

# Introdução ao Grupo de Renormalização

Deancarlo Bordin Degregori  
Orientação: Leonardo Fernandes Guidi

Junho de 2010

## **Agradecimentos**

Gostaria de agradecer, em primeiro lugar, aos meus pais por tudo em minha vida, não apenas pelo apoio à faculdade, mas em especial por seu amor. Aos meus eternos amigos, pela amizade incondicional. E finalmente, mas não menos importante, ao meu orientador pela enorme paciência dispensada, e pelos conselhos úteis.

## Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Conceitos Termodinâmicos e Mecânico-Estatísticos</b>	<b>5</b>
2.1	Introdução . . . . .	5
2.2	Classificação das Transições, de Ehrenfest . . . . .	7
2.3	Expoentes Críticos e suas Desigualdades, Universalidade . . . . .	7
2.4	Matriz de Transferência . . . . .	10
2.5	Alguns Modelos Estatísticos e seus Expoentes . . . . .	13
2.6	Expansões em Séries . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Teorias de Campo Médio</b>	<b>18</b>
3.1	Aplicadas ao Modelo de Ising . . . . .	18
3.2	A Teoria de Landau . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Grupo de Renormalização</b>	<b>22</b>
4.1	Definição do Grupo . . . . .	22
4.2	Espaço de Fases e Universalidade . . . . .	24
4.3	Cálculo dos Expoentes . . . . .	26
4.4	Exemplo [10] . . . . .	29
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>30</b>

## 1 Introdução

As teorias do grupo de renormalização surgiram na década de 70, mais precisamente em 1971, com o artigo de K. G. Wilson, da Universidade de Cornell, USA. O grupo de renormalização surgiu como uma síntese de várias técnicas aplicadas com o objetivo de prever o comportamento de sistemas diversos próximos à criticalidade. A teoria também explicou, de modo satisfatório e matemático, uma gama de fenomenologias que, apesar de muito conhecidas, não possuíam explicação devida.

Observa-se que os sistemas que apresentam *transição de fase* (tenham um processo crítico) possuem vários comportamentos em comum. Após o aparecimento da Mecânica Estatística no final do século XIX e seu desenvolvimento no decorrer do século XX, procurou-se entender o que ocorria com sistemas termodinâmicos, fluidicos e ferromagnéticos (entre outros) próximo à uma transição de fase (criticalidade). Os resultados revelaram que, independentemente do sistema em estudo, há comportamento geral a todos os sistemas de uma dada *classe*, isto é, em dadas condições. Esse comportamento foi chamado de *universalidade*, e, fenomenologicamente, foi modelado pela teoria dos expoentes críticos de Lyapunov. No surgimento do grupo de renormalização é que a universalidade obteve uma explanação satisfatória.

Antes, a teoria era uma coleção de resultados a esmo e independentes, porém potencialmente úteis. Essas técnicas utilizadas foram baseadas:

- Na análise de modelos, computacional e teórica, tais como os modelos de Ising, Heisenberg, Potts, X-Y, etc.;
- Nos estudos aproximativos oriundos das teorias de campo médio;
- Nas expansões em séries de potências dos modelos para regimes de temperaturas;
- Com os estudos que exploraram as simetrias sistêmicas, como a matriz de transferência, e
- A predição de vários resultados a partir de estudos comportamentais dos sistemas baseados em simulações randômicas (método de Monte-Carlo).

Antes de apresentar a teoria do grupo de renormalização, será feita uma revisão histórica do aparecimento da teoria. No primeiro capítulo, será apresentada uma revisão de conceitos termodinâmicos e mecânico-estatísticos. Também serão apresentados alguns modelos (da Mecânica Estatística) e seus resultados, e ainda serão discutidas as técnicas de matriz de transferência e de expansões em série. O capítulo intermediário apresentará a teoria dos campos médios, e sua importância. Todos terão como enfoque o Modelo de Ising de Spin  $-1/2$ , devido à sua simplicidade. No último, será finalmente

apresentada a teoria juntamente com suas técnicas matemáticas e a forma como explicou os conceitos a ela associados.

## 2 Conceitos Termodinâmicos e Mecânico-Estatísticos

### 2.1 Introdução

Da Mecânica Estatística, sabe-se que a expressão para a *função partição* de um *ensemble* de partículas é dada por

$$\mathcal{Z}(H, \beta) = \sum_r e^{-\beta \mathcal{E}_r}, \quad (1)$$

ou seja, representa uma soma sobre todos os estados indexados por  $r$ , e definidos pelo Hamiltoniano  $\mathcal{E}_r$  do sistema. O fator  $\beta$  é tal que  $\beta = 1/kT$ , em que  $k$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura absoluta (em Kelvin);  $H$  é, por exemplo, um campo magnético do sistema (mas também pode representar o volume se o sistema em estudo for fluídico).  $\mathcal{E}_r$  é obtida a partir do Hamiltoniano  $\mathcal{H} = \mathcal{H}(H, T)$ . A partir da função partição, é possível calcular a energia livre, o *potencial termodinâmico de Helmholtz*:

$$\mathcal{F}(T, H) = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}(T, H); \quad (2)$$

$$\mathcal{F}(T, H) = [U](S, H); \quad (3)$$

$$\mathcal{F} = U - TS. \quad (4)$$

A equação (3) representa a Transformada de Legendre, e (4) sua expressão matemática. A função  $U = U(S, V, N)$  é a equação fundamental, como usual na termodinâmica. De acordo com a primeira lei,

$$dU = T dS - M dH, \quad (5)$$

onde  $M$  é a magnetização. Dessa forma, a primeira lei para o potencial de Helmholtz é calculada, a partir de (4), como:

$$d\mathcal{F} = dU - T dS - S dT; \quad (6)$$

$$(5) \Rightarrow d\mathcal{F} = -M dH - S dT, \quad (7)$$

o que justifica o fato de  $\mathcal{F} = \mathcal{F}(H, T)$ . A partir da função partição, calculam-se as variáveis:

- Energia Interna:

$$U = \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}; \quad (8)$$

## 2 CONCEITOS TERMODINÂMICOS E MECÂNICO-ESTATÍSTICOS 6

- Entropia:

$$S = - \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T} \right)_H = \frac{U - \mathcal{F}}{T}; \quad (9)$$

- Magnetização:

$$M = - \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial H} \right)_T. \quad (10)$$

E, a partir delas, calculam-se as propriedades:

- Calor Específico:

$$C_H = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_H; \quad (11)$$

- Calores Específicos:

$$C_{H,M} = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_{H,M}; \quad (12)$$

- Susceptibilidade Isotérmica:

$$\chi_T = \left( \frac{\partial M}{\partial H} \right)_T. \quad (13)$$

Um conceito importante em mecânica estatística é a *função de correlação*. Como o nome diz, mede a o grau de dependência entre duas de um conjunto de variáveis (caso conhecido como *autocorrelação*). Por exemplo, a função de correção para spins em sistemas ferromagnéticos (em dada dimensão) se apresenta como:

$$\Gamma(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle) (s_j - \langle s_j \rangle) \rangle, \quad (14)$$

em que  $\langle \dots \rangle$  denota uma média térmica, e  $s_i$  é a variável de spin. É sabido que [1] a função de correlação decai, do ponto de vista espacial, e a grandes distâncias, sob a forma:

$$\Gamma(\vec{r}) \sim r^{-\tau} \exp^{-r/\xi}. \quad (15)$$

O número  $\tau$  não é significativo para a subsequente análise, e  $\xi$  é um parâmetro chamado de *comprimento de correlação*. Conforme o sistema se aproxima da criticalidade,  $\xi \rightarrow \infty$ . Pode-se mostrar que a função de correlação, na criticalidade, decai como a lei de potência

$$\Gamma(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad (16)$$

sendo  $d$  a dimensionalidade do sistema, e  $\eta$  é uma constante que depende do sistema, um exemplo de *expoente crítico*.

Também é conhecido que [1],

$$\chi_T \sim N \int \Gamma(r) r^{d-1} dr. \quad (17)$$

Da equação acima infere-se que, durante a criticalidade, uma vez que  $\chi_T \rightarrow \infty$ , também deve divergir  $\Gamma(r)$ , e portanto, impõe-se um limite superior para  $\eta$ , tal que  $\max\{\eta\} = 2$ .

## 2.2 Classificação das Transições, de Ehrenfest

Uma transição de fase é caracterizada por uma singularidade num potencial termodinâmico.

