

Transições de fase térmicas e teoria de campo médio

Eric C. Andrade

Sumário

| | | |
|---|---|----|
| 1 | Transições de fase térmicas | 2 |
| 2 | Solução de campo médio | 5 |
| 3 | Flutuações e critério de Ginzburg | 12 |
| 4 | Teoria de Landau | 13 |
| 5 | Transição de Berezinsky–Kosterlitz–Thouless (BKT) | 17 |

1 Transições de fase térmicas

Até este ponto no curso temos discutido muito o conceito de transição de fase e ordens de longo alcance, mas não tratamos estes conceitos de maneira não muito rigorosa e gostaríamos agora de nos aprofundar um pouco neles. Por simplicidade, vamos nos focar no modelo de Ising ferromagnético ($J < 0$) com acoplamento entre primeiros vizinhos na presença de um campo externo h

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z - h \sum_i S_i^z. \quad (1)$$

Por simplicidade escreveremos aqui $|J| = J$. Essencialmente, nos perguntaremos quais fases termodinâmicas esse modelo mostra como função da temperatura, suas características e a transição entre elas. A maior parte das ideias desenvolvidas aqui se aplica diretamente a outros modelos, como o de Heisenberg e mesmo modelos não magnéticos.

No caso do modelo de Ising, temos que abaixo de uma temperatura crítica T_c o sistema apresenta uma magnetização espontânea

$$M = \sum_i \langle S_i^z \rangle \neq 0 \text{ para } T < T_c. \quad (2)$$

A magnetização de um ferromagneto é um exemplo de um *parâmetro de ordem*, cuja característica principal é ser nulo acima da temperatura T_c crítica e não nulo abaixo dela. O conceito do parâmetro de ordem é extremamente importante na teoria das transições de fase. Ele representa uma nova variável termodinâmica necessária para a descrição da fase ordenada (ferromagnética no caso acima). Note que a transição ferromagnética é acompanhada por uma quebra da simetria de reversão temporal (lembre que $\vec{S}_i \rightarrow -\vec{S}_i$ sob reversão temporal e que na fase ordenada $\langle \vec{S}_i \rangle \neq \langle -\vec{S}_i \rangle$!). Esse é um exemplo de uma quebra espontânea de simetria, pois o Hamiltoniano em (1) de Ising é invariante sob reversão temporal.

Na medida em que a temperatura vai se aproximando de T_c , para $T < T_c$, a magnetização espontânea vai diminuindo seu valor até que ela se anula exatamente em T_c . É exatamente o fato de que M cresce a partir de zero para $T < T_c$ que caracteriza a transição como contínua, ou de segunda ordem, Fig. 1(a). Se M tivesse um salto em T_c a transição seria de primeira ordem ou descontínua, Fig. 1(b)

Próximo de T_c o comportamento de M tem a seguinte forma

$$M \sim (T_c - T)^\beta, \quad (3)$$

onde o sinal \sim deve ser lido como vai com a temperatura da seguinte forma (ou seja, estamos mais interessados na lei de potência que no coeficiente do termo do lado direito). O expoente β é um exemplo de um expoente crítico. A caracterização desses expoentes determina a classe de universalidade do problema.

Consideremos agora outras quantidades físicas. Próximo de T_c , o calor específico apresenta uma fraca divergência

$$C_V(T) \sim t^{-\alpha}, \quad (4)$$

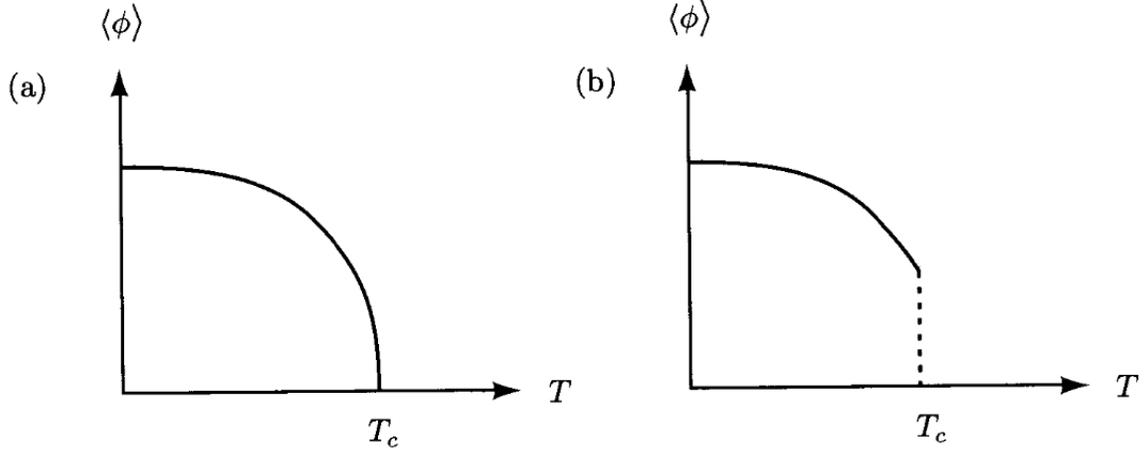


Figura 1: Parâmetro de ordem como função da temperatura T para uma transição (a) de segunda ordem e (b) de primeira ordem. T_c é a temperatura crítica na qual a transição ocorre.

onde t é conhecida como temperatura reduzida e é dada por

$$t \equiv \frac{|T - T_c|}{T_c}. \quad (5)$$

A dependência da magnetização com o campo magnético aplicado (suposto pequeno) exatamente em $T = T_c$ também define um expoente crítico

$$M(h, T = T_c) \sim h^{1/\delta}. \quad (6)$$

A susceptibilidade magnética χ , também é divergente

$$\chi \equiv \frac{1}{N} \left. \frac{\partial M}{\partial h} \right|_{h \rightarrow 0} \sim t^{-\gamma}. \quad (7)$$

É interessante notarmos que a susceptibilidade magnética mede as *flutuações* dos spins. Para vermos isso, primeiramente definimos a função partição para o problema

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{S_i^z\}} e^{-\beta \mathcal{H}}, \\ &= \sum_{\{S_i^z\}} e^{\beta (J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + h \sum_i S_i^z)}, \\ &= \text{Tr} \left[e^{\beta (J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + h \sum_i S_i^z)} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Aqui $\text{Tr}[\dots] = \sum_{\{S_i^z\}} \dots$ significa traço sobre todas as 2^N configurações de spin nas quais cada spin possui valores $S_i^z = \pm 1$. Agora reescrevemos a magnetização na Eq. 2 em termos de \mathcal{Z}

$$M = \sum_i \langle S_i^z \rangle = \left\langle \sum_i S_i^z \right\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[\left(\sum_i S_i^z \right) e^{\beta (J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + h \sum_i S_i^z)} \right]. \quad (9)$$

A susceptibilidade então é dada por

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{1}{N} \frac{\partial M}{\partial h} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial h} \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[\left(\sum_i S_i^z \right) e^{\beta(J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + h \sum_i S_i^z)} \right] \\
&= \frac{\beta}{N} \left\{ \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[\left(\sum_i S_i^z \right) \left(\sum_j S_j^z \right) e^{-\beta \mathcal{H}} \right] - \frac{1}{\mathcal{Z}^2} \text{Tr} \left[\left(\sum_i S_i^z \right) e^{-\beta \mathcal{H}} \right] \text{Tr} \left[\left(\sum_i S_i^z \right) e^{-\beta \mathcal{H}} \right] \right\} \\
&= \frac{\beta}{N} \left\{ \left\langle \left(\sum_i S_i^z \right)^2 \right\rangle - \left(\sum_i \langle S_i^z \rangle \right)^2 \right\}. \tag{10}
\end{aligned}$$

Ou seja, χ mede as flutuações ao redor do valor médio de $\sum_i S_i^z$, que nada mais é do que a magnetização. O fato de que χ diverge em T_c ressalta que as flutuações dos spins também o fazem.

