este ensemble nosso problema estaria resolvido. Bastaria usar suas configurações para calcular $\langle O \rangle$.

Vamos demonstrar que um algoritmo com uma probabilidade de transição que satisfaz ergodicidade, normalização e balanço, aplicado um número suficiente de vezes às configurações $\{\vec{x}_i\}^0$, $i = 1, 2, \dots, N$, de um ensemble arbitrário \mathcal{C}^0 , acaba levando ao ensemble de Boltzmann. Podemos representar a evolução de \mathcal{C}^0 da seguinte forma

$$\{\vec{x}_i\}^0 \xrightarrow{W} \{\vec{x}_i\}^1 \xrightarrow{W} \dots \xrightarrow{W} \{\vec{x}_i\}^{k-1} \xrightarrow{W} \{\vec{x}_i\}^k \quad , \quad (7.5)$$

onde o índice superescrito denota o número de vezes que W foi aplicada. Queremos mostrar que \mathcal{C}^k se aproxima de \mathcal{C}^B à medida em que k aumenta. Para isto precisaremos definir uma “distância” $\|\mathcal{C} - \mathcal{C}^B\|$ entre um ensemble \mathcal{C} e o ensemble de Boltzmann. Faremos isto através da expressão

$$\|\mathcal{C} - \mathcal{C}^B\| \equiv \sum_n |P_n - P_n^B| \quad . \quad (7.6)$$

Precisamos, também, calcular como varia a probabilidade de encontrarmos um configuração \vec{x}_n após cada aplicação do algoritmo. Definindo N_n^j

como sendo o número de vezes em que a configuração \vec{x}_n aparece em $\{\vec{x}_i\}^j$ é fácil ver que

$$P_n^j = \frac{N_n^j}{N}. \quad (7.7)$$

Por outro lado, ao aplicarmos o algoritmo em $\{\vec{x}_i\}^j$ mais uma vez, geramos $\{\vec{x}_i\}^{j+1}$. Claramente, \vec{x}_n aparecerá

$$N_n^{j+1} = \sum_m W_{nm} N_m^j \quad (7.8)$$

vezes no conjunto $\{\vec{x}_i\}^{j+1}$. Dividindo esta expressão por N , e usando a eq. (7.7), obtemos a relação entre as probabilidades nas etapas j e $j+1$,

$$P_n^{j+1} = \sum_m W_{nm} P_m^j. \quad (7.9)$$

Se aplicarmos o algoritmo k vezes em $\{\vec{x}_i\}^0$ obteremos

$$P_n^k = \sum_{m, m_1, \dots, m_{k-1}} W_{nm_{k-1}} \dots W_{m_2 m_1} W_{m_1 m} P_m^0 \equiv \sum_m W_{nm}^k P_m^0. \quad (7.10)$$

Finalmente, podemos mostrar que $\|\mathcal{C}^k - \mathcal{C}^B\| < \|\mathcal{C}^0 - \mathcal{C}^B\|$. De fato,

$$\begin{aligned} \|\mathcal{C}^k - \mathcal{C}^B\| &\equiv \sum_n |P_n^k - P_n^B| \stackrel{(a)}{\equiv} \sum_n \left| \sum_m W_{nm}^k (P_m^0 - P_m^B) \right| \\ &\stackrel{(b)}{\leq} \sum_n \sum_m |W_{nm}^k (P_m^0 - P_m^B)| \stackrel{(c)}{\equiv} \sum_m |(P_m^0 - P_m^B)| \equiv \|\mathcal{C}^0 - \mathcal{C}^B\|. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Vários comentários devem ser feitos. Na passagem (a) da eq. (7.11) usamos a eq. (7.10) e a propriedade de balanço, note que devido à eq. (7.4) P_m^B também é um auto vetor de W_{nm} . Na passagem (b) usamos a desigualdade triangular. Em (c), foi utilizada a normalização; os termos $W_{nm}^k \geq 0$ podem ser colocados fora do módulo e então é possível somar sobre n , $\sum_n W_{nm}^k = 1$. Resta provar que a desigualdade é estrita. Reexaminemos a passagem (b). O sinal de desigualdade, $<$, vai valer se alguns dos termos da dupla soma sobre n e m forem negativos. Se todos os termos forem positivos ou nulos vale a igualdade. Ora, as probabilidades são normalizadas, isto é, $\sum_m P_m^0 = \sum_m P_m^B = 1$. Portanto, $\sum_m (P_m^0 - P_m^B) = 0$ e, se o ensemble inicial não é o ensemble de Boltzmann, então alguns termos $P_m^0 - P_m^B$ serão positivos e outros negativos. Poderia ocorrer que para todos $P_m^0 - P_m^B < 0$,

os W_{nm}^k que os multiplicam fossem exatamente nulos. Neste ponto entra a única propriedade que ainda não utilizamos—a ergodicidade. Ela garante que para k suficientemente grande $W_{nm}^k > 0$ e portanto a desigualdade é estrita: $\|\mathcal{C}^k - \mathcal{C}^B\| < \|\mathcal{C}^0 - \mathcal{C}^B\|$ e realmente nos aproximamos do ensemble de Boltzmann.

Na prática não aplicamos o algoritmo a um conjunto de configurações $\mathcal{C}^0 = \{\vec{x}_i\}^0$. Utilizamos uma única configuração inicial, \vec{x}^0 . As mudanças desta configuração devido à aplicação do algoritmo podem ser vistas como um processo que evolui em um tempo fictício, denotado pelo índice superescrito em nossa notação. Cada configuração gerada depende apenas da configuração anterior. Portanto, o conjunto das configurações forma uma **cadeia de Markov**. Em seguida, apela-se para o teorema ergódico para substituir a média sobre configurações por uma média no tempo e chega-se a

$$\langle O \rangle_{config} \approx \frac{1}{M} \sum_{i=0}^{M-1} O(\vec{x}^i), \quad (7.12)$$

onde o sinal de aproximado foi usado porque a igualdade vale no limite $M \rightarrow \infty$.

Do que foi exposto acima fica claro que leva um certo “tempo” até atingirmos o ensemble de Boltzmann. Este tempo, na linguagem de simulações numéricas, é chamado de **termalização**. É necessário desprezar as primeiras m configurações (m deve ser determinado empiricamente caso a caso), até que o sistema atinja o equilíbrio térmico e as configurações geradas sejam representativas desta temperatura. Ao invés da eq. (7.12) devemos usar

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=m+1}^{m+M} O(\vec{x}^i). \quad (7.13)$$

7.2 O algoritmo de Metropolis

As condições de ergodicidade, normalização e balanço deixam uma ampla margem de liberdade para a construção de algoritmos. Vamos dar um exemplo apresentando o algoritmo mais utilizado em simulações—o de Metropolis.

Na construção de algoritmos a condição de balanço é usualmente substituída por uma condição mais restrita, o balanço detalhado.

- **Balanço detalhado:** a probabilidade de transição tem esta propriedade se

$$W_{nm} e^{-\beta H_m} = W_{mn} e^{-\beta H_n}.$$

Note que o balanço detalhado implica em balanço. Para ver isto, basta somar sobre m na equação acima e lembrar que $\sum_m W_{nm} = 1$.

Metropolis e colaboradores [34], ao construírem seu algoritmo, escolheram a seguinte probabilidade de transição

$$W_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{se } H_n < H_m \\ e^{-\beta(H_n - H_m)} & \text{se } H_n > H_m \end{cases} . \quad (7.14)$$

Ou seja, após gerar a configuração \vec{x}^n , a partir de \vec{x}^m , calculamos a nova energia do sistema $H(\vec{x}^n) \equiv H_n$. Se $H_n \leq H_m$ aceitamos a nova configuração. Se $H_n > H_m$, aceitamos a nova configuração com probabilidade $\exp[-\beta(H_n - H_m)]$. Isto é feito gerando-se um número aleatório r entre 0 e 1; se $r \leq \exp[-\beta(H_n - H_m)]$ aceitamos a nova configuração, caso contrário a rejeitamos e mantemos a configuração antiga. É justamente esta possibilidade de aceitar configurações com energia mais alta que simula as flutuações térmicas. Se rejeitássemos sempre as configurações com energia mais alta acabaríamos caindo no estado fundamental ou em um estado metaestável.

A demonstração de que o algoritmo acima satisfaz balanço detalhado é imediata. Por definição, consideremos o caso em que $H_n > H_m$. Nesta situação $W_{nm} = \exp[-\beta(H_n - H_m)]$ e $W_{mn} = 1$, portanto

$$\frac{W_{nm}}{W_{mn}} = \frac{e^{-\beta(H_n - H_m)}}{1} = \frac{e^{-\beta H_n}}{e^{-\beta H_m}} , \quad (7.15)$$

e a condição de balanço detalhado está satisfeita. A demonstração para $H_n \leq H_m$ é análoga.

Finalmente, é importante observar que o algoritmo de Metropolis é implementado localmente. Isto significa que usualmente muda-se uma partícula, ou spin, de cada vez. No modelo de Ising, por exemplo, a nova configuração é gerada a partir da antiga escolhendo-se aleatoriamente um sítio da rede e invertendo-se o spin neste sítio. Em seguida, usa-se a probabilidade de transição de Metropolis para aceitar ou rejeitar a nova configuração. O fato de lidarmos com um spin de cada vez simplifica enormemente a implementação do método. Os programas são geralmente simples e bastante rápidos. Há um preço a pagar por esta simplicidade: as configurações geradas quando estamos próximos de transições de fase são muito correlacionadas, conforme discutiremos na próxima seção.

7.3 Dificuldades com simulações numéricas próximo de transições de fase

Existem problemas que dificultam as simulações numéricas de sistemas críticos. Próximo da criticalidade o comprimento de correlação ξ diverge e precisamos simular sistemas grandes para descrever corretamente o comportamento crítico. Mesmo usando análise de tamanho finito precisamos de sistemas com um tamanho razoável. A razão é a seguinte: se o tamanho do sistema for pequeno então correções de tamanho finito subdominantes não podem ser desprezadas. É muito difícil ajustar dados numéricos, devido ao grande número de parâmetros, quando empregamos expressões com correções dominantes e subdominantes. Isto sem mencionar o trabalho para determinar a forma destas correções subdominantes. Com o aumento do tamanho do sistema é inevitável o aumento do tempo de computação. Se o sistema tem d dimensões, podemos dizer que o tempo de computação cresce com ξ^d (para um sistema finito, muito próximo do ponto crítico $\xi \sim L$, onde L é a dimensão linear típica do sistema).