Diz-se que a transição é de *primeira ordem* se a descontinuidade for *finita* em uma ou mais derivadas do potencial termodinâmico. Para um sistema ferromagnético, existe uma descontinuidade na magnetização, indicando transição de primeira ordem.

Diz-se que a transição de fase é de *alta ordem*, *contínua*, ou ainda *crítica*, se as primeiras derivadas forem contínuas, mas as segundas apresentarem descontinuidades ou tenderem ao infinito. Nesse tipo de transição, ocorre que  $\chi_T, \xi \rightarrow \infty$  e um decaimento em forma de potência de  $\Gamma$ , (16), na análise de sistemas ferromagnéticos simples.

Por exemplo, em sistemas ferromagnéticos, há uma transição de fase em  $H = 0$ , e existe uma transição de fase na curva definida por  $H(T < T_C) = 0$  onde  $T_C$  é a *temperatura crítica*, e a transição é de primeira ordem. Cruzando essa linha, conforme varia  $H$ , existe um salto na magnetização para  $T \leq T_C$ . No mesmo regime de temperatura, a função de Helmholtz é contínua, mas apresenta bicos em  $\mathcal{F}(H = 0)$ . Conforme  $T \rightarrow T_C, H \rightarrow 0, \chi_H \rightarrow \infty$ . Figuras abaixo ilustram o citado.

## 2.3 Expoentes Críticos e suas Desigualdades, Universalidade

Os expoentes críticos ajudam a compreender melhor a criticalidade. A fim de defini-los, considere-se

$$t := \frac{T - T_C}{T_C}. \quad (18)$$

Então, define-se o expoente crítico associado com a função  $\mathcal{F}(t)$  como sendo

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\ln|\mathcal{F}(t)|}{\ln|t|}, \quad (19)$$

ou ainda,

$$\mathcal{F}(t) \sim |t|^\lambda, \quad (20)$$

e mais geralmente, como

$$\mathcal{F}(t) \sim |t|^\lambda \left(1 + bt^{\lambda_1} + \dots\right), \quad \lambda_1 > 0. \quad (21)$$

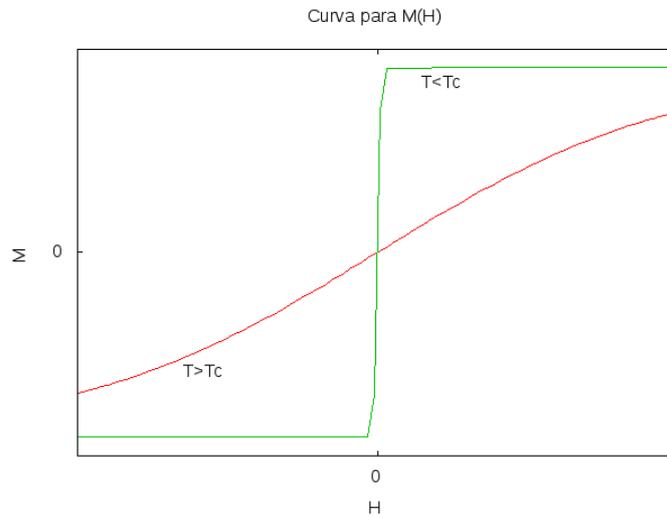


Figura 1: Curvas para a magnetização. Há saltos para  $T \leq T_c$ , mas se  $T > T_c$  a curva é suave.

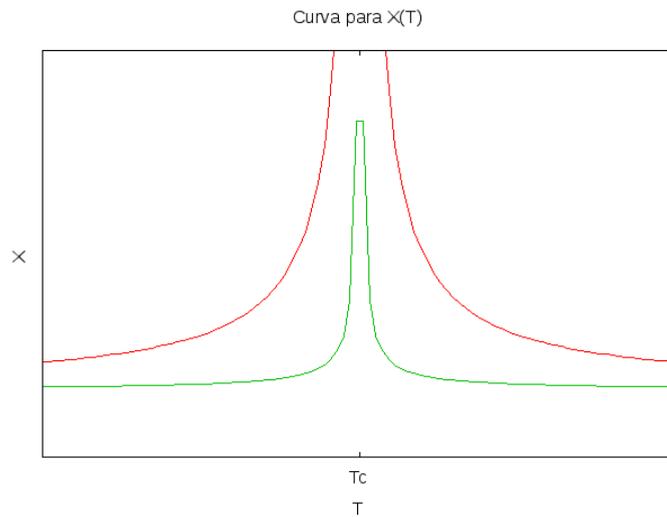


Figura 2: A susceptibilidade diverge se  $H = 0$ .

Se mostra que assim definidos os expoentes críticos é conveniente, dado o comportamento estudado, de sistemas ferromagnéticos, fluídicos e modelos estatísticos, de acordo com a forma aproximada da curva próxima à criticidade. Nas tabelas abaixo, encontram-se as definições dos expoentes tanto para sistemas ferromagnéticos quanto para fluídicos.  $V$  representa o volume,  $\rho$  a densidade e  $P$  a pressão. Atenção especial à simetria das definições e à independência dos limites laterais  $T \rightarrow T_C^+$ , e  $T \rightarrow T_C^-$ , isto é, o mesmo

## 2 CONCEITOS TERMODINÂMICOS E MECÂNICO-ESTATÍSTICOS 9

expoente caracteriza o comportamento antes e depois de  $T_C$ . Observar também que os expoentes serão iguais apenas se ambos os sistemas pertencerem a mesma classe de universalidade.

Sistemas Ferromagnéticos	
Calor específico em campo zero	$C_H \sim  t ^{-\alpha}$
Magnetização em campo zero	$M \sim (-t)^{-\beta}$
Susceptibilidade isotérmica em campo zero	$\chi_T \sim  t ^{-\gamma}$
Isoterma crítica ( $t = 0$ )	$H \sim  M ^{\delta} \text{sgn}(M)$
Comprimento de correlação	$\xi \sim  t ^{-\nu}$
Função de correlação em $T_C$	$G(\vec{r}) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

Tabela 1: Comportamento de sistemas ferromagnéticos durante a criticalidade. De [1]

Sistemas Fluídicos	
Calor específico à $V_C$	$C_V \sim  t ^{-\alpha}$
Diferença de densidade líquido-gás	$(\rho_l - \rho_g) \sim (-t)^{-\beta}$
Compressibilidade isotérmica	$\kappa_T \sim  t ^{-\gamma}$
Isoterma crítica ( $t = 0$ )	$P - P_C \sim  \rho_l - \rho_g ^{\delta} \text{sgn}(\rho_l - \rho_g)$
Comprimento de correlação	$\xi \sim  t ^{-\nu}$
Função de correlação em $T_C$	$G(\vec{r}) \sim 1/r^{d-2+\eta}$

Tabela 2: Criticalidade de sistemas fluídicos. [1]

Nas figuras (1) e (2) acima, pode-se inferir, de modo visual, que  $\delta \sim 2$  e  $1 < \gamma < 2$ . De (11) e (12), juntamente com o fato de que  $C_H \geq 0$ , é possível mostrar que

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2; \quad (22)$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) \geq 2, \quad (23)$$

segue, por exemplo, da concavidade da energia livre (que é côncava, isto, é  $(\partial^2 \mathcal{F} / \partial \{T, H\}^2)_{\{H, T\}} \leq 0$ . O fato de a energia livre ser côncava é oriunda do fato de que  $C_H = -T (\partial^2 \mathcal{F} / \partial T^2)_H \geq 0$ , e desde que  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - HM$ ,  $\chi_T = -(\partial^2 \mathcal{F} / \partial H^2)_T \geq 0$  [1]).

Também podem ser derivadas outras relações, a partir do comportamento termodinâmico da função de correlação, tais como

$$\gamma \leq (2 - \eta)\nu; \quad (24)$$

$$\nu d \geq 2 - \alpha; \quad (25)$$

$$\gamma \geq \beta(\delta - 1). \quad (26)$$

Contudo, na literatura científica, todos os expoentes calculados com os modelos concordam no fato de que as desigualdades supracitadas aparecem como *igualdades*.