Mais dois expoentes críticos podem ser definidos. Eles envolvem o comportamento da função correlação entre spins distantes entre si. Podemos definir a função correlação (conectada) da seguinte maneira

$$G_{ij} = \langle S_i^z S_j^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle, \tag{11}$$

Note que os valores esperados $\langle S_i^z \rangle$ e $\langle S_j^z \rangle$ são nulos para $T > T_c$ e não nulos do contrário. Assim como fizemos para a susceptibilidade, podemos definir G_{ij} em termos da função partição. Para isso tal é conveniente assumirmos que o campo externo h é agora dependente do sítio: $h \sum_i S_i^z \rightarrow \sum_i h_i S_i^z$ de tal forma que

$$\begin{aligned}
G_{ij} &= -T^2 \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} \ln \mathcal{Z}, \tag{12} \\
&= T \frac{\partial}{\partial h_i} \left[\frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[S_j^z e^{-\beta \mathcal{H}} \right] \right], \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left[S_i^z S_j^z e^{-\beta \mathcal{H}} \right] - \frac{1}{\mathcal{Z}^2} \text{Tr} \left[S_i^z e^{-\beta \mathcal{H}} \right] \text{Tr} \left[S_j^z e^{-\beta \mathcal{H}} \right], \\
&= \langle S_i^z S_j^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle.
\end{aligned}$$

Claramente, G_{ij} na Eq. (11) mede a correlação entre os spins em \vec{r}_i e \vec{r}_j e deve ser uma função apenas da distância relativa entre dois sítios: $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$. Observa-se que, se $T \neq T_c$ existe um comprimento característico $\xi(T)$, chamado de comprimento de correlação, que determina a escala de decaimento de $G_{ij} \equiv G(\vec{r})$ para longas distâncias

$$G(\vec{r}) \sim \frac{1}{\xi^{D-2}} \frac{e^{-r/\xi}}{(r/\xi)^{(D-1)/2}}, \quad r \gg \xi. \tag{13}$$

Dessa forma, spins separados de uma distância $r \gg \xi$ estarão descorrelacionados. Exatamente em $T = T_c$, a função de correlação obedece uma lei de potência

$$G(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^{D-2+\eta}}, \tag{14}$$

que define o expoente crítico η , também chamado de dimensão anômala. Temos também que

$$\xi \sim t^{-\nu}. \quad (15)$$

Exatamente em $T = T_c$ o comprimento de correlação é infinito. A divergência do comprimento de correlação é uma das características principais das transições de segunda ordem, pois ele não diverge nas transições de primeira ordem. Veremos mais adiante que isso está intimamente ligado ao fenômeno da universalidade. Definimos, portanto, 6 expoentes críticos diferentes. Na verdade, eles não são todos independentes, existem 4 relações entre eles, de modo que há apenas 2 expoentes a determinar.

2 Solução de campo médio

Soluções exatas para o problema de transições de fase são raras e, de modo geral, precisamos de tratamentos aproximados que nos permitam estudar transições de fase. Tal abordagem existe e é conhecida como teoria de campo médio. Nesta seção, desenvolveremos a teoria de campo médio para o modelo de Ising ferromagnético, Eq. (1). Grosso modo, a ideia de uma abordagem de campo médio é mapear o problema interagente em um problema não interagente efetivo.

Em seu limite não interagente, $J = 0$, modelo de Ising ferromagnético, Eq. (1), pode ser resolvido exatamente. Claro que nesse caso só conseguimos descrever a solução paramagnética, mesmo assim é instrutivo começarmos com esse limite. A função partição, Eq. (8) é dada nesse caso por

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_{\{S_i^z\}} e^{\beta h \sum_i S_i^z} \\ &= \prod_{i=1}^N (e^{\beta h} + e^{-\beta h}) \\ &= [2\cosh\beta h]^N. \end{aligned} \quad (16)$$

A energia livre é então (em unidades nas quais $k_B = 1$, ou seja $\beta = 1/T$)

$$\begin{aligned} F &= -T \ln \mathcal{Z} \\ &= -NT \ln [2\cosh h/T]. \end{aligned} \quad (17)$$

A magnetização, por sua vez, é dada por

$$\begin{aligned} M &= -\frac{\partial F}{\partial h} \\ &= N \tanh \left[\frac{h}{T} \right], \end{aligned}$$

o que leva à seguinte susceptibilidade

$$\chi = \frac{1}{N} \left. \frac{\partial M}{\partial h} \right|_{h=0} = \frac{1}{T}. \quad (18)$$

Uma dependência do tipo $\chi = C/T$ é conhecida como lei de Curie, onde C é a constante de Curie. Esta dependência da susceptibilidade magnética com o inverso da temperatura é rotineiramente observada em sistemas magnéticos a altas temperaturas ($T \gg J$).

Uma maneira de gerarmos uma teoria de campo médio para o modelo de Ising é a *teoria de campo médio de Weiss*. A teoria de Weiss parte da suposição de que cada spin pode ser escrito como seu valor médio mais flutuações em torno da média

$$S_i^z = \langle S_i^z \rangle + \delta S_i^z, \quad (19)$$

assim o termo de interação entre spins na Eq. (1) é dado por

$$\begin{aligned} S_i^z S_j^z &= \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle + \langle S_i^z \rangle \delta S_j^z + \delta S_i^z \langle S_j^z \rangle + \mathcal{O}((\delta S^z)^2) \\ &= -\langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle + \langle S_i^z \rangle S_j^z + S_i^z \langle S_j^z \rangle, \end{aligned} \quad (20)$$

onde desprezamos termos quadráticos nas flutuações de spin e reescrevemos as flutuações em termos dos spins originais. A Eq. (8) se reduz agora a

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} m_i m_j - \sum_i \left(J \sum_j m_j + h \right) S_i^z, \quad (21)$$

onde $m_j = \langle S_j^z \rangle$ é a magnetização *local* no sítio j e a soma sobre j no segundo termo se estende sobre todos os z primeiros vizinhos do sítio i . Escrita deste modo, vemos que agora a Hamiltoniana de Ising possui uma forma não interagente, na qual um spin sente não apenas o campo externo h , mas sim um campo médio, ou campo de Weiss, dado por

$$h_W^i = J \sum_j m_j + h, \quad (22)$$

que é o campo externo h mais um campo local no sítio i vindo da magnetização dos spins vizinhos.

Por simplicidade, vamos nos focar inicialmente no caso uniforme no qual $\langle S_j^z \rangle = m_j = m$, independente do sítio j . Nesse caso

$$\mathcal{H} = J \frac{Nz}{2} m^2 - \underbrace{(Jzm + h)}_{h_W} \sum_i S_i^z. \quad (23)$$

A sua solução é agora similar àquela do caso não interagente e temos

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= e^{-\beta N J z m^2 / 2} [2 \cosh \beta h_W]^N, \\ F &= J \frac{Nz}{2} m^2 - NT \ln [2 \cosh h_W / T]. \end{aligned} \quad (24)$$