Uma outra fonte de aumento do tempo de computação é a correlação temporal ξ_t . Ela mede essencialmente quantas configurações novas devem ser geradas até se obter uma configuração estatisticamente independente. Se quisermos obter uma boa estimativa do valor esperado de um operador $O(\vec{x})$ é essencial usarmos configurações \vec{x} não correlacionadas de modo a obtermos uma boa amostragem do espaço de configurações. Para um grande número de sistemas $\xi_t \sim \xi^2$. Isto significa que próximo da criticalidade precisamos gerar $\xi^2 \sim L^2$ novas configurações até obtermos uma outra não correlacionada. Este resultado pode ser entendido. Para mudar uma configuração crítica de tamanho ξ as flutuações térmicas devem percorrer a distância ξ . Em muitos processos estocásticos a propagação de flutuações se dá através de um passeio aleatório e é sabido que para um passeio aleatório percorrer uma distância ξ são necessários da ordem de ξ^2 passos. Este fenômeno, conhecido como **desaceleração crítica** (*critical slowing down*), é um grande empecilho na simulação de sistemas críticos.

Em uma boa simulação de Monte Carlo devemos, após o sistema termalizar, calcular a função de relaxação, $C(t)$, definida através da expressão

$$C(t) = \frac{\langle O(t'+t)O(t') \rangle - \langle O(t'+t) \rangle \langle O(t') \rangle}{\langle O^2(t') \rangle - \langle O(t') \rangle^2}, \quad (7.16)$$

onde O é o operador cujo valor esperado queremos determinar. Para t sufi-

cientemente grande

$$C(t) \sim e^{-t/\xi_t} . \quad (7.17)$$

Próximo da temperatura crítica de uma transição de fase de segunda ordem

$$\xi_t \sim L^z , \quad (7.18)$$

ou seja, a correlação temporal é controlada pelo **expoente crítico dinâmico** z . Conforme já mencionamos, para o algoritmo de Metropolis $z = 2$.

Em transições de fase de primeira ordem, os algoritmos usuais também apresentam um desempenho ruim. Devido à **metaestabilidade**, a simulação fica aprisionada em alguns poucos estados e novamente não conseguimos uma amostragem significativa do espaço de configurações. A metaestabilidade também se manifesta em sistemas físicos reais não sendo uma peculiaridade das simulações numéricas. O exemplo mais conhecido talvez seja o das curvas de histerese em materiais ferromagnéticos.

Assim, justamente nas regiões mais interessantes do diagrama de fases— as fronteiras de fases—os algoritmos convencionais não apresentam um bom desempenho.

7.4 Algoritmos de *cluster*

Uma das causas da ineficiência do algoritmo de Metropolis para lidar com transições de fase decorre do fato das mudanças serem locais. No modelo de Ising, por exemplo, apenas um spin é modificado de cada vez. Pode parecer que a solução deste problema é extremamente simples, bastando alterar muitos spins simultaneamente. Isto não é verdade, as mudanças de grandes blocos de spins vão ser na maior parte das vezes rejeitadas, e quando aceitas levarão o sistema para muito longe da região de configurações típicas para os valores de parâmetros (temperatura, campo magnético, etc) considerados. Veremos que a solução está de fato na mudança simultânea de blocos inteiros de spin, mas escolhidos criteriosamente.

Por muito tempo tentou-se associar o aparecimento de uma magnetização espontânea em modelos de spins à percolação de algum tipo de “*cluster* físico” (nesta introdução seguiremos a apresentação de De Meo e colaboradores [35]). A ideia mais simples consiste em identificar estes *clusters* físicos com os *clusters* geométricos, formados por spins de mesmo sinal e onde cada spin tem

pelo menos um primeiro vizinho com o mesmo sinal. Entretanto, esta identificação não funciona. Para o modelo de Ising tridimensional os *clusters* geométricos percolam a uma temperatura T_p menor do que a temperatura crítica T_c , $T_p \approx 0.96T_c$. No modelo de Ising bidimensional, a percolação dos *clusters* físicos ocorre em $T = T_c$. Porém, mesmo neste caso há dificuldades. A suscetibilidade de percolação

$$\chi_p = \sum_{l < \infty} l^2 n_l, \quad (7.19)$$

onde n_l é o número de *clusters* de tamanho l , deveria divergir para $T \rightarrow T_c$ como $\chi_T \sim (1 - T/T_c)^{-\gamma_p}$, com $\gamma_p = \gamma$, onde γ é o expoente da suscetibilidade térmica. Porém, expansões em séries mostram que $\gamma_p > \gamma$.

O problema de identificar os *clusters* físicos, em relação aos quais a transição de fase pode ser vista como uma transição de percolação, só foi resolvido com o trabalho de Fortuin e Kasteleyn [36], onde foi mostrado a relação entre as funções de partição e de correlação do modelo de Potts de q estados e as do modelo de percolação de ligações correlacionadas (*random cluster model*) que é indexado com um parâmetro real q . Este mapeamento permite interpretar geometricamente várias propriedades do sistema de spins na criticalidade. Por exemplo, para modelo de Ising (modelo de Potts com $q = 2$) a transição entre as fases paramagnética e ferromagnética coincide com o aparecimento do *cluster* “infinito” no modelo de percolação com $q = 2$; e o valor da suscetibilidade é igual ao tamanho médio do *cluster* no modelo de percolação.

Os primeiros a explorar este mapeamento para construir um algoritmo de Monte Carlo extremamente eficiente foram Swendsen e Wang [37]. Este algoritmo faz mudanças não locais mudando vários blocos de spins simultaneamente. A grande diferença é que este algoritmo identifica corretamente os blocos que podem ser mudados, ao contrário da versão ingênua onde estes blocos são escolhidos sem nenhum critério. A dinâmica de Swendsen e Wang preserva a ergodicidade, o balanço detalhado e reduz consideravelmente a desaceleração crítica.

A ideia de Swendsen e Wang foi estendida por Wolff [38] para spins contínuos. Existem várias propostas de algoritmos de *cluster* para sistemas de spins (veja as refs. [39] e [40]). Um exemplo é o *invaded cluster algorithm* proposto por Machta e colaboradores [41]. Este algoritmo, ao contrário de todos os outros mencionados, só funciona na temperatura crítica, porém, tem o mérito de, independentemente da temperatura de saída, se autoajustar

até atingir T_c , podendo portanto ser usado para determinar a temperatura crítica.

Existem alternativas aos algoritmos de *cluster* para lidar com a desaceleração crítica e a metaestabilidade. A primeira delas foi proposta por Batriouni e Svetitsky [42] e utiliza o método da aceleração de Fourier em equações de Langevin. O problema desta técnica é que ela só pode ser implementada exatamente em teorias livres. Berg e Neuhaus [43] desenvolveram um algoritmo multi-canônico que primeiramente modifica a ação do sistema de forma a eliminar as barreiras de potencial entre os mínimos, facilitando o tunelamento entre as várias fases; em seguida a ação original do sistema é recuperada com o auxílio do método de histogramas introduzido por Salzburg e colaboradores [44] e popularizado por Swendsen e Ferrenberg [45]. Este método consiste em construir primeiramente um histograma $\Omega(E, M)$ que fornece o número de configurações com energia E e magnetização M . Em seguida, calcula-se através de uma simulação de Monte Carlo o valor da grandeza que se quer obter para um valor da temperatura T e do campo H . As informações contidas no histograma e nesta simulação permitem calcular o valor da grandeza para outros valores de T e H . Porém, à medida que nos afastamos das vizinhanças dos valores iniciais a qualidade começa a se deteriorar. Nas extremidades do histograma os resultados são muito ruins. Oliveira, Pena e Herrmann [46] propuseram uma alternativa, o método do histograma largo, que não sofre as limitações provenientes da amostragem mais pobre das extremidades do histograma. Marinari e Parisi [47] apresentaram outro método original, o *simulated tempering*, no qual a temperatura é promovida a uma variável dinâmica tomando valores dentro de um conjunto escolhido apropriadamente. Desta forma pode-se aproveitar o fato de que a altura entre barreiras de potencial diminui com o aumento de temperatura para estimular a transição entre vários mínimos.

Nesta resenha nos concentraremos nos algoritmos de *cluster*. Para dar uma ideia de seu funcionamento apresentaremos o algoritmo de Wolff dentro do contexto do modelo de Ising a campo nulo. Por conveniência vamos escrever a hamiltoniana da seguinte forma

$$\beta H = -K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, \quad (7.20)$$

onde $K \equiv \beta J$.

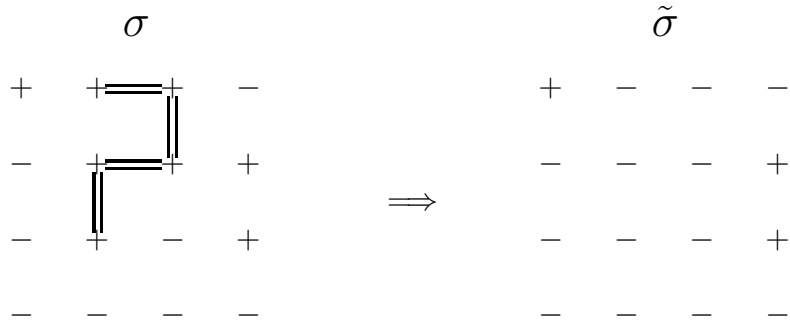


Figura 7.1: Exemplo de um *cluster* construído e modificado com o algoritmo de Wolff. As linhas duplas entre os spins representam as ligações ativadas. As configurações antes e depois da mudança são denotadas por σ e $\tilde{\sigma}$, respectivamente.

Algoritmo de Wolff

1. Sorteia-se um sítio (*semente*) aleatoriamente.
2. Ligações entre a semente e seus primeiros vizinhos de mesmo sinal são ativadas com probabilidade $p = 1 - e^{-2K}$. Se isto for feito com sucesso o vizinho é incorporado ao *cluster*.
3. O *cluster* cresce repetindo-se o passo 2 para cada novo spin adicionado, com o novo spin fazendo o papel da semente do passo 1.
4. Quando o *cluster* parar de crescer, ele é virado com probabilidade 1.

