Part I

Teoria de campo - elementos básicos - e grupo de renormalização

A primeira parte do curso teve forte concentração na teoria de Landau e na obtenção de uma solução para as fases dos sistemas físicos e as transições de fase baseado na teoria de campo médio em geral. Discutimos também as limitações desses resultados. Sabemos que o que estamos deixando de lado são as flutuações. Isso foi discutido brevemente com uma pequena introdução a teoria de grupo de renormalização. Para fazermos um estudo mais cuidadoso, precisamos incluir as flutuações de uma forma mais consistente e entender o papel que elas desempenham quando o sistema físico adquire uma temperatura inferior a temperatura crítica, $T < T_c$, e $d < d_c$, onde T_c é a temperatura crítica e d_c o comprimento de correlação crítico. Para isso é necessário termos uma descrição da energia livre $F[\langle\phi(\vec{r})\rangle]$ e das funções partições com maior detalhamento da microscopia do sistema. Discutimos no curso I as bases da descrição microscópica por meio de uma descrição do sistema físico em segunda quantização. Embora as aplicações que consideramos limitaram-se, em geral, a aproximação do campo médio, também nessa descrição, as técnicas discutidas formam a base para uma descrição em melhor nível de aproximação. Esses métodos em geral exigem uma grande complexidade numérica. Eventualmente (veremos ao longo do curso) discutiremos alguns deles. Aqui, no entanto, queremos encontrar uma forma mais fenomenológica, dentro do espírito do que fizemos até agora, para abordar esse problema. Para isso, vamos desenvolver o método de teoria de campo semi-fenomenológica. No caso, estaremos trabalhando com um espaço de fase caracterizado pelo parâmetro de ordem e as operações de traço envolvem a integral sobre todos os valores possíveis em todos os pontos do espaço ou todos os pontos de uma rede do parâmetro de ordem o qual é considerado como um *campo clássico contínuo.* Com essa metodologia poderemos tratar as flutuações inclusive em condições próxima da transição de fase quando as flutuações

desempenham um papel fundamental. Elas servem, no entanto, também para descrever o sistema físico longe da transição de fase. Na verdade, a discussão que faremos aqui poderia ter sido a discussão inicial para introduzir a teoria de Landau. Aqui estamos seguindo a ordem sugerida por CL (ref. 1). A seguir, pretendemos avançar a discussão sobre a teoria de grupo de renormalização em relação a rápida introdução feita no curso I, apoiados na discussão de teoria de campo. As notas desse capítulo estão baseadas no capítulo 5 de CL e nos capítulos 17 e 18 do Huang (ref. 2) e no cap. 9 do Brézin (ref. 3).

1 Teoria de campo

1.1 Granularidade espessa do espaço (ou melhor dizendo *coarse-graining*)

A descrição do sistema físico é obtida calculando a função de partição,

$$Z(T) = e^{-F(T)/k_B T} \tag{1}$$

no ensemble canônico onde $F(T)$ é a energia livre de Helmholz. Para termos uma descrição incluindo o campo conjugado h, utilizamos uma descrição de Gibbs,

$$\mathcal{Z} = e^{-G(h,T)/k_B T} \tag{2}$$

Nós queremos uma descrição que ponha em evidência o papel do parâmetro de ordem $\phi(\vec{r})$ mas levando em conta que o parâmetro de ordem é uma grandeza macroscópica, em certa extensão. Com isso, queremos dizer que seu conhecimento é limitado dentro de um valor médio calculado em uma célula com muitos átomos. O procedimento é dividirmos o sistema físico em várias células, com dimensões grandes quando comparadas com comprimentos microscópicos característicos tais como o espaçamento entre as partículas (por exemplo, o parâmetro de rede a em um sólido cristalino) ou o alcance das interações. Cada célula contém muitas partículas e o parâmetro de ordem $\phi(\vec{r})$, como já vimos discutindo, é um operador da mecânica quântica ou uma função de variáveis dinâmicas

clássicas. Ele é calculado como um valor médio sobre todas as partículas da célula centrada na posição $\vec{r}$ e seu valor médio é designado por $\tilde{\phi}(\vec{r})$. Nesse caso, ele pode ser visto como uma variável clássica contínua, variando de célula para célula. Essencialmente, o que estamos considerando aqui é que as flutuações importantes no valor da energia são aquelas de grande comprimento de onda. Consideremos a o valor interpartículas ou o alcance das interações, em síntese, o parâmetro de distância que caracteriza microscopicamente o sistema. Não esperamos nenhuma flutuação com valor menor que a, ou seja, a transformada de Fourier das grandezas físicas associadas tem um corte em $\Lambda \sim 2\pi/a$, ou seja, só é esperado ter componentes para $\left|\vec{k}\right| < 2\pi/a$. Esse procedimento de calcular o parâmetro de ordem é denominado de granularidade espessa ou *coarse-graining*. Neste caso, a energia livre de Landau, que discutimos no curso I, é calculada para uma configuração particular local do parâmetro de ordem. Agora, em vez de considerarmos seu valor mínimo, permitiremos todos os valores, incluindo suas excitações, mas de acordo com seu peso estatístico. Os estados do sistema são especificados pelo valor de $\tilde{\phi}(\vec{r})$ e sua energia efetiva é $\tilde{\mathcal{H}}[\tilde{\phi}(\vec{r})]$ onde a energia pode ser calculada, por exemplo, utilzando a teoria de Landau,

$$\mathcal{H} = \int \mathrm{d}^d r f[\phi(\vec{r})] + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d r c[\nabla\phi(\vec{r})]^2 \tag{3}$$

ou,

$$\tilde{\mathcal{H}} = \int \mathrm{d}^d r \tilde{f}[\tilde{\phi}(\vec{r})] + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d r c[\nabla\tilde{\phi}(\vec{r})]^2 \tag{4}$$

A função de partição é calculada como uma soma sobre todos os valores possíveis do parâmetro de ordem, calculado nas células da granularização espessa, $\tilde{\phi}(\vec{r})$, ou seja,

$$Z = \int D\tilde{\phi}(\vec{r}) e^{-\tilde{\mathcal{H}}/k_B T} \tag{5}$$

Na presença do campo conjugado, a função de partição é

$$\mathcal{Z} = \int D\tilde{\phi}(\vec{r}) e^{-(\tilde{\mathcal{H}} - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\tilde{\phi}(\vec{r}))/k_B T} \tag{6}$$

A integral $\int D...$ é uma *integral funcional,* ou seja, ela é calculada sobre todos os valores possíveis de $\tilde{\phi}(\vec{r})$ em todas as posições $\vec{r}$.

Sua visualização para um parâmetro de ordem em um sistema unidimensional é mais intuitiva. A integral é uma integral de caminho uma vez que ela é a soma sobre todos os caminhos possíveis de $\tilde{\phi}(\vec{r})$ no espaço. Exemplos desses caminhos estão na figura 1, onde os caminhos (a) e (b) representam caminhos onde o parâmetro de ordem é constante enquanto que para os caminhos (c) e (d) ele varia espacialmente.

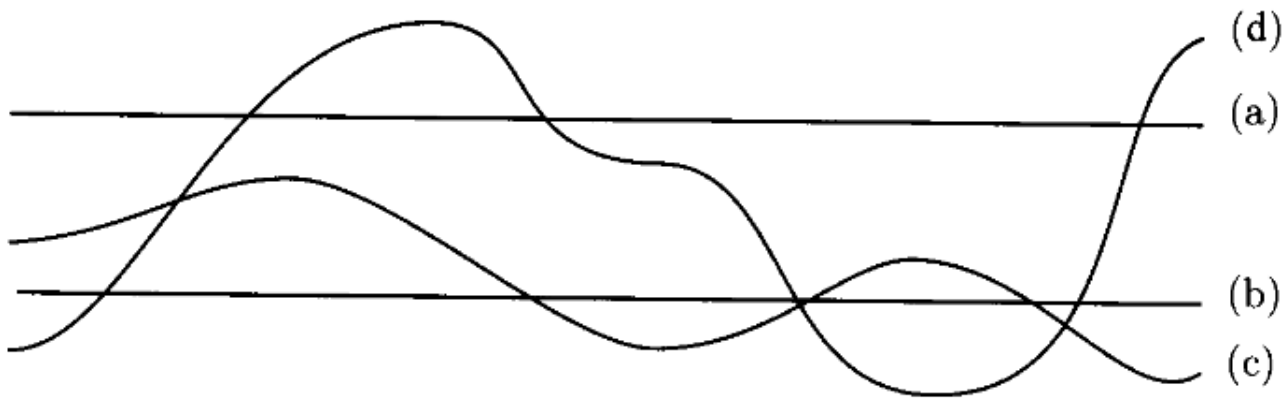

Figure 1: Exemplos de caminhos que contribuem para a integral funcional em um campo unidimensional. Extraído de CL.