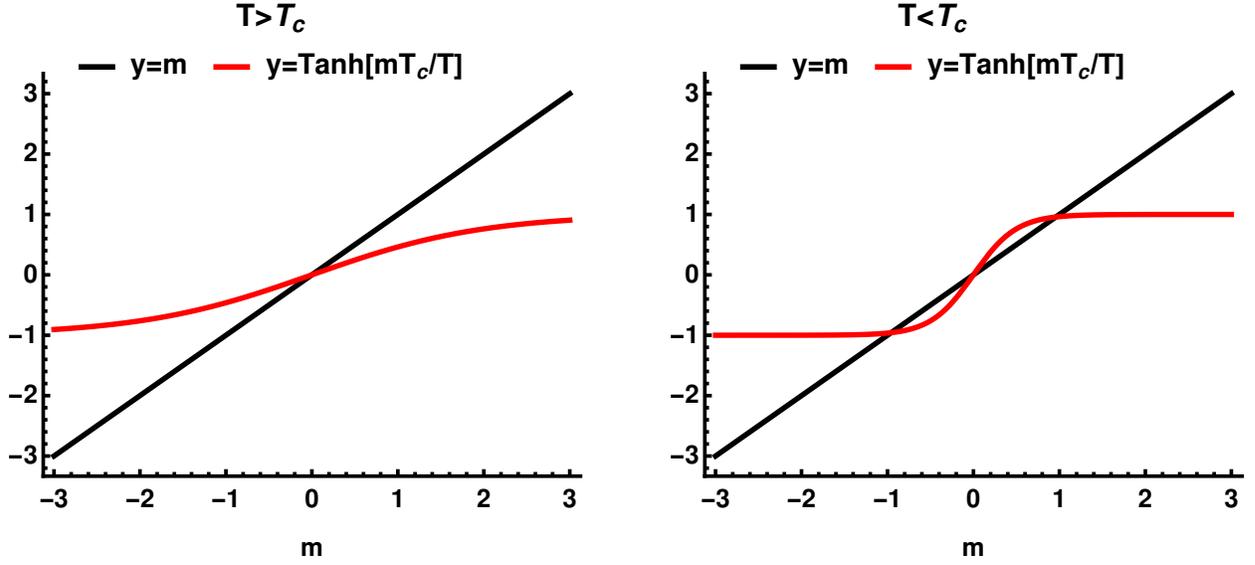


Figura 2: Solução gráfica da equação da teoria de campo médio de Weiss ($h = 0$) para (a) $T > T_c = zJ$ (uma solução estável em $m = 0$) e (b) $T < T_c$ (duas soluções estáveis com $m \neq 0$ e uma instável em $m = 0$).

A magnetização, por sítio $m = M/N$, é agora dada por

$$\begin{aligned}
 m &= \tanh \left[\frac{h_W}{T} \right] \\
 &= \tanh \left[\frac{1}{T} (Jzm + h) \right], \tag{25}
 \end{aligned}$$

que é uma equação autoconsistente para a magnetização local m . Note que a mesma equação pode ser obtida supondo m um parâmetro variacional e minimizando a energia livre em relação a m (ver adiante mais detalhes). O método mais fácil de solução dessa equação é o método gráfico. Basta plotar as curvas $y = m$ e $y = \tanh(\beta h + \beta z J m)$ como funções de m e procurar pela(s) interseção(ões), ver Fig. 2. O caso $h = 0$ é bem simples. Se $\beta z J < 1$, ou seja, $T > zJ \equiv T_c$, a inclinação da tangente hiperbólica em $m = 0$ é menor que 1 e há apenas uma solução: $m = 0$. Essa solução é estável, no sentido de que é um mínimo da energia livre. Já se $\beta z J > 1$ ou $T < T_c$, 3 soluções aparecem: a solução $m = 0$, que passa a ser instável, e duas soluções em $m = \pm m_W \neq 0$, que são estáveis. Isso parece ter a fenomenologia correta de um ferromagneto. À medida que $T \rightarrow T_c^-$, as 3 soluções acima se juntam em $m = 0$. Ou seja a temperatura crítica do sistema é dada por

$$T_c = zJ. \tag{26}$$

Podemos expandir a Eq. (25) para m pequeno e $h \rightarrow 0$, usando

$$\tanh x \approx x - \frac{x^3}{3}, \tag{27}$$

obtemos¹

$$\begin{aligned}
m(T, h = 0) &\approx \frac{T_c}{T} m - \frac{1}{3} \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 m^3 \\
\implies m(T, h = 0) &\approx \sqrt[3]{3 \frac{T_c - T}{T_c}} \sim t^{1/2}.
\end{aligned} \tag{28}$$

Assim a teoria de Weiss prevê $\beta = 1/2$. Analogamente, em $T = T_c = zJ$ temos

$$\begin{aligned}
m(T_c, h) &\approx (m + h/T_c) - \frac{1}{3} (m + h/T_c)^3 \\
\implies m(T_c, h) &\approx (3h/T_c)^{1/3} - h/T_c \approx (3h/T_c)^{1/3} \sim h^{1/3}.
\end{aligned}$$

Obtemos assim $\delta = 3$ pela teoria de Weiss.

Utilizando a Eq. (25), podemos agora calcular a susceptibilidade

$$\begin{aligned}
\chi &= \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} = \frac{1/T + (T_c/T) \overbrace{(\partial m / \partial h)}^x}{\cosh^2((T_c/T) m)}, \\
\chi &= \frac{1}{T \cosh^2((T_c/T) m) - T_c}.
\end{aligned} \tag{29}$$

Para $T > T_c$ temos $m = 0$ e a Eq. (29) se reduz a

$$\chi = \frac{1}{T - T_c}. \tag{30}$$

A Eq. (30) é conhecida como lei de Curie-Weiss. Ela é uma modificação da lei de Curie na Eq. (18) e captura a transição para um estado ferromagnético em T_c . Já para $T < T_c$, mas ainda com $m \rightarrow 0$ temos

$$\begin{aligned}
\chi &\approx \frac{1}{T(1 + m^2/2)^2 - T_c} \approx \frac{1}{T(1 + m^2) - T_c}, \\
&\approx \frac{1}{T(1 + 3(T_c - T)/T_c) - T_c} \approx \frac{1}{T - T_c + 3(T_c - T)}, \\
&\approx \frac{1}{2(T_c - T)}.
\end{aligned} \tag{31}$$

Acima, na passagem da segunda para a terceira linha utilizamos a Eq. (28). Tanto a Eq. (30) quanto a Eq. (31) nos dão

$$\chi \sim t^{-1}, \tag{32}$$

donde concluímos que $\gamma = 1$.

Para o cálculo do calor específico, precisamos da energia livre por sítio $f = F/N$. Da Eq. (24), com

¹Como estamos nos atendo às vizinhanças do ponto crítico, onde $m \rightarrow 0$, só manteremos o primeiro termo em $T_c - T$. Sendo assim, sempre faremos $T \rightarrow T_c$ em termos de ordens superiores.

$h \rightarrow 0$, temos que

$$\begin{aligned}
f &\approx \frac{1}{2}Tm^2 - T\ln 2 - T_c \ln \left[1 + \frac{m^2}{2} + \frac{hm}{T} + \frac{m^4}{24} \right], \\
&\approx -T\ln 2 + T\frac{1}{2}m^2 - T_c \left(\frac{m^2}{2} + \underbrace{\frac{m^4}{24} - \frac{m^4}{8}}_{-m^4/12} \right) - hm, \\
&\approx -T\ln 2 + \frac{1}{2}(T - T_c)m^2 + \frac{1}{12}T_cm^4 - hm,
\end{aligned} \tag{33}$$

onde mantivemos apenas o primeiro termo não nulo em h . Note que nesta expansão $f + T\ln 2$ possui apenas um mínimo, com uma curvatura positiva, em $m = 0$ para $T > T_c$. Já para $T < T_c$ a curvatura na origem passa a ser negativa e $m = 0$ é agora um ponto de máximo. Os pontos de mínimos estão agora localizados em $\pm m_W$ como esperado. Podemos utilizar a Eq. (28) para escrevermos f nas vizinhanças de T_c , com $h = 0$

$$f = \begin{cases} -T\ln 2 & T > T_c \\ -T\ln 2 - 3(T_c - T)^2 / 4T_c & T < T_c \end{cases}. \tag{34}$$

De posse da Eq. (34), podemos calcular o calor específico $c_V = C_V/N$ como

$$c_V = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} = \begin{cases} 0 & T > T_c \\ 3/2 & T < T_c \end{cases},$$

ou seja a teoria de campo médio dá uma descontinuidade no calor específico, mas não há singularidade. Sendo assim temos

$$c_V \sim t^0, \tag{35}$$

e portanto a teoria de campo médio de Weiss fornece $\alpha = 0$. Notamos que esta expressão para o calor específico está associada apenas aos graus de liberdade magnéticos, que por sua vez estão associados com o desenvolvimento da ordem de longo alcance. Sempre haverá outras contribuições não singulares (por exemplo calor específico da rede) que devem ser adicionados a esse resultado para a resposta final.