Este processo é exemplificado na fig. 7.1. Observe que as ligações ativadas não formam *loops* fechados. Isto ocorre porque uma vez que o spin é incorporado ao *cluster* ele não mais testado. Vamos mostrar que este algoritmo satisfaz balanço detalhado. É conveniente reescrever a condição de balanço detalhado como

$$\frac{e^{\beta H_\sigma}}{e^{\beta H_{\tilde{\sigma}}}} = \frac{W(\sigma \rightarrow \tilde{\sigma})}{W(\tilde{\sigma} \rightarrow \sigma)}. \quad (7.21)$$

Note que ao virarmos o *cluster* as únicas ligações (produtos $S_i S_j$) que se alteram são aquelas entre um spin do *cluster* e outro spin fora dele. Vamos denotar o número total destas ligações na fronteira do *cluster* por ℓ_{ij} , onde o primeiro índice representa o sinal do spin dentro do *cluster* e o segundo índice

o sinal do spin fora do *cluster*. Assim, $\ell_{+-} \neq \ell_{-+}$. Supondo, por exemplo, que o *cluster* é formado de spins $+$, como o da fig. 7.1, podemos escrever

$$\frac{e^{\beta H_\sigma}}{e^{\beta H_{\tilde{\sigma}}}} = \frac{e^{-K\ell_{++}+K\ell_{+-}}}{e^{-K\tilde{\ell}_{-+}+K\tilde{\ell}_{--}}}, \quad (7.22)$$

onde as quantidades com um til referem-se à configuração $\tilde{\sigma}$. Como $\tilde{\ell}_{-+} = \ell_{++}$ (lembre-se que cada ligação de fronteira $-+$ na configuração $\tilde{\sigma}$ originou-se de uma ligação $++$ na configuração σ) e $\ell_{+-} = \tilde{\ell}_{--}$, podemos reescrever a eq. (7.22) como

$$\frac{e^{\beta H_\sigma}}{e^{\beta H_{\tilde{\sigma}}}} = \frac{e^{-2K\ell_{++}}}{e^{-2K\tilde{\ell}_{--}}}. \quad (7.23)$$

Vamos, agora, calcular a razão entre as probabilidades de transição:

$$\frac{W(\sigma \rightarrow \tilde{\sigma})}{W(\tilde{\sigma} \rightarrow \sigma)} = \frac{P_c p^{n_l} (1-p)^{\ell_{++}}}{\tilde{P}_c \tilde{p}^{\tilde{n}_l} (1-p)^{\tilde{\ell}_{--}}} = \frac{(1-p)^{\ell_{++}}}{(1-p)^{\tilde{\ell}_{--}}}, \quad (7.24)$$

onde P_c representa a probabilidade de escolher um spin do *cluster*; n_l é o número de ligações que devem ser ativadas para formar o *cluster*, p^{n_l} denota a probabilidade de ativar as ligações que formam o *cluster*; e o termo $(1-p)^{\ell_{++}}$ representa a probabilidade de *não* ativar ligações com spins da fronteira que têm o sinal correto e poderiam em princípio estar no *cluster*. Claramente, $P_c = \tilde{P}_c$ e $n_l = \tilde{n}_l$. Lembrando que $p = 1 - e^{-2K}$ chegamos a

$$\frac{W(\sigma \rightarrow \tilde{\sigma})}{W(\tilde{\sigma} \rightarrow \sigma)} = \frac{e^{-2K\ell_{++}}}{e^{-2K\tilde{\ell}_{--}}}. \quad (7.25)$$

Assim a razão entre as probabilidades de transição, eq. (7.25), é igual à razão entre os fatores de Boltzmann das duas configurações, eq. (7.23), e este fato, devido à eq. (7.21), implica que o balanço detalhado é satisfeito.

Espero com esta apresentação ter dado uma ideia dos princípios por trás dos algoritmos de *cluster*.

7.5 Monte Carlo variacional para sistemas quânticos

A base do método variacional proposto por Huse e Elser encontra-se em um belo trabalho de Marshall de 1955 sobre o estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg. Vale a pena apresentar as ideias básicas.

A hamiltoniana quântica do antiferromagneto é dada por

$$\mathcal{H} = 2J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4} \right), \quad (7.26)$$

onde

$$S_i^\alpha = \frac{1}{2} \sigma_i^\alpha, \quad \alpha = x, y, z, \quad (7.27)$$

e σ^x , σ^y e σ^z são as matrizes de Pauli.

Usando os operadores

$$\begin{aligned} S_i^+ &= S_i^x + iS_i^y, \\ S_i^- &= S_i^x - iS_i^y, \end{aligned} \quad (7.28)$$

e medindo \mathcal{H} em unidades de J podemos reescrever a eq. (7.26) como

$$\mathcal{H} = \underbrace{\sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)}_{\mathcal{H}^\pm} + 2 \underbrace{\sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^z S_j^z - 1/4)}_{\mathcal{H}^z}. \quad (7.29)$$

O estado fundamental do antiferromagneto quântico só é conhecido para a cadeia linear, tendo sido determinado por H. Bethe [48] em 1931. Para $d > 1$ só existem resultados aproximados.

Observe que o estado de Néel clássico

$$|+ - + - + - \dots \rangle \equiv |+\rangle |-\rangle |+\rangle |-\rangle |+\rangle |-\rangle \dots, \quad (7.30)$$

que é um produto de auto estados de S^z , $S^z|\pm\rangle = \pm 1/2|\pm\rangle$, não é um auto-estado de \mathcal{H} . De fato, lembre que o operador $S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+$ atuando sobre uma função de onda que é um produto de auto estados de S^z comuta um par de spins $+-$ nos sítios i e j e dá zero se os spins em i e j são iguais, enquanto que o operador $S_i^z S_j^z - 1/4$ fornece -1 se os sinais em i e j são opostos e 0 se eles são iguais. Denotando por N o número total de pares de spins $+-$ que são primeiros vizinhos, obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^\pm |+-+-+-\dots\rangle &= |-++-+-\dots\rangle + |++--+-\dots\rangle + \dots, \\ \mathcal{H}^z |+-+-+-\dots\rangle &= -N |+-+-+-\dots\rangle. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Como $\mathcal{H} = \mathcal{H}^\pm + \mathcal{H}^z$, concluímos que o estado de Néel clássico não é autovetor de \mathcal{H} .

Marshall mostrou, seguindo uma sugestão de Peierls, que para modelos de Heisenberg com spin-1/2 em redes bipartidas (redes que podem ser divididas em duas sub-redes de tal forma que os vizinhos de um spin em uma rede são todos spins da outra rede, como por exemplo, a cadeia linear, a rede quadrada, a cúbica, etc) se escolhermos uma base $|\alpha\rangle$ de auto estados de $S^z = \sum_i S_i^z$, então o estado fundamental $|0\rangle$ se escreve como

$$|0\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle = c_1 |+\rangle |+\rangle \dots |+\rangle + c_2 |-\rangle |+\rangle \dots |+\rangle \dots, \quad (7.32)$$

onde

$$c_{\alpha} = (-1)^{n_B(\alpha)} a_{\alpha}, \quad (7.33)$$

e $n_B(\alpha)$ é o número de spins $-$ na sub-rede B (estamos dividindo a rede bipartida em uma sub-rede A e uma sub-rede B), e os a_{α} são todos **reais e positivos** (também podem ser escolhidos todos reais e negativos). Denominaremos o fator $(-1)^{n_B(\alpha)}$ de fase de Marshall-Peierls.

Vamos demonstrar esta propriedade usando a desigualdade

$$\frac{\langle 0|\mathcal{H}|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} \leq \frac{\langle \phi|\mathcal{H}|\phi\rangle}{\langle \phi|\phi\rangle}, \quad (7.34)$$

onde $|0\rangle$ é a função de onda do estado fundamental do sistema e $|\phi\rangle$ é qualquer outra função de onda.

Usando a eq. (7.32) podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{\langle 0|\mathcal{H}|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} &= \frac{\sum_{\alpha,\beta} \langle \beta|\mathcal{H}|\alpha\rangle c_{\beta}^* c_{\alpha}}{\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2} \\ &= \frac{\sum_{\alpha,\beta} \langle \beta|\mathcal{H}^{\pm}|\alpha\rangle c_{\beta}^* c_{\alpha} + \sum_{\alpha,\beta} \langle \beta|\mathcal{H}^z|\alpha\rangle c_{\beta}^* c_{\alpha}}{\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2} \\ &= \frac{\sum_{\alpha} (\sum_{\tilde{\alpha}} c_{\tilde{\alpha}}^* c_{\alpha} - N_{\alpha} |c_{\alpha}|^2)}{\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2}, \end{aligned} \quad (7.35)$$

onde N_{α} é o número de pares $+-$ que são primeiros vizinhos em $|\alpha\rangle$. A última passagem na eq. (7.35) decorre dos seguintes fatos: (a) o operador \mathcal{H}^{\pm} , para cada estado $|\alpha\rangle$, gera um estado que é a soma sobre todos estados $|\tilde{\alpha}\rangle$ que diferem de $|\alpha\rangle$ apenas pela permutação de um par $+-$ (veja a eq. (7.31), a soma sobre $\tilde{\alpha}$ é precisamente sobre estes estados; (b) o operador \mathcal{H}^z ao atuar sobre o estado $|\alpha\rangle$ simplesmente conta o número de pares $+-$ que

são vizinhos. Portanto, $\sum_{\tilde{\alpha}} 1 = N_{\alpha}$ e podemos reescrever a eq. (7.35),

$$\frac{\langle 0|\mathcal{H}|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} = \frac{\sum_{\alpha} \sum_{\tilde{\alpha}} (c_{\tilde{\alpha}}^* c_{\alpha} - |c_{\alpha}|^2)}{\sum_{\alpha} |c_{\alpha}|^2}. \quad (7.36)$$

É conveniente fazer com que ambos os termos do numerador da eq. (7.36) tenham o mesmo sinal. Para isto definimos a_{α} através da expressão

$$c_{\alpha} = (-1)^{2n_B(\alpha)} c_{\alpha} \equiv (-1)^{n_B(\alpha)} a_{\alpha}, \quad (7.37)$$

e denotamos o número de spins $-$ na sub-rede B por $n_B(\alpha)$. Note que

$$c_{\tilde{\alpha}}^* c_{\alpha} = (-1)^{n_B(\alpha) + n_B(\tilde{\alpha})} a_{\tilde{\alpha}}^* a_{\alpha}. \quad (7.38)$$

Lembrando que os estados $|\tilde{\alpha}\rangle$ são obtidos do estado $|\alpha\rangle$ permutando um par $+-$ em sítios vizinhos, concluimos que $n_B(\alpha) = n_B(\tilde{\alpha}) \pm 1$ e portanto $n_B(\alpha) + n_B(\tilde{\alpha})$ é ímpar. Assim,

$$\frac{\langle 0|\mathcal{H}|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} = \frac{-\sum_{\alpha} \sum_{\tilde{\alpha}} (a_{\tilde{\alpha}}^* a_{\alpha} + |a_{\alpha}|^2)}{\sum_{\alpha} |a_{\alpha}|^2} = E_0. \quad (7.39)$$

Usando a eq. (7.34) e escolhendo $|\phi\rangle$ igual ao estado de Néel clássico obtemos

$$\frac{\langle 0|\mathcal{H}|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} \leq \frac{\langle +-+-\dots|\mathcal{H}|+-+-\dots\rangle}{\langle +-+-\dots|+-+-\dots\rangle} = -N < 0, \quad (7.40)$$

onde graças à eq. (7.31) vemos que apenas \mathcal{H}^z contribui.