Podemos escrever a função de partição em sistemas clássicos partindo do campo $\phi(\vec{r})$. Para isso, escrevemos

$$\mathcal{Z} = \int D\tilde{\phi}(\vec{r}) \mathrm{Tr} \prod_{\vec{r}} \delta[\phi(\vec{r}) - \tilde{\phi}(\vec{r})] e^{-[\mathcal{H} - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\phi(\vec{r})]/k_B T} \tag{7}$$

de onde temos

$$e^{-\tilde{\mathcal{H}}/k_B T} = \mathrm{Tr} \prod_{\vec{r}} \delta[\phi(\vec{r}) - \tilde{\phi}(\vec{r})] e^{-\mathcal{H}/k_B T} \tag{8}$$

ou seja, somamos sobre todos os valores microscópicos fixando o mesmo valor para o parâmetro de ordem e depois somamos sobre todas as formas possíveis para o parâmetro de ordem. A razão de realizarmos a soma nessa ordem deve-se a suposição que o parâmetro de ordem entra em equilíbrio termodinâmico lentamente quando comparado com as outras variáveis do sistema.

Para o que se segue, não é necessário fazer a distinção entre o campo $\phi(\vec{r})$ e seu valor médio $\tilde{\phi}(\vec{r})$. Também não distinguiremos entre a energia $\mathcal{H}$ e $\tilde{\mathcal{H}}$ no cálculo da energia efetiva que determina o peso das configurações na integral funcional da função de partição.

Uma última observação sobre nosso tratamento em *coarse-graining* é que para termos uma teoria macroscópica completa, essa não deve depender do vetor de onda de corte, Λ, o qual deve desaparecer dos valores das grandezas físicas calculadas. A solução parar isso é fazermos $\Lambda \to \infty$. Esse limite, no entanto, nem sempre é possível, podendo aparecer divergências na energia livre (exceto nas aproximações de campo médio). A forma de evitar essas divergências é a *renormalização*, similar ao que foi feito na eletrodinâmica quântica. Voltaremos a essa questão posteriormente.

1.2 Integral funcional, teorias de campo de rede e o limite contínuo

Vamos tentar deixar um pouco mais claro o significado da definição da integral funcional e o seu cálculo na função de partição. Para isso, vamos considerar a nossa definição da integral funcional como sendo o limite contínuo de uma teoria de campos $\phi_{\vec{l}}$ definida em N sítios $\vec{l}$ de uma rede de dimensão-d. o parâmetro da rede serve como limite de comprimento que consideramos, ou o *cutoff*. Nesse caso, o valor do parâmetro de ordem $\phi(\vec{r})$ em cada sítio da rede $\vec{l}$ é um número independente e pode ser integrado separadamente:

$$\int D\phi = \prod_{\vec{l}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\phi_{\vec{l}} \tag{9}$$

onde o produto é realizado sobre todos os sítios da rede . Podemos ainda definir a integral funcional pela integração de cada componente de Fourier, $\tilde{\phi}(\vec{k})$ separadamente e independentemente, para $\left|\vec{k}\right| < \Lambda$, ou seja,

$$\int D\phi = \prod_{|\vec{k}|<\Lambda} \int \mathrm{d}\tilde{\phi}(\vec{k})\mathrm{d}\tilde{\phi}^*(\vec{k}) \tag{10}$$

A integral $\int \mathrm{d}\phi(\vec{k})\phi^*(\vec{k})$ é uma integral bidimensional no plano complexo de $\phi(\vec{k})$, sendo equivalente a integração das partes real e imaginária independentemente.

A função de partição no modelo de rede se escreve na forma

$$Z = \prod_{\vec{l}} \int \mathrm{d}\phi_{\vec{l}} e^{-\beta \mathcal{H}_L(\phi_{\vec{l}})} \tag{11}$$

onde

$$\mathcal{H}_L[\phi_{\vec{l}}] = \sum_{\vec{l}} f_L(\phi_{\vec{l}}) + \frac{1}{2}\sum_{\vec{l},\vec{l'}} C_{\vec{l},\vec{l'}}(\phi_{\vec{l}} - \phi_{\vec{l'}})^2 \tag{12}$$

$f_L(\phi_{\vec{l}})$ é expresso como uma expansão em série em torno de $\phi_{\vec{l}} = 0$ e $C_{\vec{l},\vec{l'}}$ tem um alcane finito, tipicamente do espaçamento da rede. $\phi_{\vec{l}}$ pode assumir qualquer valor entre $-\infty$ e ∞. A configuração que entra na soma da partição é especificada pelo valor de $\phi_{\vec{l}}$ em cada sítio $\vec{l}$. A figura 2 exemplifica algumas configurações para uma rede unidimensional. Uma análise desses exemplos mostra que $f_L(\phi_{\vec{l}})$ favorece na soma alguns valores particulares de $\phi_{\vec{l}}$. Vamos considerar, por exemplo, que f_L tem a forma da densidade de energia livre de Landau no modelo ϕ^4,

$$f_L = \frac{1}{2} r\phi_{\vec{l}}^2 + u\phi_{\vec{l}}^4 \tag{13}$$

Nesse caso, f_L pode ter um único mínimo em $\phi_{\vec{l}} = 0$ ou dois mínimos em $\phi_{\vec{l}} = \pm(|r|/4u)^{1/2}$, se r for negativo. O termo de interação favorece valores iguais de $\phi_{\vec{l}}$ em todos os sítios da rede. As configurações (b) e (d) onde $\phi_{\vec{l}}$ varia rapidamente de sítio para sítio tem valore maiores de $\mathcal{H}_L$ e, portanto, menor peso no cálculo do traço da função de partição do que as configurações (a) e (c), as quais tem um valor $\phi_{\vec{l}}$ espacialmente uniforme e próximo ao valor mínimo para f_L.