A esse ponto se define o conceito de *universalidade*. Os expoentes críticos, como acima definidos, dependem de muito poucos parâmetros; em um sistema cuja interação dada é de curto alcance, os parâmetros de que dependem são a dimensionalidade do espaço,  $d$ , e da simetria do parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem de uma transição representa, no caso de um sistema ferromagnético, a quantidade de magnetização; e a diferença entre densidades líquido-gás, por exemplo, para um sistema fluídico. Quando um sistema apresenta transição de um regime ferromagnético para antiferromagnético, o parâmetro de ordem se anula, bem como no caso dos fluidos. A primeira evidência disso foi quando Guggenheim, em 1945, construiu curvas de coexistência para diferentes fluidos. De acordo com seus dados, havia um valor de  $\beta = 1/3$  para *todos* os fluidos. No modelo de Ising (que será discutido na próxima seção), os modelos experimentais indicam que  $\beta = 0.327$  para as redes cúbica, cúbica de corpo centrado e cúbica de face centrada, mesmo que as três possuam diferentes valores para  $T_C$ . Isso é a universalidade.

Para concluir, é possível estudar os expoentes do ponto de vista do modelo mais simples e aplicá-lo à sua classe de universalidade, desde que se trabalhe com a dimensionalidade correta e se observe a simetria do parâmetro de ordem.

## 2.4 Matriz de Transferência

A matriz de transferência é uma ferramenta matemática muito útil quando a função partição apresenta simetrias em sua forma. Para isso, considere-se um Hamiltoniano da forma (de Ising):

$$\mathcal{H}_N = -J \sum_{i=0}^{N-1} s_i s_{i+1} - H \sum_{i=0}^{N-1} s_i. \quad (27)$$

Tome-se juntamente a condições de contorno periódicas ( $s_i = s_N$ ). Dessa forma,

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{s\}} e^{\beta J(s_0 s_1 + s_1 s_2 + \dots + s_{N-1} s_0) + \beta H(s_0 + s_1 + \dots + s_{N-1})}, \quad (28)$$

em que  $\{s\}$  representa o traço sobre todos os estados definidos pelo sistema, e  $s_i = \pm 1$ . Rearranjando os termos,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = \sum_{\{s\}} & e^{\beta J s_0 s_1 + \beta H(s_0 + s_1)/2} e^{\beta J s_1 s_2 + \beta H(s_1 + s_2)/2} \dots \\ & \dots e^{\beta J s_{N-1} s_0 + \beta H(s_{N-1} + s_0)/2}; \end{aligned} \quad (29)$$

Definindo

$$\mathbf{T}_{i,i+1} = e^{\beta J s_i s_{i+1} + \beta H (s_i + s_{i+1})/2}, \quad (30)$$

como sendo os elementos de uma matriz  $\mathbf{T}$ , obtém-se:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{s\}} \mathbf{T}_{0,1} \mathbf{T}_{1,2} \dots \mathbf{T}_{N-1,0}, \quad (31)$$

ou seja, a função partição foi posta sob a forma de um produto de matrizes da forma

$$\begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix}, \quad (32)$$

em que as linhas são indexadas pelos valores respectivos de  $s_i = 1$  e  $s_i = -1$ , e as colunas por  $s_{i+1} = 1$  e  $s_{i+1} = -1$ . Quando o traço é efetuado, (31) reduz-se à

$$\mathcal{Z}_N = \sum_{s_0=\pm 1} (\mathbf{T}^N)_{0,0}. \quad (33)$$

Diagonalizando a matriz  $\mathbf{T}$ , encontram-se seus autovalores  $\lambda_i$ . Assim,

$$\mathcal{Z}_N = \sum_i \lambda_i^N. \quad (34)$$

Nem sempre as matrizes terão o formato  $2 \times 2$ . Por exemplo, o modelo de Potts com  $q$  estados a matriz será  $q \times q$ .

A densidade de energia livre (por spin) é dada pela expressão (como visto anteriormente):

$$f = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z}_N. \quad (35)$$

Tomando a diagonalização (34), e cunhando  $\lambda_0$  como o maior dos autovalores da matriz (32), calcula-se:

$$f = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left[ \lambda_0^N \left( 1 + \sum_i \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right) \right) \right]; \quad (36)$$

$$\therefore f = -kT \ln \lambda_0. \quad (37)$$

A função de correlação é dada por:

$$\Gamma_R = \sum_{i \neq 0} \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right) (u_0^T \mathbf{s}_0 u_i) (u_i^T \mathbf{s}_R u_0). \quad (38)$$

Na equação acima,  $u_i$  são os autovetores de  $\mathbf{T}$  e  $\mathbf{s}_0$  e  $\mathbf{s}_R$  representam as matrizes (operadores) do  $\theta$ -ésimo e do  $R$ -ésimo sítios da rede, respectivamente.  $(^T)$  representa o transposto de matriz.

## 2 CONCEITOS TERMODINÂMICOS EMECÂNICO-ESTATÍSTICOS 12

O comprimento de correlação, de acordo com a definição (15), em vista de (38), se torna:

$$\frac{1}{\xi} = \ln \left( \frac{\lambda_0}{\lambda_1} \right). \quad (39)$$

Para o modelo de Ising, que é regido pela equação (27) os cálculos acima mencionados resultam em que,, diagonalizando a matriz (32):

$$\lambda_{0,1} = e^{\beta J \cosh \beta H} \pm \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta H + e^{-2\beta J}}; \quad (40)$$

$$u_0 = \begin{pmatrix} \alpha_+ \\ \alpha_- \end{pmatrix}, \quad u_1 = \begin{pmatrix} \alpha_- \\ \alpha_+ \end{pmatrix}, \quad (41)$$

onde

$$\alpha_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{e^{\beta J} \sinh \beta H}{\sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta H + e^{-2\beta J}}} \right). \quad (42)$$

Em síntese, a Matriz de Transferência acarreta no que segue:

$$f = -kT \ln \{ e^{\beta J \cosh \beta H} + \sqrt{e^{2\beta J} \sinh^2 \beta H + e^{-2\beta J}} \}$$

$$\downarrow$$

$$f \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} -J - H.$$

No caso da magnetização,

$$\langle s \rangle = \tanh \beta H, \quad \text{se } J = 0 \Leftrightarrow T \rightarrow \infty. \quad (43)$$

Note-se que:

$$\lim_{H \rightarrow 0^{\pm}} \lim_{T \rightarrow 0} \langle s \rangle = \pm 1, \quad (44)$$

evidenciando que há uma transição de fase em temperatura zero para um estado totalmente ordenado, à temperatura nula.

Já a função de correlação torna-se:

$$\Gamma_R(H = 0) = \tanh^R \beta J, \quad (45)$$

que fornece os resultados

$$\Gamma_R \rightarrow 1, \quad \text{se } T \rightarrow 0; \quad \Gamma_R \rightarrow 0, R \rightarrow \infty, \quad \text{se } T \neq 0. \quad (46)$$

E finalmente, o comprimento de correlação se calcula como:

$$\xi^{-1} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0; \quad (47)$$

$$\xi^{-1} \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \infty. \quad (48)$$

Dos gráficos feitos na segunda seção, e dos modelos na seguinte, foi apresentado, de um modo genérico, o comportamento de sistemas ferromagnéticos. Mencionou-se o comportamento assintótico do sistema, a existência de uma transição em  $T_C = 0$ , que podem ser justificados pelos cálculos acima.

## 2.5 Alguns Modelos Estatísticos e seus Expoentes

Esta seção destina-se a apresentar os resultados que os modelos forneceram para o cálculo dos expoentes críticos. As implicações serão discutidas na última subseção.

O Modelo de Ising de spin - 1/2 considera um Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (49)$$

em que  $s_i$  representa o spin em cada sítio de uma rede,  $J$  é chamado de energia de troca, e  $H$  é o campo, como usual.  $\langle ij \rangle$  denota uma soma sobre os vizinhos mais próximos. Em uma e duas dimensões sem campo, o modelo de Ising é completamente solúvel. Nele, a transição de fase ocorre em uma temperatura  $T_C = 0$ . O primeiro termo é responsável pelo comportamento coletivo dos spins, e pela possibilidade de transição, enquanto que o segundo evidencia um modelo paramagnético. A energia de troca pode ser positiva ou negativa, sendo que a primeira favorece spins alinhados paralelamente, e a última, antiparalelamente.

O modelo bidimensional, calculado por Onsager em 1944, já evidenciava o fato de que os expoentes críticos, de algum modo obscuro à época, apareciam como *racionais*.

Tanto o modelo bidimensional a campos não nulos com campo magnético como o tridimensional não foram ainda, resolvidos exatamente, mas suas propriedades foram extraídas por métodos numéricos.

Entre suas aplicações, o modelo é usado, com algumas implementações, para transições ordem-desordem em ligas binárias e em modelos de gás de rede.