Comparando as eqs. (7.40) e (7.39) concluimos que $E_0 < 0$, isto por sua vez implica que a dupla soma sobre α e $\tilde{\alpha}$ na eq. (7.39) é positiva e portanto igual ao seu módulo. Desta forma

$$\begin{aligned} \frac{\langle 0|\mathcal{H}|0\rangle}{\langle 0|0\rangle} &= \frac{-|\sum_{\alpha} \sum_{\tilde{\alpha}} (a_{\tilde{\alpha}}^* a_{\alpha} + |a_{\alpha}|^2)|}{\sum_{\alpha} |a_{\alpha}|^2} \\ &\geq \frac{-\sum_{\alpha} \sum_{\tilde{\alpha}} (|a_{\tilde{\alpha}}^*| |a_{\alpha}| + |a_{\alpha}|^2)}{\sum_{\alpha} |a_{\alpha}|^2}. \end{aligned} \quad (7.41)$$

Se os a_{α} não forem da forma $|a_{\alpha}|e^{i\phi}$, onde a fase ϕ é a mesma para todos os valores de α , então a desigualdade seria estrita. Porém, neste caso o estado obtido de $|0\rangle$ (veja a eq. (7.32)) substituindo-se todos os c_{α} por $(-1)^{n_B(\alpha)}|a_{\alpha}|$ forneceria uma energia *menor* do que E_0 o que contraria

a hipótese de $|0\rangle$ ser o estado fundamental. Desta forma, deve valer a igualdade na eq. (7.41) e $c_\alpha = (-1)^{n_B(\alpha)}|a_\alpha|$ (a fase global $e^{i\phi}$ é irrelevante para a função de onda).

A fase de Marshall-Peierls que parece um tanto misteriosa tem uma interpretação simples, descoberta por Thouless. Começemos reescrevendo $|0\rangle$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \sum_{\alpha} (-1)^{n_B(\alpha)} a_{\alpha} |\alpha\rangle \\ &= \sum_{\alpha} \exp \left[i\pi \sum_{i \in B} (S_i^z - 1/2) \right] a_{\alpha} |\alpha\rangle . \end{aligned} \quad (7.42)$$

Vamos analisar apenas a fase. Para eliminar a restrição de soma sobre os sítios da sub-rede B, na exponencial da eq. (7.42), introduzimos a função θ_B definida como

$$\theta_B(k) = \begin{cases} 0 & \text{se } k \notin B \\ 1 & \text{se } k \in B \end{cases} , \quad (7.43)$$

de modo que

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \exp \left[i\pi \sum_{i \in B} (S_i^z - 1/2) \right] |\alpha\rangle &= \sum_{\alpha} \exp \left[i\pi \sum_k (S_k^z - 1/2) \theta_B(k) \right] |\alpha\rangle \\ &= \prod_k \left\{ \sum_{\alpha_k} \exp [i\pi (S_k^z - 1/2) \theta_B(k)] |\alpha_k\rangle \right\} \\ &= \prod_{k \in A} (|+\rangle + |-\rangle) \prod_{k \in B} (|+\rangle - |-\rangle) . \end{aligned} \quad (7.44)$$

Finalmente, recordando que

$$S^x(|+\rangle \pm |-\rangle) = \pm 1/2(|+\rangle \pm |-\rangle) , \quad (7.45)$$

ou seja $|+\rangle \pm |-\rangle$ são auto estados de S^x , vemos que a fase de Marshall-Peierls representa um estado de Néel clássico onde os spins apontam na direção x . Por exemplo, para uma cadeia de spins ao longo da direção z podemos representar a fase como na fig. 7.2.

Fizemos uma apresentação razoavelmente detalhada da fase de Marshall-Peierls porque ela vai ser essencial para o entendimento da função de onda variacional da cadeia quântica com competição entre interações ferromagnéticas e paramagnéticas que apresentaremos mais adiante.

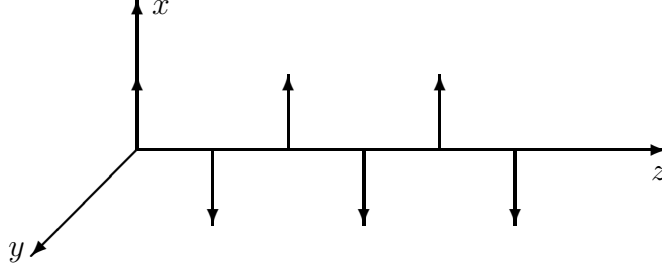


Figura 7.2: Representação da fase de Marshall-Peierls para uma cadeia de spins ao longo da direção z .

Após esta longa introdução, estamos em condições de entender o método variacional proposto por Huse e Elser. Primeiramente escrevemos a função de onda variacional como

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} e^{\tilde{H}/2} |\alpha\rangle, \quad (7.46)$$

onde o conjunto de estados $\{|\alpha\rangle\}$ forma uma base ortonormal completa. \tilde{H} é diagonal nesta base,

$$\tilde{H}|\alpha\rangle = \lambda_{\alpha}|\alpha\rangle, \quad (7.47)$$

e contém os parâmetros variacionais. \tilde{H} não precisa ser hermitiano.

O valor esperado de um operador O na função de onda $|\psi\rangle$ é dado por

$$\begin{aligned} \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} &= \frac{\sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | e^{\tilde{H}^{\dagger}/2} O e^{\tilde{H}/2} | \beta \rangle}{\sum_{\alpha, \beta} \langle \alpha | e^{\tilde{H}^{\dagger}/2} e^{\tilde{H}/2} | \beta \rangle} \\ &= \frac{\sum_{\alpha, \beta} e^{\lambda_{\alpha}^*/2} O_{\alpha\beta} e^{\lambda_{\beta}/2}}{\sum_{\alpha} e^{Re(\lambda_{\alpha})}} = \frac{\sum_{\alpha} e^{Re(\lambda_{\alpha})} \sum_{\beta} O_{\alpha\beta} e^{(\lambda_{\beta} - \lambda_{\alpha})/2}}{\sum_{\alpha} e^{Re(\lambda_{\alpha})}}, \end{aligned} \quad (7.48)$$

onde $Re(\lambda_{\alpha})$ significa a parte real de λ_{α} . Examinando a eq. (7.48) percebemos que $e^{Re(\lambda_{\alpha})}$ desempenha o papel de um fator de Boltzmann e que a eq. (7.48) nada mais é do que o valor esperado do operador $\sum_{\beta} O_{\alpha\beta} e^{(\lambda_{\beta} - \lambda_{\alpha})/2}$ em um ensemble onde a configuração α aparece com uma probabilidade proporcional a $e^{Re(\lambda_{\alpha})}$. Este tipo de média é facilmente calculada através das técnicas de Monte Carlo que discutimos nas seções 7.1 e 7.2.

Huse e Elser levaram em conta a fase de Marshall-Peierls escolhendo a parte imaginária de \tilde{H} como

$$Im(\tilde{H}/2) = \pi \sum_{i \in B} (1/2 - S_i^z), \quad (7.49)$$

com a soma restrita a spins na sub-rede B. As correlações quânticas são introduzidas na parte real de \tilde{H} que é escolhida da seguinte forma:

$$Re(\tilde{H}) = \sum_{i,j} K_{ij} S_i^z S_j^z , \quad (7.50)$$

onde K_{ij} é igual a K_1 se $|i - j| = 1$ e igual a K_2/r^σ se $|i - j| \equiv r > 1$. Os parâmetros variacionais são K_1 , K_2 e σ . Observe que as interações são de longo alcance devido ao termo $\propto 1/r^\sigma$. Mesmo usando o algoritmo mais simples —o de Metropolis—, as simulações consomem tempo. Felizmente, a região de parâmetros que minimiza a energia não está próxima de nenhuma transição de fase. Assim, não é necessária uma estatística muito grande para obtermos bons resultados.

Usando esta função de onda, com $K_1 = 2.6$, $K_2 = 1.9$ e $\sigma = 0.7$, Huse e Elser obtiveram uma energia para o estado fundamental igual a -0.3319 . Este valor é menos de 1% maior do que a melhor estimativa utilizando séries. Vamos discutir em mais detalhe as limitações desta função variacional quando apresentarmos nosso trabalho sobre como melhorá-la.

Capítulo 8

Trabalhos em Simulações Numéricas

8.1 Eliminating metastability in first-order phase transitions, *Phys. Rev. B* 54 (1996) 359.

Neste trabalho com M. B. Bouabci desenvolvemos um algoritmo de *cluster* para o modelo de Blume-Emery-Griffiths (BEG), descrito pela hamiltoniana

$$\beta\mathcal{H} = -K \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - M \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^2 S_j^2 + \Delta \sum_i S_i^2, \quad (8.1)$$

onde $S_i = \pm 1, 0$. Este modelo foi primeiramente empregado no contexto de superfluidez para estudar a separação de fases em misturas de hélio. Mais tarde foi usado para descrever fluidos com muitas componentes, misturas de cristais líquidos, microemulsões e ligas semicondutoras. Há portanto bastante interesse em desenvolver algoritmos eficientes para este modelo.

A generalização do esquema de Wolff, apresentado na seção 7.4, é bastante difícil e consumiu bastante tempo para ser feita. O problema principal reside no fato dos algoritmos de *cluster*, aplicados a sistemas de spins, só conseguirem mudar o sinal do spin. No BEG o spin também assume o valor 0 e as transições $\pm 1 \rightarrow 0$ envolvem a mudança do “módulo” de S , não apenas seu sinal. Para simplificar a notação colocaremos $+1 \equiv +$ e $-1 \equiv -$.

Depois de muitas tentativas infrutíferas nos convencemos de que não é possível fazer as transições entre spins \pm e 0 com *clusters* contendo um único

tipo de spin. Tivemos de admitir *clusters* com dois tipos de spins. Lembrese de que os *clusters* crescem através de um processo de ativação de ligações entre primeiros vizinhos. Cada vez que conseguimos ativar uma ligação entre um spin do *cluster* e um primeiro vizinho fora dele, o vizinho é incorporado ao *cluster*. Nosso algoritmo constrói os seguintes tipos de *clusters*:

1. *Clusters* apenas com spins +; probabilidade de ativação $P_W = 1 - e^{-2K}$; transição: $+ \rightarrow -$.
2. *Clusters* apenas com spins -; probabilidade de ativação $P_W = 1 - e^{-2K}$; transição: $- \rightarrow +$.
3. *Clusters* com spins + e 0, probabilidades de ativação: $P_{dif} = 1 - e^{-K+M/3}$ para ligações do tipo 0+, e $P_{eq} = 1 - e^{-K-M/3}$ para ligações dos tipos ++ e 00; transições: $+ \rightarrow 0$ e $0 \rightarrow -$.
4. *Clusters* com spins - e 0, probabilidades de ativação: $P_{dif} = 1 - e^{-K+M/3}$ para ligações do tipo 0-, e $P_{eq} = 1 - e^{-K-M/3}$ para ligações dos tipos -- e 00; transições: $- \rightarrow 0$ e $0 \rightarrow +$.