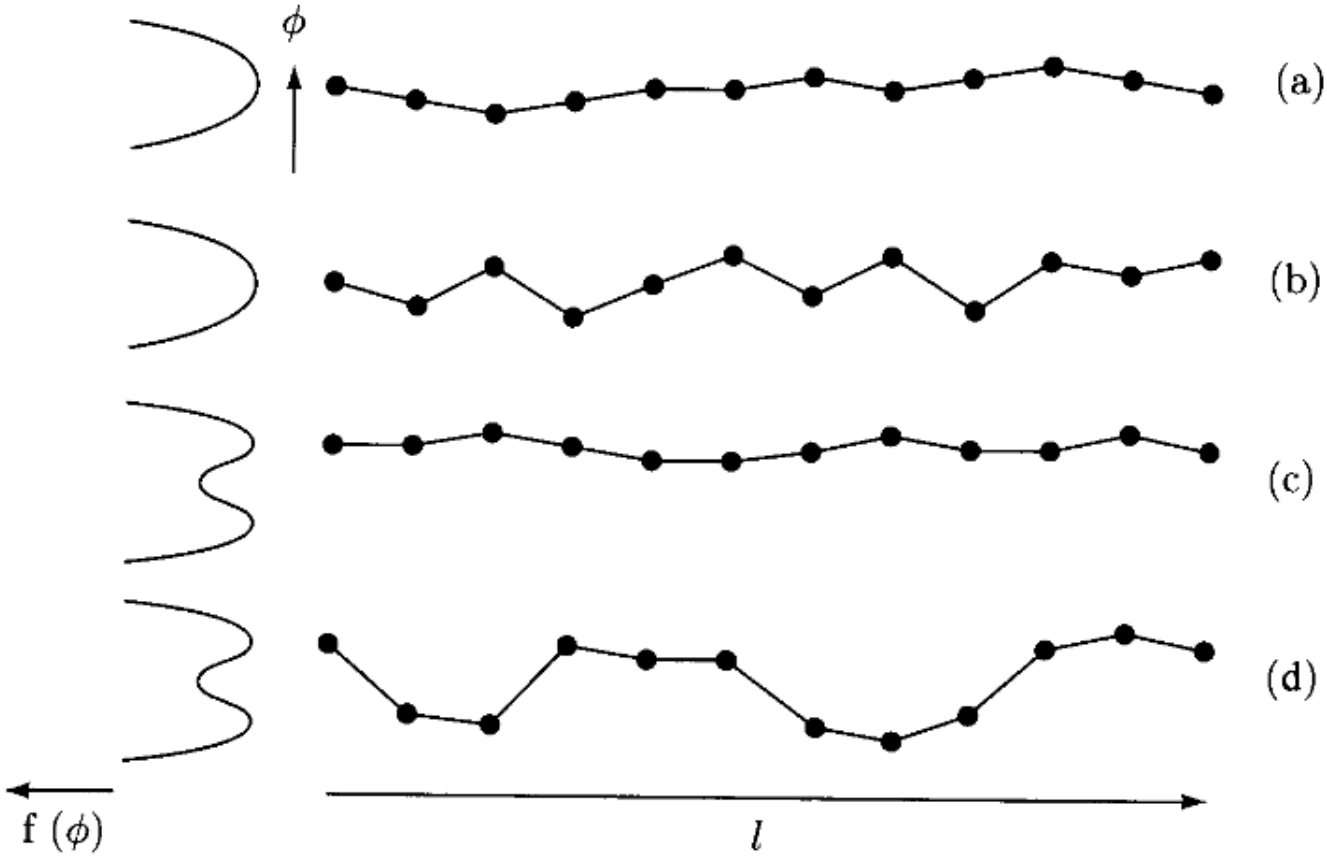

Figure 2: Configurações de uma teoria de campo em rede unidimensional. (a) Configuração de baixa energia quando f_L tem um únimo mínimo em $\phi_{\vec{l}} = 0$. (b) Configuração de alta energia variando espacialmente quando f_L tem um único mínimo. (c) Mesmo que (a) mas com f_L com dois mínimos. (d) Mesmo que (b) mas com f_L com dois mínimos. Quando o parâmetro da rede vai para zero os caminhos tornam-se a teoria contínua apresentada esquematicamente na figura 1.

Para calcularmos limite contínuo do modelo de rede devemos fazer o volume v_0 por célula de cada sítio ir para zero e a posição $\vec{R}_{\vec{l}}$ do sítio torna-se a variável contínua $\vec{r}$ enquanto que $\phi_{\vec{l}}$ torna-se o campo contínuo $\phi(\vec{r})$, mantendo-se o volume total $V = Nv_0$ fixo. Temos então,

$$\begin{aligned} v_0 \sum_{\vec{l}} &\rightarrow \int \mathrm{d}^d r \\ \sum_{\vec{l}} f_L(\phi_L) &\rightarrow \int \mathrm{d}^d r \tilde{f}[\phi(\vec{r})] \\ \frac{1}{2} \sum_{\vec{l},\vec{l}'} C_{\vec{l}\vec{l}'}(\phi_{\vec{l}} - \phi_{\vec{l}'}) &\rightarrow \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d r c (\nabla \phi)^2 \end{aligned} \tag{14}$$

onde

$$
\begin{aligned}
\tilde{f} &= \frac{1}{v_0} f_L \\
c &= \frac{1}{d v_0} \sum_{\vec{l}} \vec{R}_{\vec{l}}^2 C_{\vec{l},0}
\end{aligned}
\tag{15}
$$

Finalmente, a integral funcional que aparece no cálculo da função de partição tem a definição formal

$$
\int D\phi(\vec{r}) = \lim_{v_0 \to 0} \prod_{\vec{l}} \int \mathrm{d}\phi_{\vec{l}} \tag{16}
$$

Antes de prosseguirmos, vamos revisar a transformada de Fourier para um sistema hiper-cúbico de dimensão d seguindo a nomenclatura do CL:

$$
\begin{aligned}
f(\vec{r}) &= A \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} f(\vec{q}) = AV \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} f(\vec{q}) \to_{AV=1} \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} f(\vec{q}) \\
f(\vec{q}) &= \int \mathrm{d}^d r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}) = \to^{AV=1} \int \mathrm{d}^d r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} f(\vec{r})
\end{aligned}
\tag{17}
$$

onde a constante A foi escolhida como sendo $A = 1/V$.

As relações de ortogonalidade e completeza no limite contínuo são,

$$
\begin{aligned}
\int \mathrm{d}^d r e^{i(\vec{q}-\vec{q}')\cdot\vec{r}} &= (2\pi)^d \delta^{(d)}(\vec{q}-\vec{q}') \\
\int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} e^{-i\vec{q}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} &= \delta^{(d)}(\vec{r}-\vec{r}')
\end{aligned}
\tag{18}
$$

Para as transformadas de Fourier em redes hiper-cúbicas de dimensão d, temos

$$
\begin{aligned}
f_{\vec{l}} &= \frac{1}{V}\sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{l}}} f_{\vec{q}} \to \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{l}}} \\
f_{\vec{q}} &= \frac{V}{N}\sum_{\vec{l}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{l}}} f_{\vec{l}} \to v_0 \sum_{\vec{l}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{l}}}
\end{aligned} \tag{19}
$$

1.3 Integrais gaussianas

Vamos considerar aqui o caso das integrais gaussianas, que é o único caso em que podemos realizar a integral funcional exatamente. Essa situação tem uma aplicação importante. Sempre que o hamiltoniano $\mathcal{H}$ for harmônico em $\phi(\vec{r})$, o peso da função $e^{-i\beta\mathcal{H}}$ fica gaussiano e o traço da função partição pode ser calculado exatamente. Essa solução é o primeiro passo para cálculos perturbativos quando $\mathcal{H}$ tem termos anarmônicos.

O ponto de partida é a integral conhecida

$$
\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y e^{-\frac{1}{2}Cy^2+\lambda y} = \left(\frac{2\pi}{C}\right)^{1/2} e^{\lambda^2/(2C)} \tag{20}
$$

que foi calculada simplesmente completando o quadrado. Podemos generalizar esse resultado para integrais multidimensionais e integrais funcionais. Consideremos $\underline{\mathrm{C}}$uma matriz $n \times n$ com componentes $C_{ij} = \langle i|\underline{\mathrm{C}}|j\rangle$. Consideremos o caso em que $\underline{\mathrm{C}}$ é real e simétrica. Nesse caso, ela pode ser diagonalizada com autofunções ortonormais e reiais, $\langle i|p\rangle$ tais que

$$
\langle p|\underline{\mathrm{C}}|p'\rangle = \delta_{pp'} C_p \tag{21}
$$

onde C_p é o autovalor (real). Temos entção,

$$
\begin{aligned}
\int \left(\prod_{i=1}^{n} \mathrm{d}y_i\right) e^{-\frac{1}{2}y_i C_{ij} y_j + \lambda_i y_j} &= \prod_{p=1}^{n} \int \mathrm{d}y_p e^{-C_p^2 y_p^2/e^{\lambda_p y_p}} \\
&= \prod_{p=1}^{n} \left(\frac{2\pi}{C_p}\right)^{1/2} e^{\lambda_p^2/(2C_p)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= (2\pi)^{n/2}(\det \underline{C})^{-1/2} e^{\frac{1}{2}\lambda_i C_{ij}^{-1}\lambda_j} \\
&= \exp[-\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ln(\underline{C}/2\pi) + \frac{1}{2}\lambda_i C_{ij}^{-1}\lambda_j]
\end{aligned} \tag{22}
$$