Um aprimoramento do modelo de Ising de spin - 1/2, o modelo para spin 1 admite o Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - K \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 - D \sum_i s_i^2 - L \sum_{\langle ij \rangle} (s_i^2 s_j + s_i s_j^2) - H \sum_i s_i; \quad (50)$$

$$s_i = \pm 1, 0. \quad (51)$$

e comporta o estudo de sistemas cujos parâmetros de spin envolvem mais do que apenas dois estados. O modelo de spin 1/2 se obtém fazendo  $K = D = L = 0$ .

Um último modelo clássico a ser visto é o modelo de Potts de  $q$  estados. Considere que cada sítio de uma rede é descrito por uma variável que pode assumir  $q$  valores, a qual seja  $\sigma_i$ , onde  $\sigma_i = 1, 2, 3, \dots, q$ . A interação entre os spins de cada sítio é descrita pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j}, \quad (52)$$

em que  $\delta$  é a função de Kronecker. O Hamiltoniano acima representa a energia de dois spins vizinhos, dizendo que é mais ligada se estiverem no mesmo estado. Observar que  $q = 2$  leva ao modelo de Ising.

O Modelo de Potts tem a propriedade de que, conforme a temperatura é incrementada, há uma transição para uma fase paramagnética que é contínua se  $q \leq 4$  mas de primeira ordem se o contrário ocorre, em duas dimensões. Um exemplo de aplicação do modelo consiste na adsorção de criptônio pelos planos hexagonais do grafite.

O modelo de Heisenberg foi especialmente desenvolvido para ser aplicado a sistemas ferromagnéticos. O modelo de Ising de spin - 1/2 apenas é útil para descrever sistemas que são altamente anisotrópicos com relação ao spin. Utiliza-se

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j - H \sum_i \sigma_i^z. \quad (53)$$

em que  $\sigma_i$  são as matrizes de Pauli.

Essa equação pode ser reduzida a:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N [J (\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y) + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z]. \quad (54)$$

Esse modelo foi introduzido em 1928 e guarda a característica de que, tanto no regime quântico, como acima, quanto no regime clássico, tem os mesmos expoentes críticos contanto que  $\Delta \gg J$ . Analogamente ao modelo de Ising, tem uma transição de fase com temperatura finita para  $d > 1$  e se ordena em  $T_C = 0$  se  $d \leq 2$ .

Com Hamiltoniano (semelhante ao anterior)

$$\mathcal{H} = -J_{\perp} \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) - H \sum_i \sigma_i^z, \quad (55)$$

o modelo X-Y descreve um modelo de spins quânticos bidimensionais. Apresenta uma transição de fase convencional à temperatura não nula quando  $d > 2$ . Em  $d = 2$  existe uma transição de fase em temperaturas finitas para um estado ordenado cujas interações são do tipo longo-alcance, que força as correlações a decair algebricamente.

Ambos os modelos de Heisenberg e X-Y dão conta do fato de o campo  $H$  não ser paralelo à magnetização  $M$ . O limite de Ising é obtido fazendo  $J_{\perp} = 0$  na última equação.

Abaixo constam as tabelas construídas exaustivamente através de processos teóricos e/ou simulativos. Os processos simulativos, em sua maioria, usam como base o algoritmo de Metrópolis [1], este último baseado no método de Monte Carlo. Contém uma descrição da simetria do parâmetro de ordem, os expoentes e exemplos. Tabelas extraídas de [1].

2 CONCEITOS TERMODINÂMICOS E MECÂNICO-ESTATÍSTICOS 15

Classe	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$\delta$	$\nu$	$\eta$
Ising 2-D	0 (log)	1/8	7/4	15	1	1/4
Ising 3-D	0.10	0.33	1.24	4.8	0.63	0.04
X-Y 3-D	0.01	0.34	1.30	4.8	0.66	0.04
Heisenberg 3-D	-0.12	0.36	1.39	4.8	0.71	0.04
Campo médio	0 (dis.)	1/2	1	3	1/2	0
Potts 2-D, $q = 3$	1/3	1/9	13/9	14	5/6	4/15
$q = 4$	2/3	1/12	7/6	15	2/3	1/4

Tabela 3: Valores dos expoentes críticos para diferentes classes

Classe	Simetria do par. de ordem	Exemplos
Ising 2-D	escalar de dois componentes	adsorção de H em Fe
Ising 3-D	idem	ordem-desordem em fluidos
X-Y 3-D	vetor bidimensional	supercondutores
Heisenberg 3-D	vetor tridimensional	magnetos isotrópicos
Potts 2-D, $q = 3$	escalar de $q$ componentes	alguns monoátmos adsorvidos
$q = 4$	idem	adsorção de Kr em grafite

Tabela 4: Exemplos de aplicação às classes

A este ponto é cabível evidenciar que, para dimensões maiores do que  $d \geq 4$  os expoentes par os modelos de Ising, X-Y e Heisenberg se tornam os mesmos (no regime em que  $\Delta \gg J$ ).

## 2.6 Expansões em Séries

As expansões em série foram as que mais contribuíram para o estudo da criticalidade. Por exemplo, a sugestão de que as leis de potência eram obedecidas na criticalidade foi proveniente de tal análise, bem como constituíram as primeiras evidências do comportamento universal, e acerca da existência da dimensão crítica.

A ideia consiste em, segundo [1]:

"encontrar um jeito sistemático de calcular as classes de contribuições à função de partição, que pode ser obtida exatamente, e esperar que as aproximações sucessivas possam ser extrapoladas para dar informações acerca das propriedades críticas."

Duas situações serão introduzidas: em regimes de altas e baixas temperaturas.

Como exemplo em altas temperaturas, o Hamiltoniano de Ising pode ser usado, (49), mas sem estar sujeito a um campo ( $H = 0$ ). Seja  $\mathcal{B}$  o número de ligações na rede que define (49). A função de partição pode ser expandida como:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & (\cosh \beta J)^{\mathcal{B}} \sum_{\{s\}} \left\{ 1 + v \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \right. \\ & \left. + v^2 \sum_{\langle ij \rangle; \langle kl \rangle} s_i s_j s_k s_l + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (56)$$

Com a teoria dos grafos [1], pode-se mostrar que, se  $v = \tanh \beta J$  (pois  $v \rightarrow 0$  quando  $T \rightarrow \infty$ ),

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & (\cosh \beta J)^{\mathcal{B}} 2^N \left\{ 1 + Nv^4 + 2Nv^6 \right. \\ & \left. + \frac{1}{2}N(N+9)v^8 + 2N(N+6)v^{10} + O(v^{12}) \right\}. \end{aligned} \quad (57)$$

Para uma rede quadrada de  $N$  sítios,  $\mathcal{B} = 2N$ . Expandindo para pequenos valores de  $v$ , finalmente obtém-se:

$$\mathcal{F} = -NkT \left\{ \ln 2 + v^2 + \frac{3}{2}v^4 + \frac{7}{3}v^6 + \frac{19}{4}v^8 + \frac{61}{5}v^{10} + O(v^{12}) \right\}. \quad (58)$$

Para se obter propriedades da criticalidade *abaixo* da temperatura crítica, é necessário efetuar uma expansão em baixas temperaturas. Para tanto, ao ordenar-se os termos da função partição como:

$$\mathcal{Z} = e^{-E_0/kT} \left( 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \Delta \mathcal{Z}_N^{(n)} \right), \quad (59)$$

## 2 CONCEITOS TERMODINÂMICOS MECÂNICO-ESTATÍSTICOS 17

em que  $\Delta Z_N^{(n)}$  são os pesos de Boltzmann relativos à energia *ground state* ( $\sim e^{-(E_n - E_0)/kT}$ ).

Assim, a expansão leva a:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = e^{-E_0/kT} \{ & 1 + Nx^4 + 2Nx^6 + \frac{1}{2}N(N+9)x^8 \\ & + 2N(N+6)x^{10} + O(x^{12}) \}, \end{aligned} \quad (60)$$

em que  $x = e^{-2J/kT}$ , variável natural a ser expandida, pois  $x \rightarrow 0$  quando  $T \rightarrow 0$ .

O caso das altas temperaturas demonstra que a função de partição, para o modelo de Ising, é

$$\mathcal{Z} = 2^N \cosh^{N-1} \beta J. \quad (61)$$

A expansão em baixas temperaturas indica que a série converge quando  $x \rightarrow 0$ , como esperado.