Para *clusters* dos tipos 3 e 4, depois da transição, a energia nas ligações no interior do *cluster* muda (isto não ocorre para o modelo de Potts com q estados, nem para o de Ising com spin-1/2 que corresponde ao caso $q = 2$). Assim, o *cluster* não pode ser modificado com probabilidade 1, mas com probabilidade $\exp(-\beta\Delta\mathcal{H}_{bulk})$, onde $\Delta\mathcal{H}_{bulk}$ é a diferença de energia dentro do *cluster*, para levar em conta este fato. Finalmente, note que o fato de permitirmos dois valores de spins dentro dos *clusters* com spins 0 não significa que não podemos eventualmente criar *clusters* apenas com spins 0. O que não podemos é *proibir* que em *clusters* com 0 entrem spins com outros sinais.

Examinando as probabilidades P_{dif} e P_{eq} verificamos que o algoritmo está restrito à região $-3 \leq M/K \leq 3$ do espaço de parâmetros. Entretanto, para $M/K \leq -1$ aparecem fases bastante complexas, como a fase quadrupolar, e possivelmente é necessária a introdução de novos tipos de *cluster*. Apesar disto, a região restante, $-1 < M/K \leq 3$, é suficientemente larga para conter cinco dos nove tipos possíveis de diagramas de fases do modelo BEG [49].

Nosso algoritmo elimina não apenas a desaceleração crítica em transições de segunda ordem, mas também a metaestabilidade em transições de primeira ordem. Devido a esta última propriedade, que permite determinar linhas de transições de primeira ordem e efetuar uma análise de tamanho finito com

grande precisão, acreditamos ter dado uma contribuição nova e original na área de simulações numéricas.

8.2 Hole spectrum in the two-dimensional Hubbard model, Physica C 166 (1990) 206.

Neste trabalho, feito em colaboração com M. J. de Oliveira, S. R. Salinas e G. V. Uimin, estudamos o espectro de um buraco na versão t - J do modelo de Hubbard, descrito pela hamiltoniana

$$H = -t \sum_{\sigma, \langle r, r' \rangle} c_{r'\sigma}^\dagger c_{r\sigma} + U \sum_r n_r^\uparrow n_r^\downarrow, \quad (8.2)$$

onde $c_{r\sigma}^\dagger$ ($c_{r\sigma}$) são operadores de criação (aniquilação) de férmions no sítio r , $\sigma = \uparrow, \downarrow$ representa a direção do spin, n_r^\uparrow (n_r^\downarrow) é o operador que fornece o número de férmions com spin \uparrow (\downarrow) no sítio r , e a somatória em r e r' é sobre primeiros vizinhos. No caso que analisamos, a repulsão coulombiana U é muito maior do que t e pode-se reescrever a eq. (8.2), no subespaço em que $n_r \equiv \sum_\sigma n_{r\sigma} \leq 1$, como

$$H_{t-J} = t \sum_{\sigma, \langle r, r' \rangle} X_r^{0\sigma} X_r^{\sigma 0} + J \sum_{\alpha, \beta, \langle r, r' \rangle} Z_r^{\alpha\beta} Z_r^{\beta\alpha}, \quad (8.3)$$

onde $J = 2t^2/U$, o operador $X_r^{0\sigma}$ aniquila um férmion com spin σ no sítio r e cria um buraco no mesmo sítio, $X_r^{\sigma 0}$ aniquila um buraco e cria um férmion em r , Z_r^{++} (Z_r^{--}) aplicado a uma auto função de S^x dá 1 se o spin aponta na direção positiva (negativa) e 0 caso contrário, e Z_r^{+-} (Z_r^{-+}) aumenta (diminui) a projeção do spin ao longo da direção x de uma unidade.

Os cálculos foram feitos para o caso em que $n_r = 1$ para todo r (banda semi-cheia). Neste caso o estado fundamental é o mesmo do antiferromagneto de Heisenberg com $S = 1/2$ para o qual temos a função de onda variacional de Huse e Elser.

A função de onda tentativa para o buraco é baseada em duas propriedades: longe do buraco a ordem antiferromagnética deve ser mantida, e o tamanho

¹Também denotamos o spin \uparrow por $+$ e o spin \downarrow por $-$.

do polaron não deve exceder dois espaçamentos da rede. Um conjunto de funções que satisfaz estas propriedades é dado por

$$|r\sigma\rangle = \left[f(r)X_r^{0\bar{\sigma}} + \sum_a g(r,a)X_r^{0\sigma}Z_{r+a}^{\sigma\bar{\sigma}} \right] |G\rangle, \quad (8.4)$$

onde $\bar{\sigma} = -\sigma$, a denota os vetores da rede, e $|G\rangle$ é o estado fundamental. Assim, para escrever a função de onda em r de um buraco com spin σ usamos dois mecanismos: se em r existe um férmion com spin $-\sigma$ ele é aniquilado (primeiro termo na eq.(8.4)); se o férmion em r tenha um spin σ , antes de aniquilá-lo mudamos o spin de um férmion vizinho com spin $-\sigma$, de forma a garantir que o estado resultante tem spin σ (o termo com a somatória na eq. (8.4)). Os coeficientes f e g são os parâmetros variacionais deste problema. A dependência em r se refere apenas às sub-redes magnéticas A e B . Assim, o conjunto de parâmetros variacionais é dado por $\{f_A, g_{A,a}, f_B, g_{B,a}\}$.

A função de onda de Bloch é definida como

$$|k\sigma\rangle = S_k \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_r \exp(ikr) |r\sigma\rangle, \quad (8.5)$$

onde S_k é utilizada para normalizar a função $|k\sigma\rangle$.

O espectro de energia de um buraco é dada pela expressão

$$\epsilon(k) = \langle \sigma k | H_{t-J} | k\sigma \rangle. \quad (8.6)$$

Além da função de onda de Huse e Elser utilizamos também neste trabalho uma função de Hartree. Os resultados obtidos foram qualitativamente semelhantes nos dois casos. Finalmente, é interessante mencionar que este modelo simples pode ser usado para estudar a dopagem de elétrons nos planos de CuO_2 de materiais supercondutores a altas temperaturas.

8.3 Improved variational wave function for the two-dimensional spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet, Phys. Rev. B 49 (1994) 3303.

Fizemos este trabalho em colaboração com Xian-Jun Kong e Robert H. Swendsen da Universidade de Carnegie Mellon. Descrevemos em detalhe,

na seção 7.5, a função de onda variacional de Huse e Elser para o estado fundamental do antiferromagneto de Heisenberg. Nesta seção discutiremos suas limitações.

A energia do estado fundamental obtida com a função de Huse e Elser praticamente concorda com a estimativa de séries, -0.334 ± 0.001 . O problema está na magnetização *staggered*, definida como

$$m_\alpha^\dagger = \frac{1}{N} \sum_i \epsilon_i S_i^\alpha, \quad \alpha = x, y, z, \quad (8.7)$$

onde $\epsilon_i = \pm 1$ dependendo da sub-rede à qual o sítio i pertence. É conveniente escrever também o módulo da magnetização *staggered*:

$$m^\dagger \equiv \left[(m_x^\dagger)^2 + (m_y^\dagger)^2 + (m_z^\dagger)^2 \right]^{1/2}. \quad (8.8)$$

A função de Huse e Elser em uma rede de 40×40 fornece $m_x^\dagger = 0.35$, ou seja, 71% do valor de saturação que é igual a 0.5. Além disto, $m_x^\dagger \gg m_y^\dagger, m_z^\dagger$ com $m_y^\dagger \neq m_z^\dagger$, e portanto viola a simetria rotacional do estado fundamental. A estimativa de séries fornece $m_x^\dagger = 0.313/\sqrt{3} \approx 0.18$, o fator $\sqrt{3}$ é devido à invariância rotacional. O fato da magnetização *staggered*, obtida com a função variacional, se alinhar com o eixo x está relacionada com a fase de Marshall e Peierls que essencialmente é uma função de Néel clássica com toda a magnetização *staggered* ao longo desta direção.

Neste trabalho conseguimos melhorar a simetria rotacional do problema obtendo $m_x^\dagger = m_y^\dagger \gg m_z^\dagger$. Em palavras, restauramos a simetria rotacional no plano x - y . Isto foi feito explorando o fato do estado fundamental ser um singlete e podermos, portanto, restringir a simulação ao subespaço de estados com $S_{total}^z = 0$. O sucesso foi parcial. Quanto a m^\dagger a versão original e a nossa fornecem $m^\dagger \approx 0.35$, cerca de 12% maior do que a estimativa de séries. Também discutimos em detalhe técnicas para minimizar a energia com o vínculo $m_x^\dagger = m_z^\dagger$. Mostramos que o grande problema com estas técnicas decorre dos erros numéricos.

8.4 Ground-State Energy of a Quantum Chain with Competing Interactions, *J. Stat. Phys.* **79** (1995) 347.

Neste trabalho, feito em a colaboração de M. J. de Oliveira e W. F. Wreszinski, estudamos a cadeia quântica com interações competitivas descrita pela hamiltoniana

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_N(p, \Delta) = & - \sum_{i=1}^N \{S_i^x S_{i+1}^x + \Delta(S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z)\} \\ & + p \sum_{i=1}^N \{S_i^x S_{i+2}^x + \Delta(S_i^y S_{i+2}^y + S_i^z S_{i+2}^z)\} \end{aligned} \quad (8.9)$$

com $0 \leq \Delta \leq 1$ e $p > 0$. $\mathcal{H}_N(p, 0)$ descreve o modelo ANNNI clássico unidimensional, enquanto que $\mathcal{H}_N(p, 1)$ representa o modelo quântico isotrópico. Nossa motivação principal foi investigar como as flutuações quânticas alteram os estados fundamentais clássicos. É importante enfatizar que devido à interação entre segundos vizinhos o método do *Ansatz* de Bethe não pode ser aplicado. Abordamos o problema utilizando várias técnicas: o método de Baader e Schilling, ondas de spin e uma função de onda variacional do tipo proposto por Huse e Elser. Vamos nos concentrar nesta última.