Para determinarmos os expoentes críticos ν e η , é preciso introduzir flutuações espaciais. Essas podem ocorrer devido a flutuações térmicas ou devido a um campo externo variável no espaço. Nesse caso, devemos admitir a possibilidade de que m_i varie no espaço. Combinando as Eqs. (22) e (25) podemos escrever para este caso que

$$\begin{aligned}
m_i &= \frac{\partial f}{\partial h_i} = \tanh \left[\frac{1}{T} \left(J \sum_j m_j + h_i \right) \right] \\
&\approx \frac{1}{T} \left(J \sum_j m_j + h_i \right) - \frac{1}{3T^3} \left(J \sum_j m_j + h_i \right)^3.
\end{aligned} \tag{36}$$

Agora é conveniente que tomemos o limite do contínuo. Neste caso podemos imaginar que o parâmetro de rede $a \rightarrow 0$ mas com $V = Na^d$ permanecendo constante. Fisicamente, ele quer dizer que o comprimento de correlação $\xi \gg a$ e assim podemos tratar variações na ordem de a como contínuas. Na prática, transformaremos diferenças finitas em derivadas. Começaremos por reescrever o seguinte termo

$$\begin{aligned} \sum_j m_j &= \sum_{\vec{\delta}} m(\vec{r}_i + \vec{\delta}) \\ &\approx \sum_{\vec{\delta}} \left(m(\vec{r}_i) + \delta_\alpha \nabla_\alpha m(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \delta_\alpha \delta_\beta \nabla_\alpha \nabla_\beta m(\vec{r}_i) \right), \\ &= zm(\vec{r}_i) + \nabla^2 m(\vec{r}_i). \end{aligned} \quad (37)$$

Acima utilizamos a notação padrão de que $\vec{\delta}$ é um vetor unitário que conecta o sítio i aos seus primeiros vizinhos em j . Os termos de primeira ordem em δ e os termos cruzados de segunda ordem se anulam por simetria na soma sobre primeiros vizinhos e obtemos o resultado acima. Combinando as Eqs. (36) e (37) temos

$$[(T - T_c) - J\nabla^2] m(\vec{r}_i) - \frac{T_c}{3} m(\vec{r}_i)^3 = h_i. \quad (38)$$

Agora utilizaremos a definição da função de correlação na Eq. (12)

$$G_{ij} = -T^2 \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} \ln \mathcal{Z} = T \frac{\partial^2 f}{\partial h_i \partial h_j} = T \frac{\partial m(\vec{r}_j)}{\partial h_i}, \quad (39)$$

que combinada com a Eq. (38) acima nos dá, fazendo o termo cúbico igual a zero (o que é equivalente a resolver o problema para $T > T_c$)

$$[(T - T_c) - J\nabla^2] G_{ij} = T\delta_{ij}. \quad (40)$$

Para prosseguirmos é conveniente introduzirmos a transformada de G_{ij}

$$G_{ij} = \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{ij}} G(\vec{k}). \quad (41)$$

No espaço de Fourier a Eq. (40) é agora dada por

$$\begin{aligned} [(T - T_c) + Jk^2] G(\vec{k}) &= T, \\ G(\vec{k}) &= \frac{T/J}{(T - T_c)/J + k^2}, \\ \implies G(\vec{k}) &\sim \frac{T/J}{\xi^{-2} + k^2}, \end{aligned} \quad (42)$$

onde definimos o comprimento de correlação

$$\xi = \left(\frac{J}{T - T_c} \right)^{1/2}. \quad (43)$$

| Quantidade física | Índice | Campo médio | Ising em $D = 2$ | Ising em $D = 3$ | Heisenberg |
|---------------------------|----------|-------------|------------------|------------------|------------|
| Calor específico | α | 0 (salto) | 0 (log) | 0.110(1) | -0.112(2) |
| Parâmetro de ordem | β | 1/2 | 1/8 | 0.3265(3) | 0.362(4) |
| Susceptibilidade | γ | 1 | 7/4 | 1.2372(5) | 1.389(1) |
| Parâmetro de ordem | δ | 3 | 15 | 4.789(2) | 4,84(4) |
| Comprimento de correlação | ν | 1/2 | 1 | 0.6301(4) | 0.704(6) |
| Função de correlação | η | 0 | 1/4 | 0.0364(5) | 0.027 (2) |

Tabela 1: Valores dos expoentes críticos para os modelos de Ising em $D = 2$ e $D = 3$, para o modelo de Heisenberg em $D = 3$ e os valores previstos em campo médio.

Como esperado fisicamente em uma transição de fase de segunda ordem o comprimento de correlação diverge em T_c

$$\xi \sim t^{-1/2}, \quad (44)$$

ou seja a teoria de campo médio de Weiss prevê então que $\nu = 1/2$. Note que este resultado também é válido para $T < T_c$ onde obtemos $\xi = (J/2(T_c - T))^{-1/2}$.

Podemos obter a forma de G_{ij} no espaço real tomando a transformada de Fourier da Eq. (42). Este cálculo é feito com detalhes na Ref. [1] e o resultado é aquele mostrado na Eq. (13). Exatamente na transição $\xi^{-2} = 0$ e temos

$$G_{ij} = \frac{T}{J} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{ij}}}{k^2} \propto \frac{1}{|\vec{r}_{ij}|^{D-2}}, \quad (45)$$

ou seja o expoente crítico $\eta = 0$ dentro da teoria de Weiss.

O comportamento das várias quantidades físicas, como função de $T - T_c$, dentro da teoria de campo médio são mostradas na Fig. 3. Os expoentes críticos, como também calculados dentro da teoria de campo médio, são listados na Tabela 1, juntamente com os outros expoentes conhecidos para os modelos de Ising e Heisenberg. Vemos que os valores de campo médio são independentes do modelo e dimensão e não produzem resultados satisfatórios. Por outro lado, podemos listar os sucessos da teoria de campo médio:

1. Universalidade. Diferentes modelos possuem os mesmos expoentes críticos, Tabela 1.
2. Diagrama de fase correto. Todas as fases existentes no problemas são capturadas, Fig. 1.
3. Fornece uma estimativa para valor para T_c , Eq. (26).
4. Descreve o comportamento de vários observáveis físicos, Fig. 3.

Ainda que esses sucessos sejam relativos, pois geralmente as predições de campo médio são quantitativamente incorretas, a teoria de campo médio fornece um excelente primeiro passo para teorias mais completas. Infelizmente, melhorar a solução de campo médio discutida aqui não é uma tarefa simples e requer, por exemplo, o uso do grupo de renormalização [1, 2].