### 3 Teorias de Campo Médio

As teorias de campo médio tem utilidade para aproximar resultados de modelos insolúveis, na maioria dos casos. A mais conhecida é a teoria de Landau, pela simplicidade dos seus argumentos, os quais são potentes na obtenção de resultados.

#### 3.1 Aplicadas ao Modelo de Ising

Embora o modelo de Ising tenha sido resolvido analiticamente (unidimensional e bidimensional sem campo), é interessante, a fim de fixar ideias, calcular os resultados da teoria de campo médio para ele.

Dado um Hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , tome a inequação de Bogoliubov,

$$\mathcal{F} \leq \Phi = \mathcal{F}_0 + \langle H - H_0 \rangle_0. \quad (62)$$

Na última fórmula,  $\mathcal{F}$  representa a energia livre verdadeira para o sistema,  $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0(H_0)$  um Hamiltoniano *trial* que depende da variável  $H_0$  e a média é feita sobre o ensemble definido pelo Hamiltoniano *trial*. Assim, a energia livre de campo médio é definida por

$$\mathcal{F}_{cm} = \min_{H_0} \{\Phi\}, \quad (63)$$

constituindo o valor minimizado da função  $\Phi$  com relação ao parâmetro  $H_0$  (é um método variacional).

Como exemplo, tome-se o Hamiltoniano do modelo Ising sem campo ( $H = 0$ ), com  $z$  vizinhos próximos em uma rede de  $N$  sítios, (49). Como *trial* usa-se simplesmente

$$\mathcal{H}_0 = -H_0 \sum_i s_i. \quad (64)$$

em que  $H_0$  é chamado de campo médio. A minimização da função  $\Phi$  gera

$$H_0 = Jz \tanh \beta H_0, \quad (65)$$

e o processo inteiro leva a

$$\mathcal{F}_{cm} = -NkT \ln (2 \cosh \beta Jz \langle s \rangle_0) + NJz \langle s \rangle_0^2 / 2. \quad (66)$$

Uma análise gráfica da equação (65) indica que, em temperaturas na faixa  $T > T_C$ , a única solução é  $\langle s \rangle_0 = 0$ , uma fase paramagnética. Para  $T < T_C$ , há a solução anterior, e mais uma para algum valor finito de  $\langle s \rangle_0$ . Ver figura (3) abaixo. A última solução é a que minimiza (66). A fase estável é, então, ferromagnética. A temperatura crítica é calculada fazendo-se  $kT_C = Jz$ .

Dessa forma, os expoentes, calculados através de uma expansão do parâmetro  $t$ , anteriormente definido, mostram que  $\beta_{cm} = 1/2$ ,  $\alpha_{cm} = 0$ . Para obter os valores de  $\delta$  e  $\gamma$ , é necessário acrescentar o termo  $-H \sum_i s_i$  ao Hamiltoniano (64). Isso produzirá  $\delta_{cm} = 3$  e  $\gamma_{cm} = 1$ .

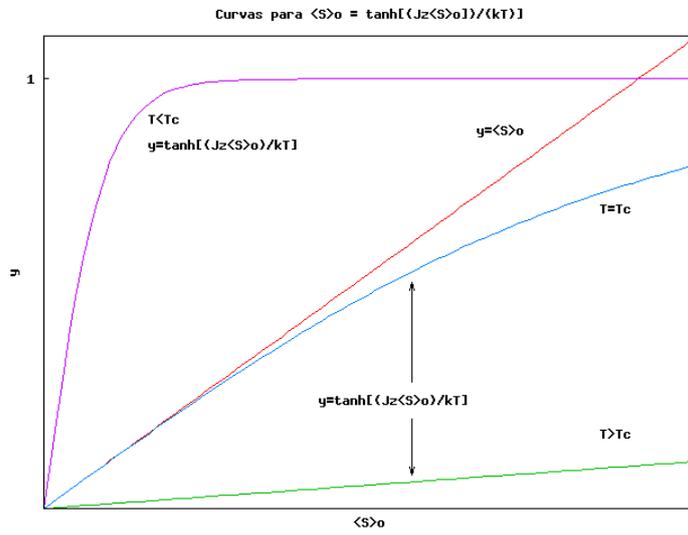


Figura 3: Gráfico para análise da eq.(65).

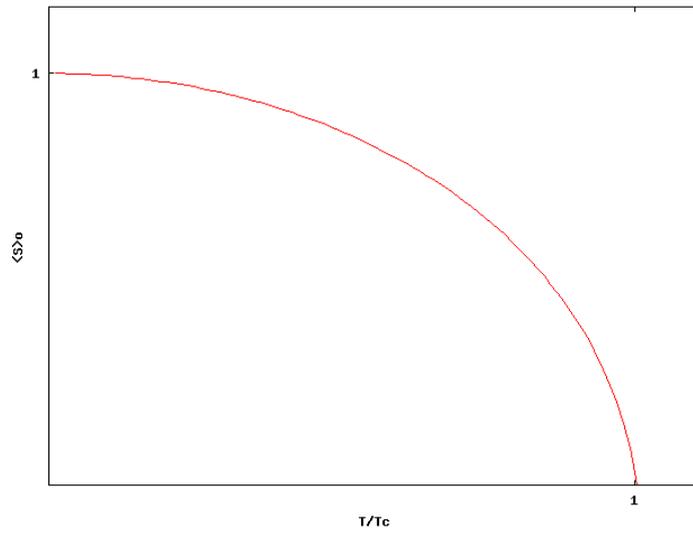


Figura 4: Curva  $S(T)$ . Conforme  $T \rightarrow T_C$ , o sistema migra para um estado totalmente ordenado, onde  $\langle s \rangle_0 = 1$ .

### 3.2 A Teoria de Landau

A teoria de Landau pressupõe uma forma simples para a forma da energia livre. Supôs ele que podia ser expandida em função do parâmetro de ordem  $m$  (bem genérico, sem distinção acerca do sistema modelado). Para um ferromagneto em  $H_0$ :

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 + a_2 m^2 + a_4 m^4, \quad (67)$$

em que o termo cúbico é suprimido por causa da simetria do sistema perante inversão de campo, e os termos subsequentes não corroboram para a criticidade. O modelo prevê resultados bastante interessantes. Se  $a_2 > 0$ , existe apenas um mínimo, absoluto, da energia livre e ocorre em  $m = 0$ , apontando que o sistema está na fase paramagnética. Para  $a_2 < 0$  há dois estados estáveis de magnetização simétricos em  $+m_0$  e  $-m_0$  em virtude da simetria, uma fase ferromagnética.  $a_4 > 0$  corresponde à condição de contorno de que o sistema deva estar ligado. Checar figura abaixo.

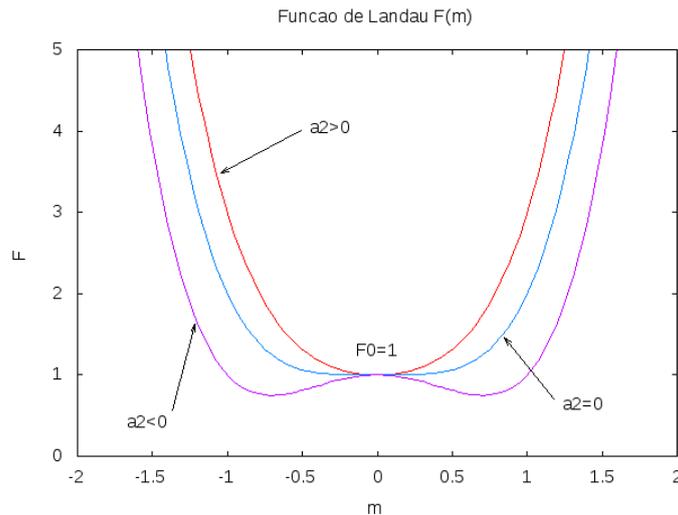


Figura 5: Diversas curvas em função do coeficiente  $a_2$ .  $a_4 > 0$ .

Expandindo a equação (66) para pequenos valores de  $\langle s \rangle_0$ , obtém-se a seguinte equação:

$$\mathcal{F}_{cm} = \mathcal{F}_0 + \frac{NJz}{2} \langle s \rangle_0^2 (1 - \beta Jz) + O(\langle s \rangle_0^4), \quad (68)$$

que é análoga à equação (67). Portanto, ambas as teorias tem os mesmos expoentes críticos. Em verdade, pode ser mostrado que os modelos X-Y, Ising de vários estados de spin e o de Heisenberg mencionados anteriormente podem ser reduzidos à equação de Landau. Portanto, possuem os mesmos

expoentes críticos, e pertencem à mesma classe de universalidade. Se a equação (67) não apresentar um resultado satisfatório, a truncagem deve ser feita de uma forma diferente. Um exemplo constitui o modelo de Potts com  $q = 3$ , em que os termos em  $m^3$  e  $m^6$  devem ser incluídos.