Conforme mencionamos, o ingrediente fundamental da função de onda variacional é a fase clássica introduzida através da parte imaginária de \tilde{H} (veja a eq. (7.49)). Para o antiferromagneto de Heisenberg com spin-1/2, Marshall determinou esta fase. Porém, para a cadeia quântica não existe nenhuma demonstração análoga. Neste trabalho conjecturamos que a parte imaginária de \tilde{H} deve ser escolhida de tal forma que forneça o estado fundamental clássico.

Na cadeia clássica, devido à competição, aparece um ordenamento helicoidal. Os spins clássicos rodam à medida em que caminhamos ao longo da cadeia. Podemos fazer o iésimo spin apontar para a direção dada pelo ângulo ϕ_i usando uma base de auto-estados de S^z e escolhendo

$$Im \left(\frac{\tilde{H}}{2} \right) = \sum_{i=0}^{N-1} \phi_i S_i^z . \quad (8.10)$$

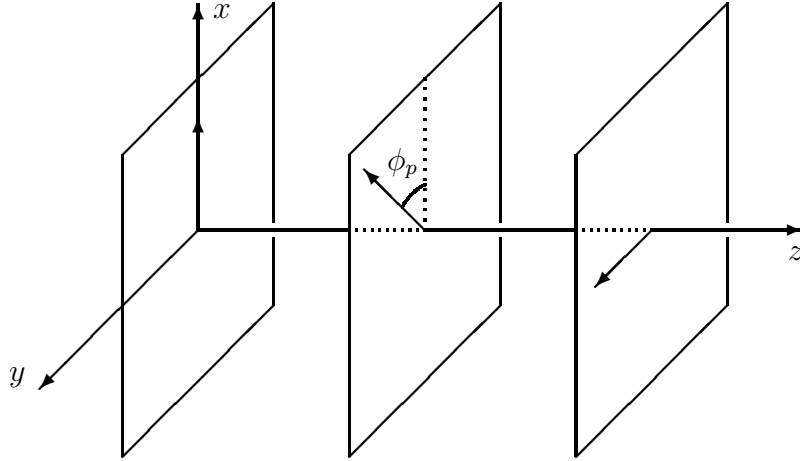


Figura 8.1: Representação da fase de Marshall-Peierls para uma cadeia de spins com interações competitivas. Note que os spins rodam de um ângulo ϕ_p à medida que caminhamos sobre o eixo z .

Para a parte real de \tilde{H} adotamos a escolha de Huse e Elser. Portanto,

$$\frac{\tilde{H}}{2} = \sum_{k=0}^{N-1} \phi_k S_k^z + \frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{i,j} S_i^z S_j^z \quad (8.11)$$

Os ângulos ϕ_k são obtidos do estado fundamental do sistema de Heisenberg clássico descrito pela hamiltoniana (8.9) mas onde os S_i^α são componentes de um vetor unitário clássico. No caso isotrópico ($\Delta = 1$) obtemos

$$\phi_k = k\phi_p \quad , \quad \phi_p = \cos^{-1} \left(\frac{1}{4p} \right) \quad , \quad (8.12)$$

ou seja, o ângulo de rotação é constante e temos um ordenamento helicoidal, como esquematizamos na fig. 8.1.

Capítulo 9

Conclusões e perspectivas

Apresentamos nesta resenha uma visão geral das transições de fase e discutimos em detalhe três abordagens complementares: campo médio, teoria de campos e simulações numéricas. É importante enfatizar que, apesar dos estudos experimentais e teóricos nesta área terem começado no século passado, ainda há muito por fazer.

No que se refere a fenômenos críticos, mesmo usando as técnicas de grupo de renormalização, há toda uma série de problemas não resolvidos ligados a sistemas com um ponto de Lifshitz. Em meu trabalho com C. Mergulhão mostramos como abordar o ponto de Lifshitz (PL) utilizando teoria de campos. Calculamos expressões gerais para os expoentes críticos que valem para PLs com qualquer valor de m (dimensão do subespaço α), porém só conseguimos calcular até ordem 2 -loops os diagramas de Feynman para os casos $m = 2$ e $m = 6$. Como já discutimos, as dificuldades técnicas, devido à falta de invariância rotacional e da presença de um termo quártico no propagador, são enormes. Para a classe mais interessante, com $m = 1$, à qual o MnP pertence, ainda não conseguimos calcular diagramas com 2 -loops. Becerra e Bindilatti efetuaram medidas das razões de amplitudes críticas para o MnP e seus resultados estão em desacordo com os cálculos teóricos. Para calcular estas razões até ordem ϵ^n é necessária a determinação dos expoentes até ordem ϵ^{n+1} . Como para o caso $m = 1$ os expoentes são conhecidos apenas em ordem ϵ , as amplitudes só podem ser determinadas até ordem ϵ^0 . Especula-se que a determinação da próxima ordem perturbativa leve os resultados teóricos mais perto dos resultados experimentais. Outro problema que apenas começamos a abordar é o cálculo do expoente β_k , que controla como o vetor de onda das fases moduladas vai para zero quando nos aproximamos do PL sobre

a linha de segunda ordem. O problema é bastante complexo e envolve a renormalização de funções de Green com a inserção do operador $\phi\partial_\alpha^2\phi$ que é renormalizado matricialmente. Pretendemos atacar este problema no segundo semestre de 1999. Ainda dentro da área de teoria de campos, estamos, em colaboração de Cristiane M. L. de Aragão, adaptando para a teoria ϕ^4 uma técnica variacional proposta por Feynman e Kleinert para a mecânica quântica.

A área de simulações numéricas é aquela com mais problemas em aberto. Entre eles, gostaria de citar o tema que abordarei no segundo semestre de 1999: o desenvolvimento de algoritmos de *clusters* eficientes próximos de pontos tricríticos. Até hoje, não existe um único algoritmo que funcione bem nas vizinhanças de um ponto tricrítico. Este fato me foi confirmado por Alan Sokal, um físico matemático com uma enorme experiência na área de simulações numéricas. As causas deste problema não são conhecidas. Faremos este estudo no contexto de um dos modelos mais simples que apresentam pontos tricríticos: o modelo de Blume-Capel. Outro problema que vale a pena mencionar é o desenvolvimento de algoritmos de *clusters* para estudar fases complexas, como por exemplo a fase quadrupolar no modelo BEG ou as fases moduladas do modelo ANNNI. A pergunta que se coloca é a seguinte: É possível construir *clusters* para simular fases com estruturas complexas ou estes algoritmos servem apenas para estudar transições entre fases simples, tais como a (anti)ferromagnética e a paramagnética? Outra questão interessante é o desenvolvimento de uma teoria geral para os algoritmos de *clusters*. Atualmente a construção destes algoritmos é feita caso a caso de forma artesanal, e uma vez pronto é impossível prever sem um teste no computador se o algoritmo será eficiente ou não. Os problemas que citei são bastante ricos e fornecerão material de pesquisa suficiente para os próximos anos.

Gostaria de terminar esta resenha escolhendo dentro de cada uma das três abordagens apresentadas a contribuição que considero mais importante.

- **Campo Médio** - É surpreendente que se possa fazer algo original em campo médio, que vá além da aplicação de uma das várias técnicas existentes. Nosso trabalho sobre a equivalência entre diferentes expansões de Landau aborda a técnica em si, mostrando a equivalência entre duas abordagens superficialmente bem diferentes. Este era um problema que esperava por uma solução já há algum tempo.
- **Teoria de Campos** - Sem dúvida alguma a minha grande contribuição para esta área foram os dois trabalhos sobre o tratamento do ponto de

Lifshitz utilizando teoria de campos. Para calcular os expoentes críticos associados a este ponto multi-crítico tivemos de analisar a estrutura de renormalização do hamiltoniano proposto por Hornreich e colaboradores. Devido a falta de invariância rotacional e de um termo quártico no propagador, nenhuma das técnicas usuais de teoria de campos pode ser empregada diretamente. Tudo teve de ser adaptado. Nossa análise vale em todas as ordens de perturbação e pôs fim a um problema que perdurava há mais de vinte anos: a existência de resultados conflitantes para as correções de ordem ϵ^2 dos expoentes críticos. Para resolver qual aproximação era correta resolvemos o problema exatamente.

- **Simulações Numéricas** - Provavelmente o trabalho mais original que já fiz até hoje foi o desenvolvimento do algoritmo de *cluster* para o modelo BEG. Descobrimos uma dinâmica capaz de eliminar a desaceleração crítica em transições de segunda ordem e a metaestabilidade em transições de primeira ordem. Este último efeito permite eliminar efeitos de histerese e conseqüentemente determinar a posição de linhas de primeira ordem com grande precisão. A possibilidade de criar dinâmicas artificiais que não sofram efeitos de metaestabilidade é um assunto fascinante ao qual me dedicarei nos próximos anos.

Finalmente, para terminar, é preciso dizer que a escolha acima não significa que os outros trabalhos não sejam importantes ou originais. Simplesmente destaquei os que considero mais interessantes.

Referências Bibliográficas

- [1] T. Andrews, Phil. Trans. R. Soc. **159** (1869) 575.
- [2] P. Curie, Ann. Chim. Phys. **5** (1895) 289.
- [3] J. D. Van der Waals, “Over de continuïteit van den gas-en vloeistofoestand, Thesis”, Leiden, 1873.
- [4] J. C. Maxwell, Nature **10** (1874) 477.
- [5] P. Weiss, J. Phys. Radium (Paris) **6** (1907) 667.
- [6] W. Heisenberg, Z. Phys. **49** (1928) 619.
- [7] L. S. Ornstein e F. Zernike, Proc. Acad. Sci. Amsterdam **17** (1914) 793.
- [8] E. Ising, Z. Phys. **31** (1925) 253.
- [9] W. Lenz, Z. Phys. **21** (1920) 613.
- [10] R. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc. **32** (1936) 477.
- [11] L. D. Landau, Phys. Zurn. Sowjetunion **11**, 26 (1937) 545; veja também L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, New York, 1969).
- [12] L. Onsager, Phys. Rev. **65** (1944) 117.
- [13] B. Widom, J. Chem. Phys. **43** (1965) 3898.
- [14] K. G. Wilson, Phys. Rev. D **2** (1970) 1438; veja também K. G. Wilson e J. Kogut, Phys. Rept. C **12** 75.
- [15] E. C. G. Stueckelberg e A. Petermann, Helv. Phys. Acta **26** (1953) 499.