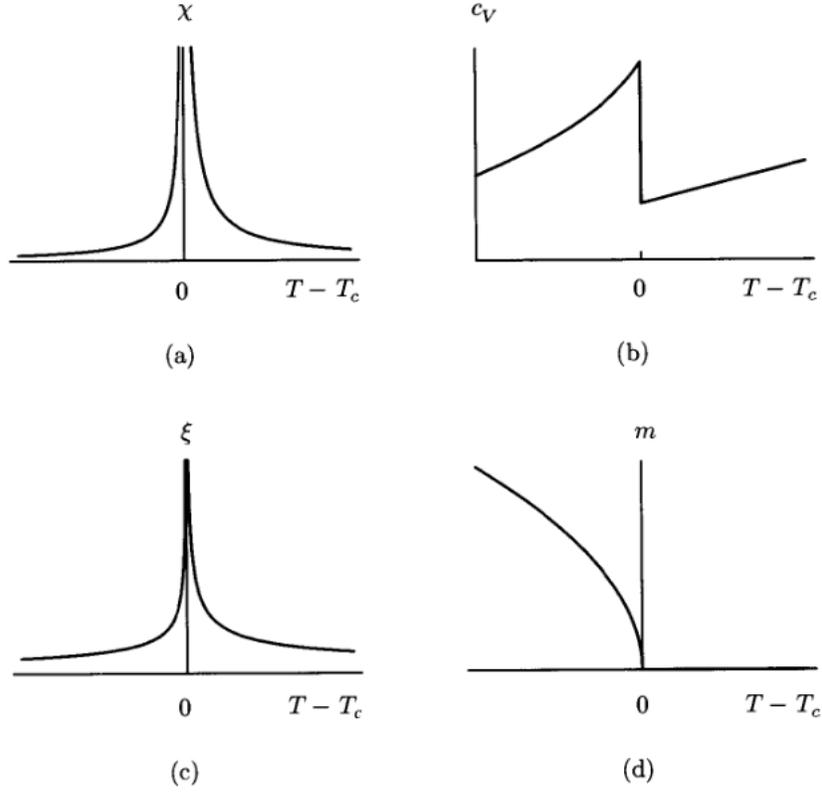


Figura 3: Comportamento de várias quantidades físicas como função $T - T_c$ obtido dentro de uma teoria de campo médio. (a) Susceptibilidade magnética uniforme. (b) Calor específico. (c) Comprimento de correlação. (d) Parâmetro de ordem.

3 Flutuações e critério de Ginzburg

Na verdade, podemos determinar a validade da teoria de campo médio dentro da própria teoria! Vimos que a hipótese básica da teoria de campo médio está em desprezar as flutuações em torno do valor médio do parâmetro de ordem. Podemos usar a função de correlação para estimar essas flutuações. A função de correlação, Eq. (11), pode ser calculada com a transformada de Fourier da Eq. (42) e temos, para $D \geq 2$ [1]

$$G(\vec{r}) = \frac{\pi^{(1-D)/2} T}{2^{(1+D)/2} J} \frac{1}{\xi^{D-2}} \frac{e^{-r/\xi}}{(r/\xi)^{(D-1)/2}}. \quad (46)$$

Esta equação mostra que o comprimento de correlação ξ determina a escala para a qual o parâmetro de ordem varie de maneira suave, uma vez que seu valor em um determinado sítio está correlacionado com aquele de seus vizinhos até uma escala $r \sim \xi$. Assim, estimamos a variância de m como

$$\sigma_m^2 \approx G(|\vec{r}| = \xi) \sim \xi^{2-D} \sim t^{(D-2)/2}. \quad (47)$$

Devemos compara essas flutuações com $m^2 \sim t$ e exigir que as flutuações sejam pequenas

$$\frac{m^2}{\sigma_m^2} \sim t^{(D-4)/2} \ll 1. \quad (48)$$

Esse é o chamado critério de Ginzburg. Ele é extremamente importante porque ele determina a região de validade da teoria de campo médio. Vejamos suas consequências. Para $D > 4$, o critério (48) é sempre satisfeito suficientemente próximo da transição ($t \ll 1$). A teoria de campo médio, portanto, descreve bem o comportamento crítico. Para $D < 4$, entretanto, a variação relativa do parâmetro de ordem diverge à medida que nos aproximamos do ponto crítico. Isso mostra que a teoria de campo médio é inválida como descrição do comportamento crítico para $D < 4$ e por isso temos uma predição pobre dos expoentes críticos. Os resultados da teoria, no entanto, podem ainda ser utilizados para $D < 4$, fora da chamada região crítica, ou seja, para

$$t^{(D-4)/2} \gg 1. \quad (49)$$

A dimensão $D_{uc} = 4$ acima da qual a teoria de campo médio é válida mesmo na região crítica é chamada de dimensão crítica superior.

4 Teoria de Landau

A natureza das transições de fase contínuas é posta em bases mais sólidas e gerais pela teoria de Landau. A filosofia dessa teoria é escrever um funcional (funcional de Landau) do parâmetro de ordem, cujo mínimo funcional nos dá o valor de equilíbrio do parâmetro de ordem e a energia livre do sistema. O funcional de Landau pode ser deduzido no caso de teorias de campo médio específicas, como a teoria de Weiss, Van der Waals ou BCS da supercondutividade. No caso geral, ele deve ser encarado como uma descrição dos graus de liberdade de longos comprimentos de onda de uma teoria, uma vez que a física de curto alcance (curtos comprimentos de onda) tenha sido integrada.

O funcional de Landau é construído supondo-se a proximidade do ponto crítico de tal modo que o parâmetro de ordem seja pequeno em algum sentido. Nesse caso, podemos tentar expandir o funcional em potências do parâmetro de ordem e/ou de suas derivadas. O funcional deve ser consistente com as simetrias do problema. No caso, vamos supor por simplicidade que haja simetria de rotação (tratamento do contínuo, em que desprezamos efeitos de rede) e translação. A expansão se fará em termos de potências inteiras do parâmetro de ordem e de suas derivadas, de forma a preservar a natureza analítica do funcional. Assim, para um parâmetro de ordem ϕ_i , que supomos um vetor de n componentes, o funcional de Landau pode ser expandido como

$$\mathcal{L} = \int d^D x \left\{ \frac{1}{2} \vec{\phi}(\vec{x}) \cdot (r - c\nabla^2) \vec{\phi}(\vec{x}) + \frac{u}{4} [\vec{\phi}(\vec{x}) \cdot \vec{\phi}(\vec{x})]^4 - \vec{h}(\vec{x}) \cdot \vec{\phi}(\vec{x}) + \dots \right\}. \quad (50)$$

A expressão acima retém os termos principais para obtermos uma teoria compatível com as teorias das Seções anteriores, mas em outras situações pode ser necessário manter outros termos. O último termo quebra a simetria de rotação e deve ser encarado como análogo ao campo magnético. Vamos calcular a

derivada funcional de \mathcal{L} com relação ao campo ϕ_i

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \phi_i(\vec{x})} = (r - c\nabla^2) \phi_i(\vec{x}) + u \left[\sum_{k=1}^n \phi_k^2(\vec{x}) \right] \phi_i(\vec{x}) - h_i(\vec{x}) = 0. \quad (51)$$

Essa é a mesma Eq. (38) que obtivemos na teoria de Weiss generalizada para situações com dependência espacial (para o caso de um parâmetro de ordem escalar) e podemos fazer as seguintes identificações

$$r = T - T_c, \quad (52)$$

$$u = \frac{T_c}{3}, \quad (53)$$

$$c = J. \quad (54)$$

A partir das equações (52)-(54) todos os resultados da seção anterior se seguem.