Aqui estamos assumindo a convenção de realizar uma soma toda vez que os índices se repetem. Ainda,

$$
\begin{aligned}
y_p &= \sum_i < p|i > y_i \\
\lambda_p &= \sum_i \langle p|i\rangle \lambda_i
\end{aligned} \tag{23}
$$

Podemos agora calcular a função de partição do modelo de rede harmônico:

$$
\mathcal{H}_L^0 = \frac{1}{2}\sum_{\vec{l},\vec{l'}} r_{\vec{l}\vec{l'}}\phi_{\vec{l}}\phi_{\vec{l'}} = \frac{1}{2V}\sum_{\vec{q}} r(\vec{q})\,|\phi(\vec{q})|^2 \tag{24}
$$

onde

$$
\begin{aligned}
\phi_{\vec{l}} &= \frac{1}{Nv_0}\sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{l}}}\phi_{\vec{q}} \\
r(\vec{q}) &= \frac{1}{v_0}\sum_{\vec{l}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{R}_{\vec{l}}} r_{\vec{l},0}
\end{aligned} \tag{25}
$$

$r_{\vec{l},0}$ são componentes da matriz $\underline{r}$. As autofunções ortonormais que diagonalizam $\underline{r}$ são

$$
\left\langle \vec{l}|\vec{q}\right\rangle = \frac{1}{N^{1/2}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \tag{26}
$$

Os autovalores de $\underline{r}$ são

$$
\langle \vec{q}|\underline{r}|\vec{q}\rangle = \frac{1}{N^{1/2}}\sum_{\vec{l},\vec{l'}} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{\vec{l}}-\vec{R}_{\vec{l'}})} r_{\vec{l},\vec{l'}} = v_0 r(\vec{q}) \tag{27}
$$

Escrevendo

$$\mathcal{H}_{ext} = -\sum_{\vec{l}} h_{\vec{l}}\phi_{\vec{l}} \tag{28}$$

temos finalmente,

$$\begin{aligned}\mathcal{A}[T, h_{\vec{l}}] &= -k_B T \ln \mathcal{Z} = -k_B T \ln\left(\prod_{\vec{l}} \int \mathrm{d}\phi_{\vec{l}} e^{\beta(\mathcal{H}_L^0 + \mathcal{H}_{ext})}\right) \\ &= \frac{1}{2} k_B T \sum_{\vec{q}} \ln[\beta r(\vec{q}) v_0/(2\pi)] - \frac{1}{2}\sum_{\vec{l}\vec{l}'} h_{\vec{l}} \beta G^0_{\vec{l}\vec{l}'} h_{\vec{l}'}\end{aligned} \tag{29}$$

Note que da relação entre a susceptibilidade e a função de correlação, temos

$$G^0_{\vec{l}\vec{l}'} = \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{R}_{\vec{l}} - \vec{R}_{\vec{l}'})} \frac{k_B T}{r(\vec{q})} = \left\langle \phi_{\vec{l}} \phi_{\vec{l}'} \right\rangle \tag{30}$$

Trazendo agora para o limite contínuo,

$$\mathcal{H}^0 = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d r \mathrm{d}^d r' r(\vec{r}, \vec{r}') \phi(\vec{r}) \phi(\vec{r}') = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} r(\vec{q}) \left|\phi(\vec{q})\right|^2 \tag{31}$$

e

$$\mathcal{A}[T, h(\vec{r})] = \frac{1}{2} k_B T V \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} \ln[\beta r(\vec{q}) v_0/(2\pi)] - \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d r \mathrm{d}^d r' h(\vec{r}) \beta G_0(\vec{r}, \vec{r}') h(\vec{r}') \tag{32}$$

onde

$$\beta r(\vec{q}) = G_0^{-1}(\vec{q}) \tag{33}$$

e

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r} - \vec{r}')} \frac{k_B T}{r(\vec{q})} = \langle \phi(\vec{r}) \phi(\vec{r}') \rangle \tag{34}$$

Uma questão importante deve ser observada aqui. O limite contínuo tem problemas quando

fazemos o limite $v_0 \to 0$. A energia livre diverge. Isso pode ser contornado com o *cutoff* na dimensão física do problema. O volume da célula está relacionado com o *cutoff* da teoria contínua, como já discutimos. O número de vetores de onda é igual ao número de pontos da célula da teoria discreta:

$$\sum_{\vec{q}} 1 = N = V \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} \tag{35}$$

Se temos um *cutoff* restringindo o valor de $|\vec{q}| < \Lambda$, então

$$v_0 = \frac{V}{N} = \frac{d\Lambda^{-d}}{K_d} \tag{36}$$

onde

$$K_d = \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \tag{37}$$

e Ω_d é o ângulo sólido da esfera de dimensão-d. Se no modelo contínuo N não faz sentido (afinal, temos um contínuo no sistema e não mais uma divisão em um número finito de células), Λ tem sentido e podemos associar um valor a v_0 . Por exemplo,

$$\begin{aligned} v_0 &= \frac{4\pi}{\Lambda^2},\ d{=}2 \\ &= \frac{6\pi^2}{\Lambda^3},\ d{=}3 \end{aligned} \tag{38}$$

1.4 Teoria de campo médio e correções devido a flutuações

Estamos agora em condições de estabelecer uma teoria de campo na qual podemos calcular o potencial termodinâmico, $\mathcal{A}[T, h(\vec{r})]$ e sua energia livre conjugada, $F[\langle\phi(\vec{r})\rangle]$. Essa teoria é definida pelas equações

$$
\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \int D\phi(\vec{r}) e^{-(\mathcal{H}-\int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\phi(\vec{r}))/k_B T} \\
\mathcal{H} &= \int \mathrm{d}^d f[\phi(\vec{r})] + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d r c[\nabla\phi(\vec{r})]^2
\end{aligned} \tag{39}
$$

Nessa teoria, a função de partição é calculada incluindo todas as configurações possíveis do espaço funcional do campo definido pelo parâmetro de ordem ϕ. O peso estatístico de cada configuração é determinado pelo cálculo da função de partição. Fica claro que a principal contribuição é aquela que minimiza $\beta[\mathcal{H} - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\phi(\vec{r})]$. Essencialmente, podemos fazer uma primeira aproximação no cálculo da função de partição utilizando a aproximação de ponto de sela ou melhor pelo caminho de ponto de sela, $\phi(\vec{r}) = \phi_{ps}(\vec{r})$ o qual é determinado pela equação

$$
\frac{\delta\mathcal{H}}{\delta\phi(\vec{r})}|_{\phi(\vec{r})=\phi_{ps}(\vec{r})} = h(\vec{r}) \tag{40}
$$

Aqui identificamos a teoria de campo médio como sendo o resultado da aproximação de ponto (caminho) de sela, ou seja, quando consideramos apenas a contribuição desse caminho no cálculo da função de partição. Temos então,

$$
\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{CM} &= \exp\left\{-\beta(\mathcal{H}[\phi_{ps}(\vec{r})] - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\phi_{ps}(\vec{r}))\right\} \\
&\equiv \exp\left\{-\beta\left(F_{CM}[\langle\phi(\vec{r})\rangle] - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\,\langle\phi(\vec{r})\rangle\right))\right\}
\end{aligned} \tag{41}
$$

onde

$$
F_{CM} = \mathcal{H}[\phi_{ps}(\vec{r})] \tag{42}
$$

é a energia livre da teoria de campo médio e

$$\langle\phi(\vec{r})\rangle = \phi_{ps}(\vec{r}) \tag{43}$$

Esse resultado nos dá uma justificativa mais formal para nossa aproximação de campo médio. Mas temos algo a mais. Estamos agora em condições de calcularmos a contribuição das flutuações. Para isso, vamos considerar a correção devido a variações do campo do parâmetro de ordem em relação ao seu valor de campo médio:

$$\phi(\vec{r}) = \langle\phi(\vec{r})\rangle + \delta\phi(\vec{r}) \tag{44}$$

Temos que calcular a modificação na função de partição. Para isso, vamos expandir $\mathcal{H}$ em segunda ordem em $\delta\phi(\vec{r})$:

$$\mathcal{H} - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\phi(\vec{r}) = \mathcal{H}[\langle\phi(\vec{r})\rangle] - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\,\langle\phi(\vec{r})\rangle + \mathcal{H}' + 0((\delta\phi(\vec{r}))^3) \tag{45}$$

onde

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d r \mathrm{d}^d r' \frac{\delta^2\mathcal{H}}{\delta\phi(\vec{r})\delta\phi(\vec{r}')}|_{\phi(\vec{r})=\langle\phi(\vec{r})\rangle} = \beta^{-1}G_0^{-1}(\vec{r},\vec{r}') \tag{46}$$

e

$$G_0^{-1}(\vec{r},\vec{r}') = \frac{\beta\delta^2\mathcal{H}}{\delta\phi(\vec{r})\delta\phi(\vec{r}')}$$

onde $G_0(\vec{r},\vec{r}')$ é a funçã de correlação de campo médio. Na teoria de Landau em $\langle\phi\rangle^4$, temos

$$G_0^{-1}(\vec{r},\vec{r}') = \beta[r + 12u\,\langle\phi(\vec{r})\rangle^2 - c\nabla^2]\delta(\vec{r}-\vec{r}') \tag{47}$$