- [16] M. Gell-Mann e F. E. Low, *Phys. Rev.* **95** (1954) 1300.
- [17] L. Kadanoff, *Physics* **2** (1966) 263.
- [18] C. Domb e M. S. Green, eds., *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Academic Press, New York, 1974), Vol. 6.
- [19] E. Brézin, J. C. Le-Guillou e J. Zinn-Justin, em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editado por C. Domb e M. S. Green (Academic Press, New York, 1974), Vol 6.
- [20] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena* (World Scientific, Singapore, 1984).
- [21] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, e M. E. Newman, *The Theory of Critical Phenomena—An Introduction to the Renormalization Group* (Clarendon Press, Oxford, 1993).
- [22] J. L. Cardy em *Phase Transitions and Critical Phenomena*, editado por C. Domb e M. S. Green (Academic Press, New York, 1987), Vol 11.
- [23] P. Christe e M. Henkel, *Introduction to Conformal Invariance and its Applications to Critical Phenomena* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1993).
- [24] C. Borgs e R. Kotecky, *J. Stat. Phys.* **61** (1990) 79.
- [25] M. E. Fisher em *Critical Phenomena* editado por F. J. Hahne (Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 1983).
- [26] G. Toulouse e P. Pfeuty, *Introduction au Groupe de Renormalization et a ses Applications* (Presses Universitaires de Grenoble, Grenoble, 1975).
- [27] G. A. Baker Jr., *Quantitative Theory of Critical Phenomena* (Academic Press, San Diego, 1990).
- [28] T. Kaneyoshi e J. Mielnicki, *J. Stat. Phys.: Condens. Matter* **2** (1990) 8773.
- [29] A. J. Bray e M. A. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987) 57.
- [30] G. 't Hooft e M. Veltman, *DIAGRAMMAR*, preprint do CERN, agosto de 1973.

- [31] C. G. Bollini e J. J. Giambiagi, Phys. Letters **40B** (1972) 566.
- [32] G. 't Hooft e M. Veltman, Nucl. Phys. B**44** (1972) 189.
- [33] M. Creutz, *Quarks and Gluons on a Lattice* (Cambridge University Press, 1983).
- [34] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087.
- [35] Marco D'Onorio De Meo, Dieter W. Heermann e Kurt Binder, J. Stat. Phys. **60** (1990) 585.
- [36] P. W. Kasteleyn e C. M. Fortuin, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **26s** (1969) 11; C. M. Fortuin e P. W. Kasteleyn, Physica **57** (1972) 536.
- [37] R. H. Swendsen and J. -S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [38] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [39] P. R. A. Campos e R. N. Onody, Phys. Rev. B **56** (1997) 14529.
- [40] G. T. Barkema e M. E. J. Newman, em *Monte Carlo Methods in Chemical Physics* editado por D. Ferguson, J. I. Siepmann, e D. G. Truhlar (Wiley, New York, 1997).
- [41] J. Machta, Y. S. Choi, A. Lucke, T. Schweizer, e L. V. Chayes, Phys. Rev. Lett. **75** 2792.
- [42] G. G. Batrouni and B. Svetitsky, Phys. Rev. B **36**, 5647 (1987).
- [43] B. A. Berg and T. Neuhaus, Phys. Lett. B **267**, 249 (1991); Phys. Rev. Lett. **68**, 9 (1992).
- [44] Z. W. Salzburg, J. D. Jacobson, W. Fickett e W. W. Wood, J. Chem. Phys. **30** (1959) 65.
- [45] A. M. Ferrenberg e R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635.
- [46] P. M. C. de Oliveira, T. J. P. Pena e H. J. Herrmann, Brazilian J. Phys. **26** (1996) 683.
- [47] E. Marinari and G. Parisi, Europhys. Lett. **19** (6), 451 (1992).

[48] H. Bethe, Z. Physik **71** (1931) 205.

[49] W. Hoston e A. Nihat Berker, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 1027.

UNIVERSITY OF OXFORD

DEPARTMENT OF THEORETICAL PHYSICS

THERMAL REPLICA MIXING AND THE HARRIS

CRITERION FOR DISORDERED SYSTEMS

G. Jug and C. E. I. Carneiro

Department of Theoretical Physics
University of Oxford
1 Keble Road, Oxford, OX1 3NP, UK.

Ref: 64/82

Address: Department of Theoretical Physics
Keble Road,
Oxford,
OX1 3NP,
England.

THERMAL REPLICA MIXING AND THE HARRIS
CRITERION FOR DISORDERED SYSTEMS

G. Jug and C. E. I. Carneiro

Department of Theoretical Physics
University of Oxford
1 Keble Road, Oxford, OX1 3NP, UK.

Abstract

We present a rigorous proof of the Harris Criterion for dilute ferromagnets, as well as a physical interpretation in terms of replicas. Logarithmic corrections for the marginal 2D Ising case are also determined

The phenomenological Harris Criterion [1] states that the critical behaviour of a homogeneous ferromagnet will not change if impurities are introduced, provided the pure system's specific heat exponent, α_P , is negative. Renormalization Group (RG) studies [2, 3] confirm and implement this argument by suggesting an equivalence between the exponent α_P and the crossover exponent ϕ describing the departure from homogeneous critical behaviour. Consequently, new, random critical properties will appear in a system with $\alpha_P > 0$ when disorder is introduced. Hitherto, this mysterious equivalence between the two exponents has been supported only by an ϵ -expansion, indicating that in $4 - \epsilon$ dimensions $\phi = \alpha_P + O(\epsilon^4)$ [2, 3, 4]. It is of fundamental importance to show that $\phi = \alpha_P$ to all orders in ϵ and, beyond perturbation expansion, also for three- and two-dimensional systems, particularly when α_P is very close or equal to zero. A recent study [4] has in fact shown that perturbative treatments are inadequate in predicting the nature of the critical behaviour of randomly dilute systems for which $\alpha_P \approx 0$.

In this note we present the first rigorous non-perturbative proof of the above-stated equivalence. We consider the familiar [3, 4] site-diluted, classical, M -component spin model with short-ranged ferromagnetic spin interactions only. The critical properties of this model of a disordered system are described by the asymptotic behaviour of a field theory with Lagrangian [3, 4]:

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha=1}^n \left\{ \frac{1}{2} m_0^2 (\phi^\alpha)^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi^\alpha)^2 + \frac{\lambda_0}{4!} [(\phi^\alpha)^2]^2 \right\} - \frac{\Delta_0}{4!} \left[\sum_{\alpha=1}^n (\phi^\alpha)^2 \right]^2 \quad (1)$$

in the long wave-length limit and as $m_0^2 \propto T - T_c(p) \rightarrow 0$. The replica trick has been used to deal with this quenched model and the analytic continuation to $n = 0$ is always understood. Without the coupling Δ_0 , proportional to the impurity concentration $c = 1 - p$, the above Lagrangian merely represents the superposition of n identical non-interacting copies of the homogeneous system. Thus, the question of whether disorder modifies the pure system's

behaviour is equivalent to the field-theoretic question of whether the composite replica-mixing operator $A_1 = \frac{1}{4!} [\sum_{\alpha} (\phi^{\alpha})^2]^2$ is a relevant perturbation of the field theory:

$$\mathcal{L} = \sum_{\alpha=1}^n \left\{ \frac{1}{2} m_0^2 (\phi^{\alpha})^2 + \frac{1}{2} (\nabla \phi^{\alpha})^2 + \frac{\lambda_0}{4!} [(\phi^{\alpha})^2]^2 \right\}. \quad (2)$$

The procedure for handling this problem is by now standard [5]. The operator A_1 mixes, under renormalization, with the operators $A_2 = \frac{1}{4!} \sum_{\alpha} [(\phi^{\alpha})^2]^2$, $A_3 = \sum_{\alpha} \phi^{\alpha} \cdot \nabla^2 \phi^{\alpha}$ and $A_4 = \frac{1}{2!} \sum_{\alpha} \nabla^2 (\phi^{\alpha})^2$. Thus, we have a matrix of anomalous dimensions $\gamma_{ij}(u)$ and also four scaling dimensions $d_{\alpha} = d - 4 + \gamma_{\alpha}$, γ_{α} being the eigenvalues of $\gamma_{ij}(u)$ at the fixed point $u = u^*$ of the renormalized dimensionless coupling constant of (2). Three of these dimensions can be found without difficulty using standard techniques [5, 6] and are $d_2 = \omega_P$, $d_3 = 0$, and $d_4 = 2 - \nu_P^{-1}$, $\omega_P > 0$ and $\nu_P > 1/2$ being the pure system's correction to scaling and correlation length exponents respectively. Since d_2 , d_3 and d_4 are non-negative, it is the remaining dimension d_1 that determines the crossover exponent through $\phi = -\nu_P d_1$. We now prove that $d_1 = -\alpha_P/\nu_P$. This is a consequence of the fact that Lagrangian (2) is the sum of n identical non-interacting pure system's Lagrangians. Consider the effective replica-mixing operator $O_m = 3(A_1 - A_2) = \sum_{\alpha \neq \beta} A_{\alpha\beta}$, where $A_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (\phi^{\alpha})^2 (\phi^{\beta})^2$. If $\Gamma_{\alpha \dots \alpha \beta \dots \beta}^{(N_{\alpha} + N_{\beta}) A_{\alpha\beta}}$ represents the one-particle irreducible or vertex part of the Green function $\langle \phi_{\mu_1}^{\alpha}(k_1) \dots \phi_{\mu_{N_{\alpha}}}^{\alpha}(k_{N_{\alpha}}) \phi_{\nu_1}^{\beta}(q_1) \dots \phi_{\nu_{N_{\beta}}}^{\beta}(q_{N_{\beta}}) \rangle$ with one insertion of the operator $A_{\alpha\beta}$, then we see that:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\alpha \dots \alpha \beta \dots \beta}^{(N_{\alpha} + N_{\beta}) O_m}(k_1, \dots, k_{N_{\alpha}}; q_1, \dots, q_{N_{\beta}}) &= \Gamma_{\alpha \dots \alpha \beta \dots \beta}^{(N_{\alpha} + N_{\beta}) A_{\alpha\beta}}(k_1, \dots, k_{N_{\alpha}}; q_1, \dots, q_{N_{\beta}}) \\ &= \Gamma_{\alpha \dots \alpha}^{(N_{\alpha}) (\phi^{\alpha})^2}(k_1, \dots, k_{N_{\alpha}}) \Gamma_{\beta \dots \beta}^{(N_{\beta}) (\phi^{\beta})^2}(q_1, \dots, q_{N_{\beta}}). \end{aligned} \quad (3)$$