Uma análise detalhada da função de correlação no espaço de *Fourier* recíproco indica que a correlação apresenta o seguinte comportamento, segundo a teoria de Landau:

$$\Gamma(\vec{r}) \sim \begin{cases} \frac{e^{-r/\xi}}{r^{(d-3)/2}}, & t \neq 0; \\ \frac{1}{r^{d-2}}, & t = 0, \end{cases} \quad (69)$$

em que  $\gamma = \sqrt{g/a_2}$ , e  $g$  leva em conta o provável fato de os spins não estarem paralelos. Enfim, segundo a equação acima, facilmente identifica-se  $\nu_{cm} = 1/2$  e  $\eta_{cm} = 0$ .

As teorias acima são quânticas. Cabe mencionar que também existem teorias clássicas aproximativas. A *Teoria de Weiss* serve para sistemas ferromagnéticos e tem resultados semelhantes aos modelos acima. Para os fluidos, a teoria de *Van der Waals*, implementada pela método da construção de Maxwell, dá conta das transições líquido-gás.

A teoria de Landau constitui uma síntese, como se pode observar, de várias teorias que foram mais tarde chamadas de teorias de campo médio. Tais teorias são válidas apenas se  $d_{mf} > 4$ . O caso  $d = 4$  é chamado de dimensão crítica.

## 4 Grupo de Renormalização

Em resumo, todos os métodos aproximativos descritos nas seções anteriores não fomentam explicações para o seguinte [1]:

- Transições de fase contínuas caem em uma classe de universalidade caracterizada por dados valores dos expoentes críticos;
- Para dada classe de universalidade, existe uma dimensão crítica acima da qual os expoentes críticos tomam valores de campo médio;
- As relações entre os expoentes obtidos através de relações termodinâmicas são, na verdade, igualdades;
- Os expoentes apresentam uma simetria com relação à temperatura crítica: tendem ao mesmo valor acima e abaixo de  $T_C$ , e
- Os expoentes aparecem como sendo racionais em sistemas bidimensionais.

Então, o que falta é uma teoria matemática concisa para descrever tais fenômenos. Isso foi feito em 1971 por K. G. Wilson, quem ofereceu uma primeira abordagem.

O grupo de renormalização trabalha sobre um sistema modificando sua escala de comprimento, isto é, diminuindo os graus de liberdade de tal sistema. Na criticalidade, não importa o número de transformações, as propriedades do sistema permanecem inalterados porque os *pontos fixos da transformação* foram atingidos. Nessa situação, o comprimento de correlação,  $\xi$ , tende ao infinito: todas as escalas são importantes.

### 4.1 Definição do Grupo

Supondo-se que o sistema em estudo seja descrito por um Hamiltoniano  $\bar{\mathcal{H}} = \mathcal{H}/kT$ , então é aplicada uma *transformação de escala* sobre o sistema, dada pelo *operador de renormalização*,  $\mathbf{R}$ , para produzir um novo hamiltoniano  $\bar{\mathcal{H}}'$ :

$$\bar{\mathcal{H}}' = \mathbf{R}\bar{\mathcal{H}}. \quad (70)$$

O fator de escala define a redução de graus de liberdade do sistema  $d$ -dimensional, de  $N$  para  $N'$ :

$$b^d := \frac{N}{N'}. \quad (71)$$

O objetivo é que a energia livre total permaneça a mesma. Para tanto, é necessário que a função de partição seja invariante sob a transformação:

$$\mathcal{Z}_{N'}(\bar{\mathcal{H}}') = \mathcal{Z}_N(\bar{\mathcal{H}}). \quad (72)$$

A energia livre por spin é uma grandeza intensiva, assim

$$\bar{f}(\bar{\mathcal{H}}') = b^d f(\bar{\mathcal{H}}). \quad (73)$$

As medidas dos comprimentos do sistema, em relação a uma dada origem, ficam diminuídas por um fator  $b$ :

$$\vec{r}' = \frac{1}{b} \vec{r}. \quad (74)$$

Permita-se que as variáveis de spin transformem-se de acordo com  $\vec{s}' = c^{-1} \vec{s}$ , onde também se permite que  $c$  seja uma constante diferente de  $b$ . Por isso, a função de correlação, como depende de um produto de dois spins se transformará de acordo com:

$$\Gamma\left(\frac{1}{b} \vec{r}', \bar{\mathcal{H}}'\right) = \frac{1}{c^2} \Gamma(\vec{r}, \bar{\mathcal{H}}). \quad (75)$$

O objetivo é encontrar os *pontos fixos* da transformação de escala:

$$\bar{\mathcal{H}}' = \bar{\mathcal{H}} \equiv \bar{\mathcal{H}}^*. \quad (76)$$

Os pontos fixos são pontos de/para onde o sistema flui dependendo de suas condições iniciais. Deve-se ter em mente que o Hamiltoniano  $\bar{\mathcal{H}}$  é também função das coordenadas generalizadas. Portanto, a constância do Hamiltoniano ocasiona uma constância das coordenadas generalizadas. A figura abaixo ilustra o procedimento.

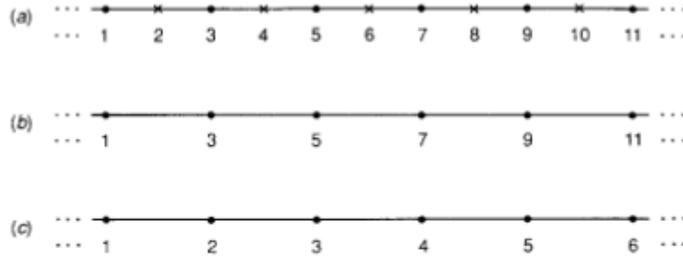


Figura 6: Transformação de uma rede unidimensional. Após a renormalização, os pontos são reindexados. Os pontos que “sobreviverem” às sucessivas operações são os pontos fixos.

Atrás, mencionou-se que todas as escalas, durante a criticalidade são importantes. Devido a tanto, o comprimento de correlação deve permanecer constante sob a transformação,  $\xi' = \xi \equiv \xi^*$ . Mas, com a mudança de escala,  $\xi' = (1/b)\xi$ , o que justifica o fato de  $\xi \rightarrow \infty$  na criticalidade (o caso  $\xi = 0$  é trivial e não é cabível ao problema).

## 4.2 Espaço de Fases e Universalidade

Para entender os conceitos de universalidade, permita-se definir o *Espaço de Fases* da transformação feita pelo grupo de renormalização. É sabido que todo Hamiltoniano pode ser escrito na forma genérica [1]

$$\overline{\mathcal{H}} = \sum_{\alpha} \vec{\mu} \cdot \vec{\theta}, \quad (77)$$

onde  $\vec{\theta}$  são os produtos de operadores com a devida simetria (no modelo de Ising englobam, por exemplo, operadores de spin).  $\vec{\mu}$  são chamados de *campos conjugados*, que marcam a posição do sistema em espaço de fases infinitamente-dimensional. Tais campos se transformam sob a operação de renormalização, e também possuem pontos fixos,

$$\vec{\mu}' = \mathbf{R}\vec{\mu} \quad \vec{\mu}' = \vec{\mu} \equiv \vec{\mu}^*. \quad (78)$$

Seja a expansão dos campos conjugados ao redor de algum ponto fixo,

$$\begin{aligned} \vec{\mu} &= \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu}, \\ \vec{\mu}' &= \vec{\mu}^* + \delta\vec{\mu}'. \end{aligned} \quad (79)$$

Expandindo em Taylor a parte esquerda da eq. (78),

$$\delta\vec{\mu}' = \mathbf{A}(\vec{\mu}^*)\delta\vec{\mu}, \quad (80)$$

em que a matriz  $\mathbf{A}$  deve ser calculada nos pontos críticos. Porém, são seus autovalores  $\lambda_i$  e seus autovetores  $\vec{v}_i$  os quais são determinantes para a determinação das propriedades críticas do Hamiltoniano.<sup>1</sup>