Temos agora que calcular a correção na função de partição. Podemos escrever

$$\mathcal{Z}^{(1)} = \mathcal{Z}^{(0)}\prod_{\vec{l}}\int \mathrm{d}\delta\phi(\vec{r})e^{-\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d r \mathrm{d}^d \delta\phi(\vec{r})G_0^{-1}(\vec{r},\vec{r}')\delta\phi(\vec{r}')} \tag{48}$$

Calculando a contribuiçao gaussiana, temos

$$\mathcal{Z}^{(1)} = \mathcal{Z}^{(0)} \frac{1}{\sqrt{G_0^{-1} v_0/(2\pi)}} \tag{49}$$

o que nos dá a energia livre

$$\begin{aligned} F &= F_{CM} + \frac{1}{2} k_B T V \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} \ln[G_0^{-1}(\vec{q}) v_0/(2\pi)] \\ &= F_{CM} + \frac{1}{2} k_B T \mathrm{Tr} \ln[G_0^{-1} v_0/(2\pi)] \end{aligned} \tag{50}$$

lembrando que o traço da matriz $A(\vec{r}, \vec{r}')$ é $\mathrm{Tr}A = \int \mathrm{d}^d r A(\vec{r}, \vec{r}) = \sum_{\vec{q}} A(\vec{q})$, onde a segunda igualdade se realiza apenas se a matriz diagonaliza-se na transformada de Fourier.

Essa correção na energia livre é conhecida como *correção de um ciclo ("one-loop correction")* para a aproximação de campo médio sem flutuações. A origem dessa expressão está no fato que essa energia livre é o funcional gerador de todos os diagramas com integração em um ciclo.

Podemos calcular essa contribuição na função de correlação, $G^{-1}(\vec{r}, \vec{r}')$:

$$\begin{aligned} G^{-1}(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{\beta \delta^2 F}{\delta \langle \phi(\vec{r}) \rangle \, \delta \langle \phi(\vec{r}') \rangle} \\ &= G_0^{-1}(\vec{r}, \vec{r}') + \frac{1}{2} \mathrm{Tr} G_0 \frac{\delta^2 G_0^{-1}}{\delta \langle \phi(\vec{r}) \rangle \, \delta \langle \phi(\vec{r}' \rangle} \\ &= G_0^{-1}(\vec{r}, \vec{r}') + \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d r_1 \mathrm{d}^d r_2 G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{\delta^2 G_0^{-1}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{\delta \langle \phi(\vec{r}) \rangle \, \delta \langle \phi(\vec{r}') \rangle} \end{aligned} \tag{51}$$

Aplicando para o modelo ϕ^4,

$$G^{-1}(\vec{r}, \vec{r}') = G_0^{-1}(\vec{r}, \vec{r}') + 12 u \delta(\vec{r} - \vec{r}') G_0(\vec{r}, \vec{r}') \tag{52}$$

Na fase desordenada, quando $\langle \phi \rangle = 0$, temos

$$k_B T G^1(\vec{q}, r) = r + cq^2 + 12u \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} \frac{k_B T}{r + cq^2} \tag{53}$$

1.5 Aproximação do campo auto-consistente: consequências físicas das flutuações

Vamos considerar agora o modelo ϕ^4 calculado na aproximação do campo auto-consistente. Essa aproximação é equivalente a aproximação de Hartree ou a aproximação da fase aleatória (*random-phase approximation - RPA*). Essencialmente, o que fazemos é substituir um fator ϕ^2 no termo quártico, ϕ^4, no cálculo de f_{SL}, pelo seu valor médio, $\langle \phi^2 \rangle$. Como temos seis maneiras de escolhermss dois fatores de ϕ para formar ϕ^2, o resultado é que a energia livre em RPA é $f = \frac{1}{2} r\phi^2 + 6u \langle \phi^2 \rangle \phi^2$.

Vamos considerar o caso em que a temperatura está acima da temperatura crítica, T_c. Nesse caso, $G(\vec{r}, \vec{r'}) = \langle \phi(\vec{r}) \phi(\vec{r'}) \rangle$, uma vez que $\langle \phi \rangle = 0$. Das equações 47 e 52, e calculando a transformada de Fourier, temos

$$k_B T G^{-1}(\vec{q}) = r + cq^2 + 12u \left\langle \phi^2 \right\rangle \tag{54}$$

e,

$$\left\langle \phi^2 \right\rangle \equiv G(\vec{r}, \vec{r}) = \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} G(\vec{q}) = \int \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} \frac{k_B T}{r + cq^2 + 12u \langle \phi^2 \rangle} \tag{55}$$

onde $r = a(T - T^*)$. Para o cálculo da integral introduzimos um *cutoff* Λ da ordem do inverso do comprimento de correlação intrínseco, $\xi_0 = (c/aT_c)^{1/2}$. Podemos calcular agora a susceptibilidade na ausência de campo externo,

$$\begin{aligned} \chi^{-1} &= k_B T G^{-1}(\vec{q} = 0) \\ &\equiv \tau = r + 12 u k_B T \int_0^\Lambda \frac{\mathrm{d}^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{\tau + cq^2} \end{aligned}$$

$$= \quad r + 12uk_BTK_d \int_0^\Lambda \mathrm{d}q q^{d-1} \frac{1}{\tau + cq^2} \tag{56}$$

onde $\tau = r + 12u \langle \phi^2 \rangle$ e

$$K_d = \frac{\Omega_d}{(2\pi)^d} \tag{57}$$

onde Ω_d é o ângulo sólido no espaço de dimensão-d. Na temperatura de transição, T_c, a susceptibilidade diverge. Podemos calcular a temperatura crítica para $d \geq 2$:

$$r_c \equiv a(T_c - T^*) = -\frac{12uk_BT_c}{c} \int_0^\Lambda \frac{\mathrm{d}^d q}{q^2} = -\frac{12uk_BT_c}{c} \frac{K_d \Lambda^{d-2}}{d-2} \tag{58}$$

ou seja,

$$T_c = \left(1 + \frac{12uK_d\Lambda^{d-2}}{(d-2)ca}\right)^{-1} T^* \tag{59}$$

Esse resultado nos permite algumas observações. A temperatura de transição diminui em relação ao valor limite de metaestabilidade do campo médio. Temos também que $T_c \to 0$ para $d \to 2$. Isso estabelece a *dimensão crítica mais baixa* $d_L(= 2)$, para a qual as flutuações impedem uma transição de fase a temperatura finita. Ou seja, para $d < d_L$ não temos nenhuma transição de fase.