Em particular, o mínimo do funcional quando o campo aplicado é uniforme $\vec{h}(\vec{x}) = h\hat{e}_h$ ocorre para um parâmetro de ordem uniforme

$$\vec{\phi}(\vec{x}) = \phi_0 \hat{e}_h, \quad (55)$$

tal que a Eq. (51) se reduz a

$$r\phi_0 + u\phi_0^3 - h = 0, \quad (56)$$

que é mínimo do potencial

$$L[\vec{\phi}(\vec{x})] = \frac{r}{2} \vec{\phi}(\vec{x}) \cdot \vec{\phi}(\vec{x}) + \frac{u}{4} [\vec{\phi}(\vec{x}) \cdot \vec{\phi}(\vec{x})]^2 - \vec{h}(\vec{x}) \cdot \vec{\phi}(\vec{x}). \quad (57)$$

Este potencial é ilustrado na Fig. 4. Nos focaremos no caso $\vec{h}(\vec{x}) = 0$ apenas. Para $T > T_c$, $r > 0$ e temos o mínimo do potencial para $\phi_0^{min} = 0$, pois $u > 0$ sempre. Para $T = T_c$, $r = 0$ e só nos resta o termo quártico e, embora o mínimo ainda continue em $\phi_0^{min} = 0$, este agora se torna um mínimo mais achatado. Para $T < T_c$, $r < 0$ e mínimo agora está localizado em $\phi_0^{min} = \pm \sqrt{-r/u}$. Que o mínimo sai de zero para $r < 0$ é fácil de ver pois para $\phi_0 > 1$ o termo quártico do funcional vence e $L(\phi_0) > 0$. Já para $\phi_0 < 1$ o termo quadrático vence e aí temos $L(\phi_0) < 0$. Contudo temos sempre que $L(0) = 0$, dando origem assim aos mínimos aludidos acima. O caso $\vec{h}(\vec{x}) \neq 0$ é similar, só que agora o valor de $\phi_0^{min} \neq 0$ devido à presença do campo.

Outro fato importante da teoria de Landau é que ela descreve igualmente tanto parâmetros com uma, como no caso do modelo de Ising, ou n componentes, como no caso do modelo de Heisenberg onde $n = 3$. No caso em que $n > 1$ tudo o que temos que fazer é nos focarmos na direção na qual o parâmetro de ordem aponta e para esta direção temos novamente o problema similar ao do modelo de Ising, ou seja uma transição de fase de segunda ordem com os expoentes críticos de campo médio (T_c , por outro lado, é modificada).

Contudo, o caso para o parâmetro com mais de uma componente possui uma peculiaridade muito

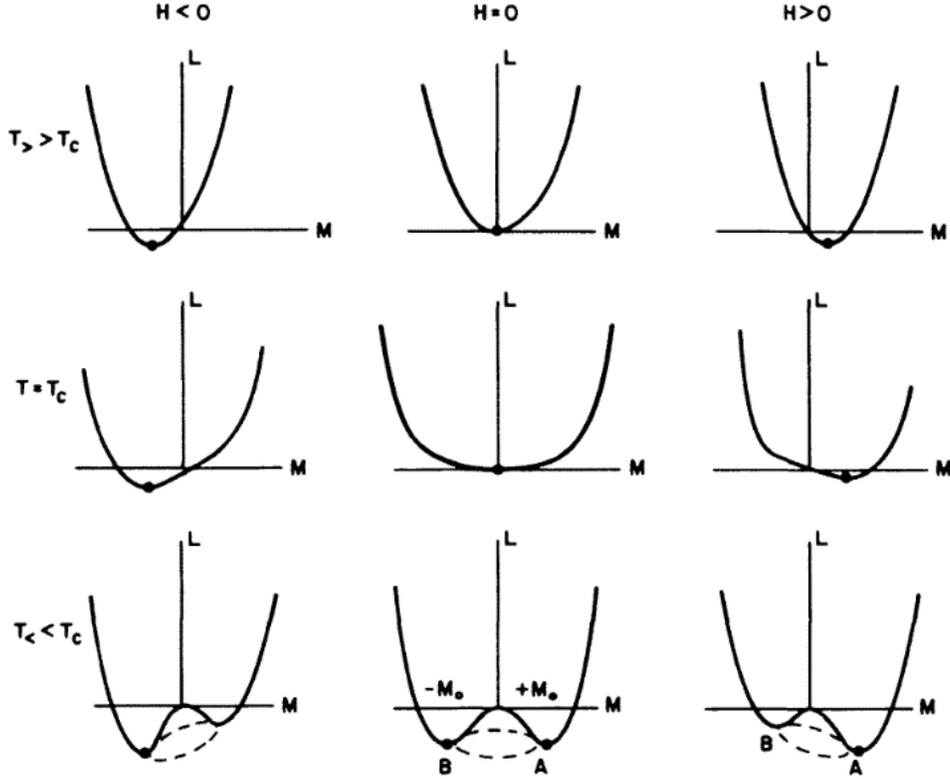


Figura 4: Funcional de Landau para um parâmetro de ordem escalar e uniforme. A última linha descreve uma transição de fase de primeira ordem, que ocorre para $T < T_c$ na medida em que o campo externo muda de valores positivos para negativos (trocamos o sentido da magnetização através de um campo externo). Já a coluna do meio ilustra uma transição de segunda ordem que ocorre para $h = 0$ na medida em que variamos T de $T > T_c$ para $T < T_c$.

importante. Para vermos isso, vamos definir novamente a função de correlação, como na Eq. (39)

$$G_{ij}(\vec{x}) = T \frac{\partial \phi_i(\vec{x})}{\partial h_j(\vec{0})}, \quad (58)$$

com a diferença que agora os símbolos i e j se referem agora às componentes do parâmetro de ordem e assumimos que o campo externo está sempre aplicado na origem. Com essa definição, podemos tomar a derivada com relação ao campo externo da Eq. (51) e temos

$$(r - c\nabla^2) G_{ij}(\vec{x}) + u \left[\sum_{k=1}^n \phi_k^2(\vec{x}) \right] G_{ij}(\vec{x}) + 2u \left[\sum_{k=1}^n \phi_k(\vec{x}) G_{kj}(\vec{x}) \right] \phi_i(\vec{x}) = T \delta_{i,j} \delta(\vec{x}), \quad (59)$$

Para $\vec{h}(\vec{x}) = 0$, temos que

$$\phi_i(\vec{x}) = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \phi_0 \delta_{i,1}, & T < T_c \end{cases}, \quad (60)$$

onde $\phi_0 = \pm \sqrt{-r/u}$ como de hábito e escolhemos arbitrariamente a direção $i = 1$ como sendo aquela em

que parâmetro de ordem se congela. Assim, a Eq. (58) é dada por

$$\begin{aligned}
(r - c\nabla^2) G_{ij}(\vec{x}) + u\phi_0^2 G_{ij}(\vec{x}) + 2u[\phi_0 G_{1j}(\vec{x})] \phi_i(\vec{x}) &= T\delta_{i,j}\delta(\vec{x}), \\
(r + u\phi_0^2 + 2u\phi_0^2\delta_{i,1} - c\nabla^2) G_{ij}(\vec{x}) &= T\delta_{i,j}\delta(\vec{x}), \\
(r + u\phi_0^2 + 2u\phi_0^2\delta_{i,1} + ck^2) G_{ij}(\vec{k}) &= T\delta_{i,j},
\end{aligned} \tag{61}$$

onde na última linha tomamos a transformada de Fourier, donde temos que

$$G_{\parallel}(\vec{k}) = G_{11}(\vec{k}) = \frac{T}{r + 3u\phi_0^2 + ck^2}, \tag{62}$$

e

$$G_{\perp}(\vec{k}) = G_{ii}(\vec{k}) = \frac{T}{r + u\phi_0^2 + ck^2}, \quad i \neq 1. \tag{63}$$