Os autovalores devem ter a forma:

$$\lambda_i(b) = b^{y_i}, \quad (81)$$

em virtude de seu comportamento sob a mudança de escalas. Essa hipótese é chamada de *hipótese de escala*, ou *de homogeneidade*. Equivalentemente, pode-se assumir que a energia livre seja uma função homogênea de suas variáveis [8]. Assim, se um sistema está próximo do comportamento crítico, é válida a expansão:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}^* + \sum_i g_i \vec{v}_i; \quad (82)$$

$$\vec{\mu}' = \vec{\mu}^* + \sum_i b^{y_i} g_i \vec{v}_i, \quad (83)$$

isto é,

$$g'_i = b^{y_i} g_i. \quad (84)$$

---

<sup>1</sup> Dos sistemas dinâmicos, sabemos que o sistema pode ser estudado apenas na vizinhança dos pontos críticos, [2]

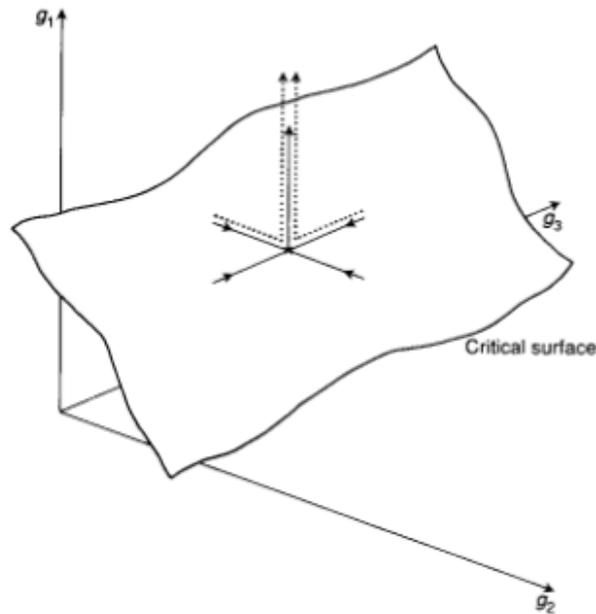


Figura 7: Sistema com duas variáveis irrelevantes ( $g_2$  e  $g_3$ ) e uma relevante ( $g_1$ ). As trajetórias pontuadas representam algum vetor  $\vec{\mu}$  que possui alguma componente em  $g_1$ , sendo arrastado para fora da superfície crítica. Extraído de [1].

Nas equações acima, só foi feita *uma* iteração (ou transformação). Mais adiante, mostrar-se-á que os  $y_i$  são, de fato, os expoentes críticos.

Para  $y_i > 0$ , o valor de  $g_i$  aumenta conforme se realizam as transformações, e o sistema é levado para longe do ponto fixo. No caso,  $y_i$  é chamado de *variável relevante*. Por outro lado, se  $y_i < 0$ , o sistema é levado ao ponto fixo, não importando as condições iniciais, e  $y_i$  é chamada de *variável irrelevante*. O caso  $y_i = 0$  é dita *variável marginal* e foge do escopo de estudo.

Concluindo: o comportamento do sistema é definido pela quantidade de variáveis relevantes e irrelevantes que possui. O conjunto das trajetórias no espaço de fases, que leva a um ponto fixo, definem uma curva chamada *superfície crítica*. Um vetor que possui um componente de  $\mu$  ao longo de uma trajetória, no espaço de fases, definida por uma variável relevante será movido para longe da superfície crítica.

Considere um sistema que possui pelo menos um ponto crítico não trivial. De acordo com o supracitado, próximo à criticalidade, a posição pode ser expandida em termos (lineares ou não) de campos relevantes e irrelevantes. Conforme se muda a escala do mesmo, os irrelevantes arrastarão o sistema juntamente ao ponto fixo, mas o contrário será feito pelos relevantes. Se os campos relevantes iniciais forem de pequena intensidade, as

trajetórias tenderão a ser próximas ao ponto fixo. Então, depois de dada evolução, e próximo ao ponto fixo, basta estudar o sistema próximo a tal ponto, linearizado [2], de modo que não importa sua origem. Por isso, todos os sistemas cujas trajetórias no espaço de fases estejam próximas do ponto fixo apresentarão os mesmos expoentes críticos  $y_i$  determinados pela matriz  $\mathbf{A}$ . Isso justifica a propriedade de universalidade.

### 4.3 Cálculo dos Expoentes

Proceda-se aos cálculos dos expoentes críticos. Serão demonstradas as igualdades entre eles, segundo o grupo de renormalização. Para tanto, considere a equação de energia livre para o espaço de fases (em vista de (77)),

$$\bar{f}_s(\vec{\mu}) = (1/b^d)\bar{f}_s(\vec{\mu}'). \quad (85)$$

Aqui, assume-se que a densidade de energia livre possa ser separada como uma soma de duas partes [8]: uma parte homogênea e a parte que contém todo o fenômeno da criticalidade, leia-se  $\bar{f}_s$ .

Como estudar-se-á o sistema próximo a sua criticalidade,

$$(82),(83) \Rightarrow \bar{f}_s(g_1, g_2, g_3, \dots) \sim b^{-d}\bar{f}_s(b^{y_1}g_1, b^{y_2}g_2, b^{y_3}g_3, \dots). \quad (86)$$

A equação acima é chamada de *forma de escala* da energia livre.

Agora, a energia livre tem duas variáveis relevantes:  $h := H/kT$ , e  $t$ . Seja  $g_1 = t$ ,  $g_2 = h$  e que todos as demais sejam irrelevantes.

$$\bar{f}_s(t, h, g_3, \dots) \sim b^{-d}\bar{f}_s(b^{y_1}t, b^{y_2}h, b^{y_3}g_3, \dots), \quad \text{quando } t, h, g_3, \dots \rightarrow 0. \quad (87)$$

De acordo com a tabela da seção #2, (2.3),

$$C_h \sim \left( \frac{\partial^2 \bar{f}_s}{\partial t^2} \right)_{h=0} \sim |t|^{-\alpha}. \quad (88)$$

Mas, de (87), tem-se

$$\bar{f}_{tt}(t, 0) \sim b^{-d+2y_1}\bar{f}_{tt}(b^{y_1}t, 0). \quad (89)$$

$b$  é um parâmetro livre. Escolha-se  $b^{y_1}|t| = 1$ . Assim,

$$\bar{f}_{tt}(t, 0) \sim |t|^{(d-2y_1)/y_1}\bar{f}_{tt}(\pm 1, 0), \quad (90)$$

$$\alpha = 2 - d/y_1. \quad (91)$$

Como um último exemplo do cálculo de expoentes, se calculará  $\beta$ . Lembrando que:

$$M \sim \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{H}} \right)_{t, H \rightarrow 0}, \quad (92)$$

tem-se

$$M \sim \bar{f}_h \Big|_{h \rightarrow 0} \sim (-t)^\beta; \quad (93)$$

$$\bar{f}_h(t, h) \sim b^{-d+y_2} \bar{f}_h(b^{y_1} t, b^{y_2} h) \sim (-t)^\beta; \quad (94)$$

$$b^{y_1}(-t) = 1 \Rightarrow (-t)^{(d-y_2)/y_1} \bar{f}_h(-1, 0) \sim (-t)^\beta; \quad (95)$$

$$\therefore \beta = (d - y_2)/y_1; \quad (96)$$

Outras equações também podem ser derivadas de modo semelhante:

$$\gamma = (2y_2 - d)/y_1; \quad (97)$$

$$\delta = y_2/(d - y_2). \quad (98)$$

Eliminando as variáveis  $y_1$  e  $y_2$  das equações acima, obtém-se

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2; \quad (99)$$

$$\gamma = \beta(\delta - 1). \quad (100)$$

Compare com as desigualdades obtidas no capítulo #2.