Reescrevendo χ^{-1} em termos de $r - r_c = a(T - T_c)$, temos

$$\begin{aligned} \chi^{-1} &\equiv \tau = r - r_c + 12uK_d \int q^{d-1} \mathrm{d}q \left(\frac{k_BT}{\tau + cq^2} - \frac{k_BT_c}{q^2} \right) \\ &= \frac{a'}{a}(r - r_c) - 12uk_BT_c \left(\frac{K_d}{c}\right) \tau I_d(\tau) \end{aligned} \tag{60}$$

onde

$$\frac{a'}{a} = 1 + 12uk_BT_c\left(\frac{K_d}{ac}\right)\left(\frac{\Lambda^{d-2}}{d-2}\right) \tag{61}$$

e

$$I_d(\tau) = \int_0^\Lambda q^{d-1}\mathrm{d}q\frac{1}{q^2(\tau+cq^2)} = \int_0^\Lambda q^{d-3}\mathrm{d}q\frac{1}{\tau+cq^2} \tag{62}$$

Termos de ordem de $(T-T_c)\tau I_d(\tau)$ foram desprezados.

Para $d > 4$, $I_d(\tau)$ é analítico. Rearranjando os termos, pode-se mostrar que para $\tau \to 0$,

$$\chi = \frac{1 + (12uk_BT_cK_d/c)I_d(0)}{a'(T-T_c)} \sim \frac{1}{(T-T_c)} \tag{63}$$

onde

$$I_d(0) = \frac{\Lambda^{d-4}}{c(d-4)} \tag{64}$$

O resultado produz o mesmo expoente crítico $\gamma = 1$ que já tínhamos encontrado na teoria de campo médio. A diferença é no fator que antecede o termo de temperatura e no valor de T_c.

Para $d < 4$ é fácil verificar que $I_d(\tau)$ diverge para $\tau = 0$:

$$I_d = c^{-(d-2)/2}\tau^{(d-4)/2}\int_0^{\Lambda(c/\tau)^{1/2}} \frac{y^{d-3}\mathrm{d}y}{1+y^2} \tag{65}$$

Podemos agora resumir os principais resultados:

- Para $d > 4$, a teoria de campo médio de Landau permanece válida. A natureza da singularidade é a mesma (mesmo expoente) mudando apenas o valor da temperatura crítica e o coeficiente que aparece na frente de $t = (T-T_c)/T_c$.

- Para $d = 4$ (não mostrado aqui) há uma divergência logarítmica. Para $d < 4$, temos uma divergência da ordem de $\tau^{(d-4)/2}$, para $\tau \to 0$. A teoria de Landau não se aplica mais. Mais importante, teorias de perturbação também não são úteis. Uma vez que a contribuição de

menor ordem diverge, devemos esperar que as outras contribuições também divergem.

- Podemos dizer que para $d > 4$ a singularidade não é modificada pelas flutuações. Isso vale também se considerarmos as ordens superiores (além da primeira ordem considerada aqui). Isso não significa que a teoria de campo médio funciona melhor quanto maior a dimensão. Os expoentes críticos mudam com d para $d < 4$ mas permanecem constantes e iguais aos valores obtidos pela teoria de campo médio para $d > 4$.

- Observando a equação 60 podemos dizer que, embora a teoria de campo médio falha próxima a T_c, ela produz resultados aceitáveis em uma região crítica, com as flutuações sendo responsável apenas por uma pequena contribuição. Pode-se mostrar que a região aceitável é aquela prevista por Ginzburg, já discutida. Uma discussão sobre esse caso, nesse modelo, está no CL.

- Última observação, para entendermos o comportamento crítico para $d \leq 4$ temos que buscar soluções não-perturbativas. A solução é a encontrada por K. Wilson em 1971, com a teoria de grupo de renormalização.

2 Grupo de Renormalização

As idéias da teoria de grupo de renormalização são construídas ao longo de muitos anos. Não vamos aprofundar aqui, mas convém mencionar algumas etapas fundamentais:

- Podemos dizer que a partir da primeira proposta de uma teoria de campo médio (van-der-Waals, para os fluidos), temos um período de desenvolvimento da teoria de campo médio, entre 1860 e 1937.

- Entre 1937 e 1963/1971 há um período de grande inquietude uma vez que fica claro que a teoria de campo médio não funciona para os fenômenos críticos.

- O trabalho de Onsager, em 1944, que calcula exatamente o modelo de Ising em duas dimensões, deixa claro que a teoria de campo médio não funciona. Ref.: L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).

- Cyril Domb, Martin Skyes e Michael Fisher (1949) calculam os expoentes críticos utilizando o método de expansão em séries e mostram que os resultados da teoria de campo médio não estão corretor.

- Ben Widom identifica a maior parte das relações de escalonamento mas não identifca suas origens. Refs. B. Widom, J Chem. Phys. **41** ,1643 (1964) e B. Widom, J. Chem. Phys. **43**, 3892 and 3896 (1965).

- Patashnskii e Pokrovski estudam as correlações das flutuações, principalmente basados nos resultados de Widom. Ref. A.Z. Patashinskii and V.L. Pokrovsky ",Soviet Phys. JETP, 19 667(1964).

- L. Kadanoff (1966) apresenta idéias heurísticas que explicam muitas dos resultados da renormalização.

- Kenneth Wilson (1971) resolve o problema da teoria de grupo de renormalização, explicando a natureza da universalidade e do reescalonamento.

Vamos discutir aqui o modelo de Kadanoff e a seguir o modelo de Wilson. Os exemplos que consideraremos serão o modelo de Ising e o modelo ϕ^4.

2.1 Escalonamento

Vamos revisar rapidamente a discussão sobre escalas. Nosso objetivo é entendermos como o sistema físico escala quando fazemos uma alteração de escala no sistema físico. Por exemplo, consideremos um modelo de Ising em um "cubo" de dimensão-d e periodicidade a. Vamos fazer agora um reescalonamento na dimensão espacial por uma proporção b. Ou seja, a nova dimensão da rede é

$$a \to a' = ba \tag{66}$$

O número de spins no sistema N' é

$$N' = b^{-d} N \tag{67}$$

Esperamos que a densidade de spins permaneça a mesma. Para isso, as distâncias espaciais devem ser reescalonadas por um fator b, ou seja,

$$\vec{r'} = b^{-1} \vec{r} \tag{68}$$

Com isso garantimos que a densidade de spins no novo sistema é a mesma do sistema antigo.

Podemos também analisar o reescalonamento sob o ponto de vista da função de partição. Para o sistema inicial temos

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp[-\beta \mathcal{H}_N[\sigma_i]] \tag{69}$$

Somamos agora sobre $N - N'$ spins, ficando apenas para somar sobre os demais N'spins. Podemos esperar poder escrever a função de partição na forma

$$Z = \sum_{\{\sigma'\}} \exp[-\beta \mathcal{H}_{N'}[\sigma'_i]] \tag{70}$$

Podemos esperar então que a energia livre do novo sistema é a mesma do sistema original, pelo menos na parte singular da energia livre (responsável pelo comportamento crítico). A relação entre a densidade de energia livre dos dois sistemas deve ser do tipo

$$N' f(t', h') = N f(t, h) \tag{71}$$

ou,

$$f(t,h) = b^{-d} f(t',h') \tag{72}$$

Como t e t' devem ser pequenos, podemos assumir uma relação linear

$$t' = b^{D_t} t \tag{73}$$

Da mesma forma, podemos assumir

$$h' = b^{D_h} h \tag{74}$$

Escrevemos então

$$f(t,h) = b^{-d} f(b^{D_t} t, b^{D_h} h) \tag{75}$$

Vamos assumir agora que f não deve se alterar com a mudaça de escala, ou seja, não deve apresentar uma dependência em b. Nesse caso, b deve desaparecer da equação 75. Para isso, devemos substituir as variáveis h'e t' por uma única variável que não dependa de b:

$$\frac{h'}{|t'|^{D_h/D_t}} = \frac{b^{D_h} h}{|t|^{D_h/D_t} \left(b^{D_t}\right)^{D_h/D_t}} = \frac{h}{|t|^{D_h/D_t}} = \frac{h}{|t|^{\Delta}} \text{ onde } \Delta = \frac{D_h}{D_t} \tag{76}$$