Temos assim dois tipos de flutuação para um sistema com simetria contínua. Aquelas paralelas à direção na qual o sistema se ordenou, medidas por G_{\parallel} e aquelas perpendiculares a essa direção, medidas por G_{\perp} . Para $T > T_c$ elas são iguais, pois $\phi_0 = 0$. Já para $T < T_c$ temos

$$G_{\parallel}(\vec{k}) = \frac{T/c}{-2r/c + k^2}, \tag{64}$$

$$G_{\perp}(\vec{k}) = \frac{T/c}{k^2}. \tag{65}$$

Ou seja, para um sistema com simetria $O(n)$, e com $T < T_c$, há um modo com comprimento de correlação finito, $\xi^{-2} = -2r/c$, e $n - 1$ modos com comprimento de correlação infinito. Esses $n - 1$ modos são conhecidos como modos de Goldstone e estão presentes sempre que há quebra de simetria contínua. Exemplos famosos desses modos de Goldstone são os mágnons (quebra de simetria de rotação do spin de Heisenberg) e os fônons (quebra de invariância translacional do espaço). $G_{\parallel}(\vec{k})$ está associada a mudanças na magnitude do parâmetro de ordem e por isso possui um custo de energia finito $\propto \xi^{-2}$. Já $G_{\perp}(\vec{k})$ mede flutuações na direção do parâmetro de ordem e não custam energia, já que o funcional de Landau só depende de $\vec{\phi}(\vec{x}) \cdot \vec{\phi}(\vec{x})$, veja Fig. 5

Tomando agora a transformada de Fourier da Eq. (65) temos

$$G_{\perp}(\vec{r}) = \frac{T}{c} \int \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{k^2}. \tag{66}$$

A convergência dessa integral depende da dimensão D . Para $D > 2$ ela é convergente, ou seja os modos de Goldstone geram flutuações que tendem a desordenar o sistema mas a ordem de longo alcance sobrevive. Já para $D \leq 2$ a integral diverge e essas flutuações transversas (modos de Goldstone) destroem a ordem. Essa é uma maneira, um pouco mais geral, de rephrasearmos o teorema de Mermin-Wagner-Hohenberg que discutimos no caso particular das ondas de spin.

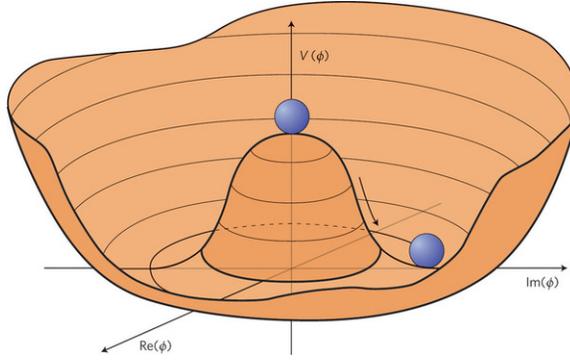


Figura 5: Parte homogênea do funcional de Landau para um parâmetro de ordem com duas componentes, $n = 2$, e $T < T_c$. G_{\parallel} mede flutuações para as quais $V(\phi)$ muda e G_{\perp} mede flutuações para as quais $V(\phi)$ permanece constante. Por motivos óbvios, esse potencial é conhecido como chapéu mexicano e ele é uma generalização natural do potencial mostrado na Fig. 4.

5 Transição de Berezinsky–Kosterlitz–Thouless (BKT)

Exatamente na dimensão crítica inferior e para $n = 2$ temos uma situação especial e de muita importância. Aqui, a predição da teoria de campo médio está fundamentalmente errada, uma vez que, por ela, esperamos ordem magnética de longo alcance. O teorema de Mermin-Wagner-Hohenberg nos diz, contudo, que a ordem magnética de longo alcance é destruída para $T > 0$ pelos modos de Goldstone. Contudo, esse sistema possui uma transição entre duas fases distintas: uma fase paramagnética a altas temperaturas e uma fase crítica a baixas temperaturas.

Especificamente, o sistema que temos em mente é o modelo XY em duas dimensões (rede quadrada). Neste caso, os spins clássicos possuem apenas duas componentes e podem ser escritos como $S_i = S(\cos\theta_i, \sin\theta_i)$. O Hamiltoniano do sistema é então dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -J \overbrace{S^2}^1 \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (67)$$

em notação usual com $\langle ij \rangle$ denotando primeiros vizinhos. Por simplicidade, consideraremos uma rede quadrada.

Para altas temperaturas $T \gg J$, esperamos que não haja ordem no sistema ($\langle \vec{S}_i \rangle = 0$) e que a função de correlação decaia exponencialmente

$$G(|\vec{r}|) = \langle \vec{S}(\vec{r}) \cdot \vec{S}(0) \rangle \sim \exp\left[-\frac{|\vec{r}|}{\xi}\right], \quad (68)$$

com um comprimento de correlação dado por $\xi^{-1} = \ln(2T/J)$. Como esperado, $\xi \rightarrow 0$ indicando que os spins são descorrelacionados em altas temperaturas e temos um paramagneto.

O limite de baixas temperaturas $T \ll J$, por outro lado, implica que o comprimento de correlação seja grande, ainda que finito, e que o valor de spins em sítios vizinhos estejam fortemente correlacionados e portanto podemos aproximar $\cos(\theta_i - \theta_j) \approx 1 - (\theta_i - \theta_j)^2/2$. Como todas as escalas de comprimento nesse limite são muito maiores que o espaçamento de rede a , consideraremos o limite do contínuo, onde a

diferença entre ângulos de sítios vizinhos se torna uma derivada

$$(\theta_i - \theta_{i+a\hat{x}})^2 + (\theta_i - \theta_{i+a\hat{y}})^2 \rightarrow a^2 \left(\frac{\partial \theta_i}{\partial x} \right)^2 + a^2 \left(\frac{\partial \theta_i}{\partial y} \right)^2 = \overbrace{a^2}^1 |\nabla \theta_i|^2. \quad (69)$$

O Hamiltoniano em (67) é agora dado por

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \int d^2r |\nabla \theta(\vec{r})|^2, \quad (70)$$

onde desprezamos a energia do estado fundamental $E_0 = -2JN$, que, por ser constante, não tem importância para nossa discussão aqui. É interessante notarmos que \mathcal{H} em (70) tem a forma de um funcional de Landau, Eq. (50), com $u = r = 0$ e $c = J$. Utilizaremos essa analogia para calcularmos várias propriedades físicas do sistema. Como no caso de altas temperaturas, queremos calcular a função de correlação. Como não esperamos ordem de longo alcance, temos novamente $\langle \vec{S}(\vec{r}) \rangle = 0$ e temos

$$G(|\vec{r}|) = \langle \vec{S}(\vec{r}) \cdot \vec{S}(0) \rangle = \langle \cos(\theta(\vec{r}) - \theta(0)) \rangle = \text{Re} \langle e^{i(\theta(\vec{r}) - \theta(0))} \rangle = e^{-\langle (\theta(\vec{r}) - \theta(0))^2 \rangle / 2}. \quad (71)$$

A última igualdade é uma consequência do fato de que o nosso funcional de Landau, Eq. (70), não possui termo quártico e portanto tudo o que temos que calcular são integrais Gaussianas, para as quais a identidade acima pode ser estabelecida [2]. Ou seja, vemos que o que temos que calcular é a seguinte função de correlação

$$\langle (\theta(\vec{r}) - \theta(0))^2 \rangle = -2 \langle \theta(\vec{r}) \theta(0) \rangle + 2 \langle \theta^2(0) \rangle = 2(-g(|\vec{r}|) + g(0)), \quad (72)$$

onde definimos

$$g(\vec{r}) = \langle \theta(\vec{r}) \theta(0) \rangle - \langle \theta(0) \rangle^2, \quad (73)$$

como nossa função de correlação usual, Eq. (11). Dado que a dinâmica de $\theta(\vec{r})$ é governado por um funcional de Landau, Eq. (70), essa função de correlação, no espaço \vec{k} , pode ser obtida imediatamente através da Eq. (62)

$$g(\vec{k}) = \frac{T/J}{k^2}, \quad (74)$$

e temos assim

$$\langle (\theta(\vec{r}) - \theta(0))^2 \rangle = \frac{2T}{J} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1 - e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{k^2}. \quad (75)$$