Observe que os comprimentos são reescalados como  $b \sim |t|^{1/y_1}$ . Portanto,

$$\nu = 1/y_1. \quad (101)$$

Notar que a equação acima combinada com (91) produz:

$$2 - \alpha = \nu d. \quad (102)$$

Para o cálculo de  $\eta$ , utilizaremos a função de correlação:

$$\Gamma(\vec{r}, t, h, g_3, \dots) \sim c^2(b) \Gamma(b^{-1} \vec{r}, b^{y_1} t, b^{y_2} h, b^{y_3} g_3, \dots); \quad (103)$$

$$h, g_3, \dots \rightarrow 0 \Rightarrow \Gamma(\vec{r}, t) \sim c^2(|t|^{-1/y_1}) \Gamma(|t|^{1/y_1} \vec{r}, \pm 1). \quad (104)$$

Na criticalidade,

$$\Gamma(\vec{r}) \sim r^{-(d-2+\eta)}. \quad (105)$$

Comparando-se com a equação (104),

$$c^2(b) = b^{-(d-2+\eta)/2} \quad \therefore c = c(b). \quad (106)$$

Só resta o cálculo de  $\eta$ . Lembrando que:

$$\chi_T \sim N \int \Gamma(r) r^{d-1} dr, \quad (107)$$

e usando (105), e efetuando a substituição  $r = x\xi$  tem-se:

$$\chi_T \sim \xi^{2-\eta}, \text{ mas,} \quad (108)$$

$$\chi_T \sim |t|^{-\gamma}, \xi \sim |t|^{-\nu}; \quad (109)$$

Finalmente,

$$\frac{\gamma}{\nu} = 2 - \eta. \quad (110)$$

Logo, todas as desigualdades evidenciadas na seção primeira, na verdade são igualdades. Resta apenas explicar o fato de os expoentes, para dimensões maiores que 2, serem racionais, e também a existência de uma dimensão crítica.

A explicação para a racionalidade só surgiu em 1984, quando se percebeu que além de sistemas na criticalidade apresentarem invariância de escala, também apresentam invariância quando se aplica uma *transformação conforme* [9]. As transformações conformes é uma ferramenta da matemática complexa que mapeiam o plano bidimensional em outro, através de mudanças angulares, quando a dimensão for igual a 2. Com a invariância conforme, é possível mostrar que os expoentes para  $d > 2$  dimensões são números racionais, e são funções contínuas.

A existência de uma dimensão crítica pode ser explicada pela forma *contínua* do modelo de Ising, que admite a forma:

$$\mathcal{H} \sim \int (r + q^2) |m(q)|^2 dq + \int \int \int u m(q_1)m(q_2)m(q_3)m(-q_1 - q_2 - q_3) dq_1 dq_2 dq_3, \quad (111)$$

em que se permite que a magnetização  $m$  varie espacialmente. O primeiro termo é quadrático e o segundo é quártico.  $u$  e  $r$  são os parâmetros a serem analisados.

A renormalização fornece as equações, em aproximação:

$$\begin{aligned} r' &= 4[r + 3cu/(1+r)], \\ u' &= 2^\epsilon [u - 9cu^2/(1+r)^2], \end{aligned} \quad (112)$$

em que  $\epsilon = 4 - d$ , e  $c$  uma constante. Se a dimensionalidade é  $d > 4$ , há um único ponto fixo em  $(r^*, u^*) = (0, 0)$ , porém se o contrário ocorre, os pontos fixos dependem do parâmetro  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} r^* &= -\frac{4\epsilon \ln 2}{9}; \\ u^* &= -\frac{\epsilon \ln 2}{9c}; \end{aligned} \quad (113)$$

e portanto depende da dimensão. Se  $d > 4$ , os expoentes independem da dimensão e tomam os valores médios. O processo é conhecido como *expansão*- $\epsilon$ .

#### 4.4 Exemplo [10]

Como exemplo de renormalização, considere-se o Hamiltoniano (de Ising, sem a parte paramagnética):

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1}, \quad (114)$$

em que  $s_i = \pm 1$ ,  $s_{N+1} = s_1$ . Renormalizando por um fator de escala  $b = 2$ , selecionam-se, por exemplo, os termos pares de spin do Hamiltoniano original. Se  $Tr$  representa o traço, a função de partição é expressa por:

$$\mathcal{Z}_N(J) = \text{Tr} \exp \left( \beta J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} \right) = \sum_{s_i = \pm 1} \exp [\beta J (s_1 s_2 + s_2 s_3 + \dots)]. \quad (115)$$

Como é necessário que a função de partição tenha a mesma forma que a original,

$$\sum_{s_1 = \pm 1} e^{\beta J s_1 (s_2 + s_3)} = A(J) e^{J'(J) s_1 s_2}, \quad (116)$$

onde  $A(J)$  e  $J'(J)$  se calculam via sistema de equações, e valem:

$$\begin{aligned} A(J) &= 2(\cosh 2\beta J)^{1/2}, \\ J'(J) &= \frac{1}{2\beta} \ln(\cosh 2\beta J). \end{aligned} \quad (117)$$

A última equação fornece a transformação. Porém, procurando as soluções de  $J' = J$  os pontos fixos ocorrem em  $T = 0, \infty$ , apenas soluções triviais, evidenciando que o modelo não tem transições, como esperado. O processo de somar sobre conjuntos de spins é chamado, apenas por curiosidade, de *decimação*. Mesmo que o termo paramagnético seja incluído, em uma dimensão, não há transição (ou a transição ocorre a pontos triviais) [8].

## 5 Conclusão

Em suma, neste trabalho foi apresentada uma breve introdução ao grupo de renormalização. Iniciou-se com uma revisão de conceitos estabelecidos na mecânica Estatística e em termodinâmica, como a função de partição e como se calcula, através dela, o potencial termodinâmico e as grandezas passíveis de medida, como magnetização e suas características como susceptibilidade e calor específico. Mostrou-se as desigualdades entre os expoentes.

Em seguida, apresentou-se os modelos e os resultados destes oriundos, como o fato de os expoentes serem racionais. Após, os estudos com a matriz de transferência tiveram enfoque no modelo de Ising, em que evidenciou-se transição em temperatura zero para uma rede unidimensional.

Uma breve síntese sobre expansões em série foi dissertada, e sua contribuição para o estudo do comportamento em lei de potência por parte das grandezas termodinâmicas durante a criticalidade.

A teoria de campo médio também foi apresentada, na qual salientou-se a existência de uma dimensão crítica.

Finalmente, introduziu-se o grupo de renormalização. Definindo uma transformação espacial e um espaço de fases, mostrou-se que os expoentes são os mesmos se se atinge a temperatura crítica  $T_C$  por baixo ou por cima. Os expoentes foram calculados, as relações de igualdade entre os mesmos também. O fato de os expoentes serem racionais foi explicado devido à sua invariância sob transformação conforme, e a existência de uma dimensão crítica foi justificada pela expansão- $\epsilon$ .

O panorama atual de pesquisa em torno dos grupos de renormalização se dá em áreas como física nuclear, cosmologia, física computacional. Em física nuclear [5], [6] é utilizado a fim de estudar sistemas de muitos corpos nucleônicos, bem como para a interação entre quarks de muitos sabores. Em cosmologia [7] pode ser utilizado para o entendimento da Era de Planck, e em gravitação quântica. No que concerne ao estudo do grupo em si, subsequentemente ao grupo de normalização foram criados os chamados Modelos Hierárquicos [3], os quais podem ser utilizados para o estudo, por exemplo, do gás de Coulomb [4].

## Referências

- [1] Yeomans, J. M.: *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Oxford Science Publications, (1997);
- [2] Monteiro, L. H. A.: *Sistemas Dinâmicos*, Ed. Livraria da Física, 1<sup>a</sup> ed. (2002);
- [3] Marchetti, D. H. U.: *Renormalization Group in Statistical Mechanics: ideas, techniques and analysis*, Lecture Notes, IFUSP. (1996);
- [4] Guidi, L. F.; Marchetti, D. H. U.: *Renormalization Group Flow of the Two-Dimensional Hierarchical Coulomb Gas*, Communications in Mathematical Physics 219,671-702. (2001);
- [5] Bogner, S. K.; Furnstahl, R. J.; Perry, R. J.: *Similarity renormalization group for nucleon-nucleon interactions*, Physical Review C,75 (2007);
- [6] Schäfer, T.; Wilczek; *High density quark matter and the renormalization group in qcd with two and three flavours*, Physic Letters B, v. 450, issue 4. (1999);
- [7] Bonnano, A.; Reuter, M.: *Cosmology of the Planck Era from a Renormalization Group for Quantum Gravity*, INFNCT/4/01, MZ-TH/01-18 (2001);
- [8] Salinas, Sílvio R. A.: *Introdução à Física Estatística*, Edusp, São Paulo, (1999);
- [9] Belavin, A. A.; Polyakov, A. M.; Zamolodchikov, A. B.: *Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory* Nucl. Phys. B 241 (2), 333-380 (1984);
- [10] Thompson, C. J.: *Classical Equilibrium Statistical Mechanics* , Oxford Science Publications, (1988).