A densidade de energia livre deve ter uma dependência do tipo

$$f(t',h') = |t'|^{d/D_t} \tilde{f}(h'/|t'|^{\Delta}) \tag{77}$$

e, também,

$$f(t,h) = |t|^{d/D_t} \tilde{f}(h/|t|^{\Delta}) \tag{78}$$

Mas análise anterior (ver capítulo 9, curso I), temos

$$f(t,h) = |t|^{2-\alpha}\, X_0(h/t^{\Delta}) \tag{79}$$

de onte temos

$$\alpha = 2 - \frac{d}{D_t} \tag{80}$$

Seguindo análises similares, pode-se mostrar (ver capítulo 9, curso I),

$$\begin{aligned}
\beta &= 2 - \alpha - \Delta = (d - D_h)/D_t \\
\gamma &= -(2 - \alpha - 2\Delta) = (2D_h - d)/D_t \\
\delta &= \frac{\Delta}{\beta} = \frac{D_h}{(d - D_h)}
\end{aligned} \tag{81}$$

Vamos ainda considerar o comprimento de correlação ξ' reescalonado a partir do valor original ξ. Sabemos que

$$\xi' = b^{-1}\xi \tag{82}$$

Mas, ao mesmo tempo, temos que $\xi' \sim |t'|^{-\nu}$, da mesma forma que $\xi \sim |t|^{-\nu}$. Logo,

$$\frac{\xi'}{\xi} = \left(\frac{t'}{t}\right)^{-\nu} = b^{-\nu D_t} \tag{83}$$

de onde temos que

$$\nu = \frac{1}{D_t} \tag{84}$$

e

$$d\nu = 2 - \alpha \tag{85}$$

Da função de correlação, temos

$$
\begin{aligned}
g(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \langle \delta\phi(\vec{r}_1)\delta\phi(\vec{r}_2)\rangle \sim |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{-(d-2+\eta)} \\
g(\vec{r}_1', \vec{r}_2') &= \langle \delta\phi(\vec{r}_1')\delta\phi(\vec{r}_2')\rangle \sim |\vec{r}_1' - \vec{r}_2'|^{-(d-2+\eta)}
\end{aligned} \tag{86}
$$

de onde temos que

$$
\phi'(\vec{r}') = b^{(d-2+\eta)/2}\phi(\vec{r}) \tag{87}
$$

de onde podemos escrever

$$
\eta = d + 2 - 2D_h \tag{88}
$$

2.2 Método de Kadanoff: decimação no espaço real

Metodologia básica

Vamos considerar uma rede de dimensão d com N sítios e constante de rede a. Utilizaremos como modelo de estudo um sistema físico que é descrito pelo modelo de Ising, com spins $s_i = \pm 1$ nos sítios i. No ponto crítico o comprimento de correlação ξ é infinito. Os spins em diferentes posições espaciais estão fortemente correlacionado. A idéia básica do método é gerar uma nova rede, com um parâmetro de rede renormalizado,

$$
a' = ba \tag{89}
$$

Com isso, produzimos uma nova rede, onde cada novo sítio é identificado com um novo spin, que denominaremos *spin de bloco ("block spin")*, s'. Vamos indexar os novos sítios por I_α (s_α) (ver fig. 3). O reescalonamento de Kadanoff consiste em mapearmos os valores dos spins da rede original na nova rede. Não há uma única forma de procedermos e diferentes mapeamentos levarão,

em princípio, a diferentes esquemas de *grupo de renormalização*. A segunda etapa consiste em encontrarmos as interações efetivas entre os novos spins, ou seja, obter um novo hamiltoniano para a nova rede.

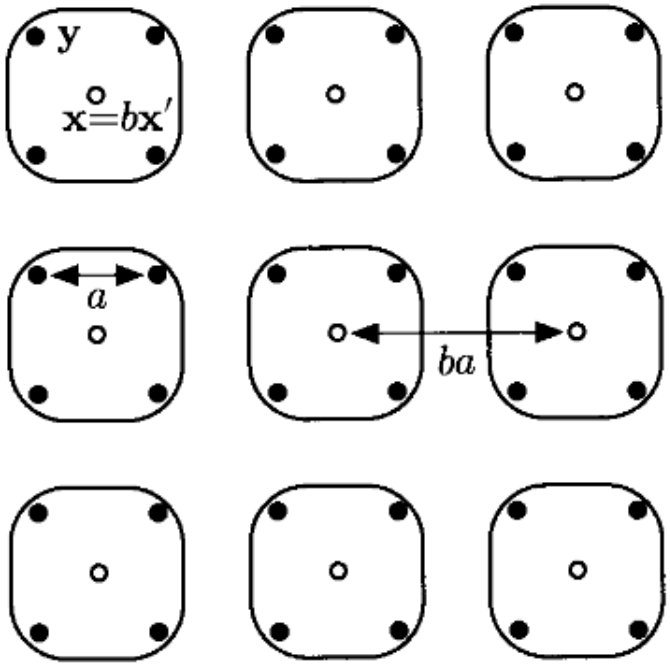

Figure 3: Esquema de construção de Kadanoff com "coarse-graining". Nesse exemplo o parâmetro de escala é $b = 2$. Extraído de CL.

Vamos agora aplicar para o caso do modelo de Ising explicitamente. O que faremos a seguir baseia-se no cap. 18 da ref. 2 cap. 10 da ref. 4 e da ref. 5, que é o trabalho original.

A função de partição do sistema original é

$$\mathcal{G}(h,t) = \exp(-G(h,t)/k_B T) = \sum_{\{s\}} \exp(-\mathcal{H}[\{s\}]/k_B T) \tag{90}$$

Vamos escolher o zero de energia tal que

$$\sum_{\{s\}} \mathcal{H}[\{s\}] = 0 \tag{91}$$

onde $\{s\}$ representa todas as configurações de spin possíveis.

Vamos definir a variável

$$S_\alpha = \prod_{i \in I_\alpha} s_i \tag{92}$$

O hamiltoniano mais geral que podemos escrever, do tipo Ising, é

$$\mathcal{H}\{S\} = \sum_{I_\alpha} \sum_{\alpha} K_\alpha S_\alpha \tag{93}$$

onde o termo do fator de Boltzmann foi incorporado na forma $K_\alpha = J_\alpha / k_B T$.

Se estabelecemos um hamiltoniano do tipo de Ising, então temos

$$\sum_{\{S\}} S_\alpha S_\beta = 2^N \delta_{\alpha\beta} \tag{94}$$

onde a soma sobre $\{S\}$ equivale a dupla soma sobre I_α e α. Podemos agora encontrar os parâmetros K_α , em princípio, pela expressão,

$$K_\alpha = 2^{-N} \sum_{I_\alpha} \sum_{\alpha} S_\alpha \mathcal{H}\{S\} \tag{95}$$

Vamos limitar a análise aos hamiltonianos homogêneos, isto é, vamos chamar de a a classe de todos os subconjuntos de sítios I_α para os quais podemos identificar uma operação de simetria da rede. Restringiremos os sistemas para os quais todos os K_α de $I_\alpha \in a$ têm o mesmo valor. Nesse caso, podemos escrever

$$\mathcal{H}[\{s\}] = \sum_{I_\alpha} \sum_{\alpha} K_\alpha S_\alpha = \sum_{a} K_\alpha \sum_{I_\alpha \in a} \sum_{\alpha} S_\alpha \tag{96}$$

ou,

$$\mathcal{H}[\{S\}] = K_1 \sum_{i=1}^{N} s_i + K_2 \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + K_2' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} s_i s_j + K_3 \sum_{\langle i,j,k \rangle} s_i s_j s_k + ... \tag{97}$$

onde $\langle i,j \rangle$ refere-se aos primeiros vizinhos, $\langle\langle i,j \rangle\rangle$, aos segundos vizinhos, e assim por diante, $\langle i,j,k \rangle$ aos tripletos primeiros vizinhos, etc. Podemos identificar por exemplo $K_1 = -h/k_B T$,

$K_2 = J/k_B T$, etc. O mesmo acontece com os hamiltonianos $\mathcal{H}$.