In terms of diagrams this can be seen in Fig. 1 where the wiggly line denotes the operator insertion and the ‘‘blob’’ denotes any number of interactions within one replica. Precisely because different replicas can interact only through $A_{\alpha\beta}$, diagrams as in Fig. 1(a) are allowed, whereas

other possibilities, Fig. 1(b), are not. That the factorisation in Eq. (3) occurs can be seen by severing the diagram of Fig. 1(a) along the insertion line. Eq. (3) can be proved order by order in perturbation theory and non-perturbatively by making use of generating functionals. The renormalized version of Eq. (3) is:

$$\sum_{i=1}^4 a_i(u) \Gamma_{\alpha \dots \alpha \beta \dots \beta A_i R}^{(N_\alpha + N_\beta)}(\{k_i\}; \{q_i\}; u) = \Gamma_{\alpha \dots \alpha R}^{(N_\alpha, 1)}(\{k_i\}; u) \Gamma_{\beta \dots \beta R}^{(N_\beta, 1)}(\{q_i\}; u), \quad (4)$$

where $a_i(u) = 3\delta_{i1} + O(u)$ and where $\Gamma^{(N,1)}$ denotes a vertex part with one quadratic insertion $\frac{1}{2!} \sum_{\alpha} (\phi^{\alpha})^2$, having anomalous dimension $2 - \nu_P^{-1}$. Eq. (4) implies that, at $u = u^*$, the following RG equation is satisfied:

$$\sum_{i=1}^4 a_i(u) \left[\kappa \frac{\partial}{\partial \kappa} - \frac{N_\alpha + N_\beta}{2} \eta_P + 2(2 - \nu_P^{-1}) \right] \Gamma_{\alpha \dots \alpha \beta \dots \beta A_i R}^{(N_\alpha + N_\beta)}(\{k_i\}; \{q_i\}; u) = 0, \quad (5)$$

$\frac{1}{2} \eta_P$ being the anomalous dimension of the field ϕ_{μ}^{α} . It then follows [5] that $\gamma_1 = 2(2 - \nu_P^{-1})$ is the missing anomalous dimension and, therefore, that $d_1 = d - 4 + \gamma_1 = -\alpha_P / \nu_P$, which implies that $\phi = \alpha_P$. Accordingly, we can conclude that of the physical models with $\alpha_P \neq 0$ only the 3D dilute Ising case presents new critical exponents. The first reliable evaluation of these exponents can be found in Ref. [4].

Apart from a rigorous proof of the identity $\phi = \alpha_P$, the above arguments also provide a naive physical interpretation of the ‘‘extended’’ Harris Criterion. One can always think of a many-body system as the superposition of n identical replicas of the same homogeneous system, the $n = 0$ limit representing the the quenched inhomogeneous case. Without disorder, different replicas do not interact (Eq. (2)). Disorder introduces interactions between different replicas, and we can see from Eq. (1) and from the form of the operator $A_{\alpha\beta}$ that site dilution mixes the replicas thermally, through their energy density $(\phi^{\alpha})^2$. Moreover, a single impurity interaction decouples the replicas’ energy densities, as shown in Eq. (3). Hence, it is the thermal state of

the pure system that determines whether disorder through site dilution modifies the system's critical behaviour. If the specific heat diverges as $T \rightarrow T_c$ ($\alpha_P > 0$), then dilution is a relevant perturbation which the system exploits in order to achieve a non-divergent thermal state ($\alpha < 0$, see Ref. [4]). If on the other hand $\alpha_P < 0$, the specific heat does not diverge as $T \rightarrow T_c$ and the introduction of impurities will be irrelevant ($\alpha \equiv \alpha_P < 0$).

Marginal cases, with $\alpha_P = 0$ (2D Ising model, 4D M-vector model), represent interesting intermediate circumstances. Here we have a weak logarithmic divergence in the specific heat. Thus, we expect disorder to give rise to changes in the critical behaviour, albeit in a marginal way through logarithmic corrections. This is the case of the 4D Ising model [7], where the singularity of the specific heat changes from $|\ln t|^{1/3}$ to $|\ln t|^{1/2} \exp[-2(\frac{6}{53} |\ln t|)^{1/2}]$ whilst for the susceptibility there is a change from $t^{-1} |\ln t|^{1/3}$ to $t^{-1} |\ln t|^{1/212} \exp[-2(\frac{6}{53} |\ln t|)^{1/2}]$, where $t = |T - T_c(p)|/T_c(p)$. We have reproduced these results field-theoretically and verified that for $M > 1$ the trend is confirmed (logarithmic suppression of the specific heat divergence and enhancement of the susceptibility divergence). The new feature is that the 2D Ising model also presents logarithmic corrections in the presence of site dilute impurities. This is due to the fact that $d = 2$ is a marginal dimension for the impurity coupling Δ_0 , as suggested by the fact that $\phi = 0$ [4]. Since for the 2D Ising model only the specific heat exponent has mean-field value, the specific heat is the one thermodynamic function presenting logarithmic impurity corrections. By solving exactly the appropriate RG equation [8], we predict for the singular part of the specific heat of the site-dilute 2D Ising model the behaviour:

$$\begin{aligned}
C_{sing}(t) &\simeq C_1 |\ln t|^{1-\mu} + C_2 |\ln t|^{-\mu} && \text{if } \mu \neq 1 \\
&\simeq C_1 \ln |\ln t| + C_2 |\ln t|^{-1} && \text{if } \mu = 1,
\end{aligned} \tag{6}$$

C_1, C_2 being non-universal amplitudes and μ being the new critical exponent characteristic

of the model. μ is a complicated combination of derivatives of RG functions (coefficients of RG or Callan-Symanzik equations) and is currently being calculated within a fixed-dimension loop-expansion approach [4]. However, we believe that the central effect of site-dilution is a suppression of the homogeneous system's specific heat divergence as $T \rightarrow T_c$, at the price of an increase in the divergence of magnetic correlations, and we therefore expect that $\mu > 1$. This result is in disagreement (unless $\mu = 1$) with a recent study [9] on the 2D bond-dilute Ising model, which indicates that $C_{sing}(t)$ still diverges as $\ln |\ln t|$ when $T \rightarrow T_c(p)$. The discrepancy may be due to the fact that site and bond dilution are marginally different forms of disorder [10]. Nevertheless, we remark that previous theoretical work [11] on the same bond-dilute model did show a suppression of the specific heat divergence as $T \rightarrow T_c(p)$.

In conclusion, we can reformulate the extended Harris Criterion as follows: the critical behaviour of homogeneous systems with $\alpha_P \geq 0$ (divergent specific heat) is modified by the introduction of impurities; homogeneous systems with $\alpha_P < 0$ (non-divergent specific heat) maintain their critical behaviour instead.

Acknowledgements

We are grateful to Professor J. C. Talyor and Dr. I. Drummonds for enlightening discussions and revealing suggestions. G. J. acknowledges discussions with Dr. R. B. Stinchcombe and a Science and Engineering Reasearch Council postdoctoral research assistantship, C. E. I. C. is grateful to Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) for financial support.

References

- [1] A. B. Harris, J. Phys. C7, 1671 (1974).
- [2] A. B. Harris, T. C. Lubensky, Phys. Rev. Lett. 33, 1540 (1974);
T. C. Lubensky, Phys. Rev. B11, 3573 (1975).
- [3] G. Grinstein, A. Luther, Phys. Rev. B13, 1329 (1976).
- [4] G. Jug, to be published.
- [5] See for example: G. Jug, Annals of Physics (N. Y.) (1982), in press.
- [6] E. Brézin, C. De Dominicis, J. Zinn-Justin, Lett. Nuovo Cimento 9, 483 (1974).
- [7] First investigated by: A. Aharony, Phys. Rev. B13, 2092 (1976).
- [8] E. Brézin, J. C. Le Guillou, J. Zinn-Justin in “Phase Transitions and Critical Phenomena”,
vol. VI, C. Domb and M. S. Green (editors), Academic Press, N. Y. (1976).
- [9] V. S. Dotsenko, V. S. Dotsenko, J. Phys. C15, 495 (1982).
- [10] For a recent review on dilute magnetic systems, see: R. B. Stinchcombe in “Phase Transitions and Critical Phenomena”, C. Domb and J. L. Lebowitz editors, Academic Press (to be published). Within the replica formalism, bond- and site-dilute models give rise to different field theories. See for instance: T. C. Lubensky in “Ill-Condensed Matter”, Les Houches 1978 Summer School Lecture Notes, R. Balian et. al. editors, North Holland, 1979.
- [11] C. Jayaprakash, E. K. Riedel, M. Wortis, Phys. Rev. B18, 2244 (1978).

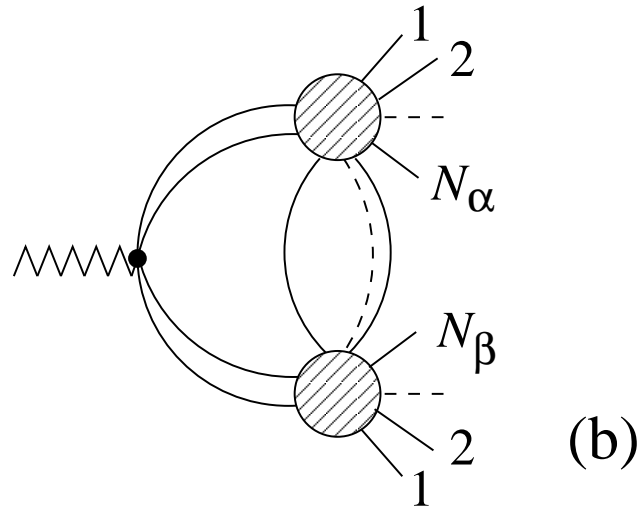
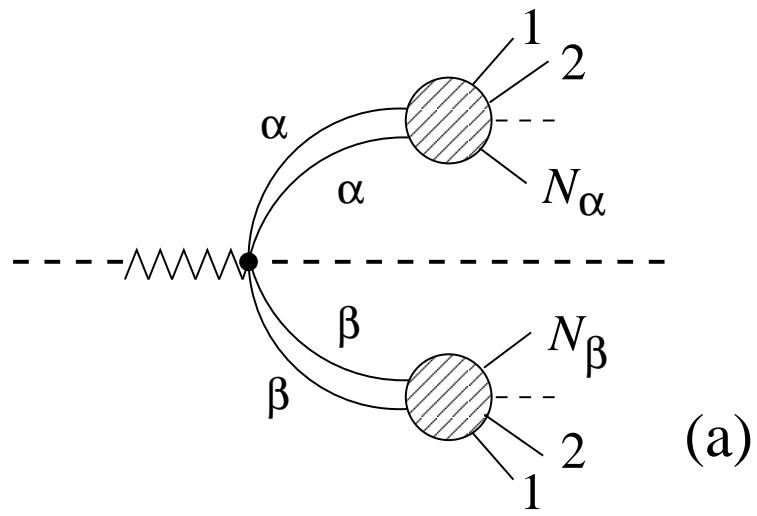


Figure 1: (a) allowed diagrams contributing to $\Gamma_{\alpha \dots \alpha \beta \dots \beta}^{(N_\alpha + N_\beta)} A_{\alpha\beta}$; (b) non-allowed contributions.