Como estamos no limite do contínuo, a integral sobre o momento possui um cutoff no ultravioleta. Ou seja esta aproximação só é válida para k pequeno e devemos ter $k < 1/\Lambda$ onde Λ é uma escala de comprimento microscópica do problema, por exemplo o parâmetro de rede a . Como estamos interessados em seu comportamento assintótico, $r \gg \Lambda$, faremos a seguinte aproximação: para $kr < 1$ assumimos que a exponencial cancele o 1. Já para $kr > 1$ consideramos que ela oscile tão rapidamente que sua contribuição

seja nula. Assim a integral acima se reduz a

$$\begin{aligned}\langle (\theta(\vec{r}) - \theta(0))^2 \rangle &= \frac{2T}{J} \int_{1/r}^{1/\Lambda} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{k^2}, \\ &= \frac{T}{J\pi} \ln \frac{r}{\Lambda}, \quad r \gg \Lambda.\end{aligned}\tag{76}$$

A função de correlação na Eq. (71) é então dada por

$$\begin{aligned}G(|\vec{r}|) &\sim \exp\left[-\frac{T}{2\pi J} \ln \frac{r}{\Lambda}\right] \\ &\sim r^{-\eta(T)},\end{aligned}\tag{77}$$

onde

$$\eta(T) = \frac{T}{2\pi J}.\tag{78}$$

Ou seja a correlação entre os spins decai como uma lei de potência a baixas temperaturas e portanto não temos ordem de longo alcance, como antecipado. Contudo dois pontos merecem ser ressaltados nesse resultado

- O decaimento espacial de $G(|\vec{r}|)$ é diferente para $T \gg J$ (exponencial, paramagneto) e $T \ll J$ (lei de potência, ordem de quase longo alcance). Portanto esperamos uma transição de fase em uma temperatura $T_{BKT} \sim J$ separando essas duas fases, onde T_{BKT} é conhecida como temperatura de Berezinsky–Kosterlitz–Thouless.
- O expoente $\eta(T)$ controlando o decaimento de $G(|\vec{r}|)$ é não universal, pois depende de T . Dizemos que esse problema não possui um ponto crítico, mas sim uma linha de pontos críticos para $T < T_{BKT}$, cada um deles dando origem a um expoente crítico $\eta(T)$ diferente.

Identificamos assim que o sistema possui duas fases distintas e que são separadas por uma transição de fase em T_{BKT} . A natureza desta transição de fase precisa ser contudo ainda elucidada, pois se trata de uma transição entre duas fases desordenadas.

Esta transição de fase está associada à proliferação de vórtices no sistema, veja Fig. 6. Um vórtice é um defeito topológico cuja a fase muda em $\pm 2\pi$ quando damos uma volta nesse defeito

$$\oint d\vec{r} \cdot \nabla \theta(\vec{r}) = 2\pi n,\tag{79}$$

onde $n = \pm 1$ é a carga topológica ou o “winding number” (podemos ter valores de n maiores do que um, mas eles são muito custosos energeticamente e podem ser desprezados). Assim, na presença de um vórtice, há um descontinuidade em $\theta(\vec{r})$ onde o valor 2π é adjacente ao 0.

O próximo passo é estimarmos qual a energia para a criação de um vórtice. Para tal, consideramos o nosso caminho ao redor do vórtice como um círculo, Fig. 6(a), com $r \gg \Lambda$, onde Λ é o tamanho do núcleo do vórtice. Neste caso temos que $|\nabla \theta| \sim 1/r$ e a energia de um vórtice é dada por

$$E_1 = \frac{J}{2} \int d^2r |\nabla \theta(\vec{r})|^2 \sim \pi J \int_{\Lambda}^L r dr \frac{1}{r^2} + E_c \sim \pi J \ln \frac{L}{\Lambda} + E_c,\tag{80}$$

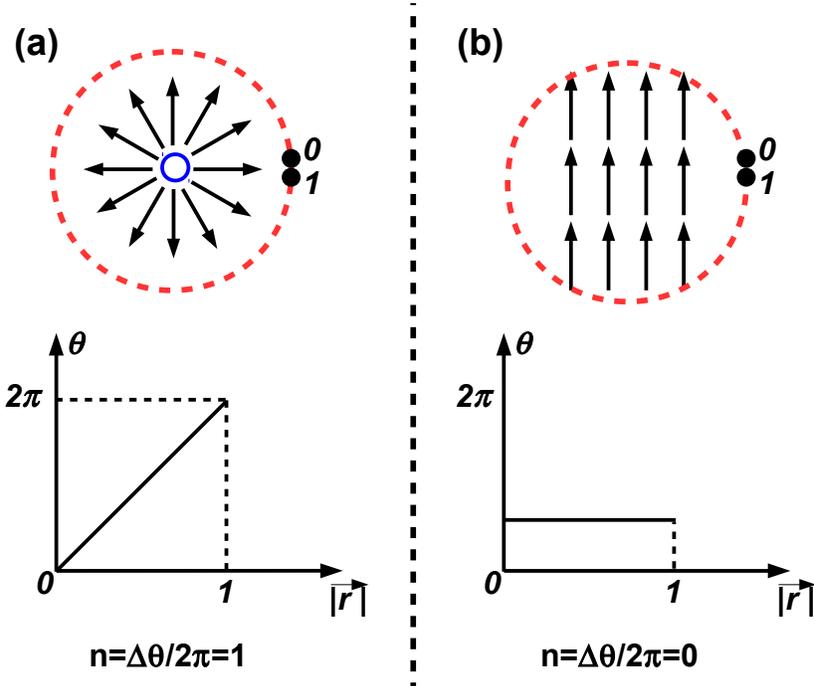


Figura 6: (a) Vórtice com $n = 1$. A curva tracejada vermelha representa o caminho que o vetor \vec{r} percorre. (b) Configuração sem vórtice com $n = 0$.

onde E_c é a energia do núcleo do vórtice e L é o tamanho do sistema. Vemos assim que a energia do vórtice diverge logaritmicamente para um sistema infinito. Parece então que esse é um defeito topológico muito caro de existência improvável. Esse, contudo, não é o caso. Podemos também calcular a entropia associada a um vórtice. O número de lugares diferentes onde podemos criar o vórtice é dado por $\sim L^2/\Lambda^2$ e a entropia é

$$S_1 = \ln\left(\frac{L}{\Lambda}\right)^2 = 2\ln\frac{L}{\Lambda}. \quad (81)$$

A energia livre para introduzimos um único vórtice no sistema é então, $F = E_1 - TS_1$, donde

$$F - E_c = (\pi J - 2T) \ln\frac{L}{\Lambda}. \quad (82)$$

Assim para baixas temperaturas, o custo de criar um vórtice diverge para $L \rightarrow \infty$. Mas para altas temperaturas passa a ser vantajoso criar vórtices. A transição ocorre no ponto em que a energia livre muda de sinal e temos

$$T_{BKT} = \frac{\pi J}{2}. \quad (83)$$

Ou seja para $T > T_{BKT}$ há uma proliferação de vórtices livres e temos a fase paramagnéticas. Para $T < T_{BKT}$ os vórtices existem, mas ficam ligados em pares com cargas topológicas opostas e $E_2(r) \approx 2\pi J \ln(r/\Lambda)$ (desprezando a correlação). Esses vórtices ligados são responsáveis pela fase crítica a baixas

temperaturas. Notamos também que

$$\eta(T_{BKT}) = 1/4, \tag{84}$$

numa que é uma das assinaturas características desta transição.

Embora simples, os argumentos mostrados aqui contêm a essência da transição BKT e se mantêm corretos dentro de tratamentos mais sofisticados. Esse é um problema importante e que aparece em outros sistemas físicos como em arranjos de junções Josephson e magnetos dimerizados.

Referências

- [1] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* (Westview Press, 1992), 1st ed.
- [2] P. M. Chaikin and T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, 2000).