Vamos agora renormalizar a rede para uma rede cúbica com b sítios em cada bloco B para cada dimensão. Temos então b^d spins em cada bloco B. Vamos denominar os spins dos blocos como s'. Temos então

$$s'_B = f\left\{s\right\}_B \tag{98}$$

onde f mapeia os $\left\{s\right\}_\alpha$ spins no conjunto $\left\{1, -1\right\}$. Vamos definir

$$P_B = \delta_K(s', f\left\{s\right\}_B) \tag{99}$$

onde δ_K é o delta de Kronecker. Essa função nos diz se uma configuração em particular produz o valor $s'_B = 1$ ou $s'_B = -1$. Vamos introduzir agora uma função peso

$$P\left\{s', s\right\} = \prod_B P_B \tag{100}$$

onde o produto é sobre todos os blocos. Ela depende do conjunto de todos os spins dos blocos, $\{s'\}$ e o conjunto de todos os spins originais, $\{s\}$. Essa função tem as propriedades

$$\begin{aligned} P\left\{s', s\right\} &\geq 0 \\ \sum_{\{s'\}} P\left\{s', s\right\} &= 1 \end{aligned} \tag{101}$$

A função de partição pode ser escrita como

$$Z = \sum_{\{s\}} \mathcal{H}[\{s\}] = \sum_{\{s'\}} \sum_{\{s\}} P\left\{s', s\right\} e^{-\mathcal{H}\{s\}} \tag{102}$$

Definimos o hamiltoniano $\mathcal{H}\left\{s'\right\}$ escrevendo a função de partição na forma

$$e^{-G_0+\mathcal{H}'[\{s'\}]} = \sum_{\{s\}} P\left\{s', s\right\} e^{-\mathcal{H}[\{s\}]} \tag{103}$$

com a condição

$$\sum_{\{s'\}} \mathcal{H}[\{s'\}] = 0 \tag{104}$$

Podemos agora introduzir uma energia livre para os spins de bloco, $G' = N'g'$, onde g' é a densidade de energia livre,

$$e^{-G'} = \sum_{\{s'\}} e^{-\mathcal{H}'[\{s'\}]} \tag{105}$$

e escrevendo $G = Ng$ e $G_0 = N\mu$, Temos a relação entre as energias livres,

$$G_0 + G' = G \tag{106}$$

Podemos escrever o novo hamiltoniano da forma mais geral possível, $\mathcal{H}'[S']$, introduzindo um conjunto de constantes de acoplamento $\{K'_\alpha\}$. Expressando os conjuntos de constantes de acoplamento $\{K_\alpha\}$ e $\{K'_\alpha\}$ por K e K', respectivamente, podemos esperar que as energias tenham a mesma forma, ou seja,

$$\begin{aligned} G &= Ng(K) \\ G' &= N'g(K') \\ G_0 &= N\mu(K) \end{aligned} \tag{107}$$

Dessa forma, lembrando que $N' = Nb^{-d}$, $b > 1$, temos

$$g(K) = \mu(K) + b^{-d} g(K') \tag{108}$$

Podemos reconstruir os parâmetros K'_α da mesma forma que os parâmetros K_α:

$$K'_\alpha = 2^{-N'} \sum_{\{S'\}} S'_\alpha \mathcal{H}'[\{S'\}] \tag{109}$$

A equação de recorrência 108 nos permite aplicá-la iterativamente para obtermos o resultado desejado, que discutiremos a seguir. As constantes de acoplamento relacionam-se na forma

$$K \to K' = R(K) \tag{110}$$

onde R é a transformção que leva K para K'. Embora diferentes regras para a soma dos blocos de spin levem a diferentes grupos de renormalização, todos eles são, em princípio, legítimos. A dificuldade está em encontrar a relação de transformação. O método de Kadanoff não nos diz como fazê-lo.

Pontos fixos e linearização da renormalização no espaço real

As transformações R não dependem de qual interação estamos considerando, ou seja,

$$K^{(n+1)} = R(K^{(n)}) \tag{111}$$

Um ponto fixo K^* do mapa R é definido por

$$K^* = R(K^*) \tag{112}$$

Assumimos que $K^{(n)}$ atinge o ponto fixo na medida que $n \to \infty$. O hamiltoniano $\mathcal{H}^*$, correspondente a K^*, é chamado de hamiltoniano do ponto fixo. Esse ponto fixo é o que estamos interessados uma vez que nele o sistema é invariante para uma mudança de escala. Ou seja, a função de correlação é 0 ou ∞. O primeiro caso corresponde a um sistema não interagente ou a $T = \infty$. O caso que nos interessa é o segundo.

Vamos analisar o comportamento do sistema próximo do ponto fixo, que assumimos ser um

ponto crítico. Os diversos valores de K' formam um espaço de constantes. A transformação entre dois pontos define um *fluxo dinâmico discreto* nesse espaço. Para nossa análise, faremos uma aproximação linear para a variação das transformações nesse espaço. Próximos do ponto crítico, escrevemos então,

$$\delta K' = K^{(n+1)} - K^* = R(K^n) - K^* \tag{113}$$

e temos

$$\delta K' = R(K^*) + \bar{T}(K^{(n)} - K^*) \tag{114}$$

ou,

$$\delta K'_\alpha = \sum_\beta \bar{T}_{\alpha\beta}(K^*)\delta K_\beta \tag{115}$$

e

$$\bar{T}_{\alpha\beta} = \frac{\partial R_\alpha(K)}{\partial K_\beta}|_{K=K'} \tag{116}$$

A matriz $\bar{T}$ não é necessariamente simétrica. Assumiremos que ela possui autovalores não-degenerados o que garante que os autovetores da direita e da esquerda formam uma base. Vamos expandir δK_α na base dos autovetores a direita,

$$\bar{T}\vec{\varphi} = \lambda\vec{\varphi} \tag{117}$$

ou,

$$\sum_\beta \bar{T}_{\alpha\beta}\varphi^i_\beta = \lambda_i\varphi^i_\alpha \tag{118}$$

Temos então,

$$
\begin{aligned}
\delta K_\alpha &= (K^{(n)} - K^*) = \sum_i \varphi^i_\alpha v_i \\
\delta K'_\alpha &= (K^{(n+1)} - K^*) = \sum_i \varphi^i_\alpha v'_i
\end{aligned} \tag{119}
$$

Os autovetores a esquerda são definidos na forma

$$
\sum_\alpha \phi^i_\alpha \bar{T}_{\alpha\beta} = \lambda_j \phi^i_\beta \tag{120}
$$

Utilizando a propriedade

$$
\bar{\varphi} \cdot \bar{\phi} = \bar{\phi} \cdot \bar{\varphi} = \bar{1} \tag{121}
$$

onde

$$
\begin{aligned}
\bar{\phi}_{i\alpha} &= \phi^i_\alpha \\
\bar{\varphi}_{\alpha i} &= \varphi^i_\alpha
\end{aligned} \tag{122}
$$

podemos escrever

$$
\begin{aligned}
v_i &= \sum_\alpha \phi^i_\alpha \delta K_\alpha \\
v'_i &= \sum_\alpha \phi^i_\alpha \delta K'_\alpha
\end{aligned} \tag{123}
$$

Combinando com as eqs. 109 e 119, temos

$$
v'_i = \lambda_i v_i \tag{124}
$$

Os $v'_i s$ são chamados de *campos de escala* e estão associados com a transformação do grupo de

renormalização próximo do ponto crítico. Os v_i's formam um conjunto de coordenadas curvil[ineas para o ponto fixo. Partindo do hamiltoniano inicial, podemos escrever

$$v_i(K^{(n)}) = \lambda_i^n v_i(K) \tag{125}$$

A figura 4 esquematiza um espaço bidimensional de parâmetros com suas coordenadas curvilíneas em torno de um ponto fixo. Podemos classificar os campos de escala v_i pelos seus autovalores:

1. **Relevantes** se $|\lambda_i| > 1$. Esses campos tem que ser considerados uma vez que para um valor não nulo eles aumentam de intensidade a cada transformação. Para estar no ponto fixo eles têm que estar com valor zero.

2. **Irrelevantes** se $|\lambda_i| < 1$. Nesse caso, o campo diminui a cada transformação, eventualmente $v_i \to 0$ para $n \to \infty$. Próximo do ponto crítico o sistema comporta-se como se esse campo não existisse e pode ser desprezado desde o início.

3. **Marginal** se $|\lambda_i| = 1$. Esse caso depende dos detalhes do sistema e exigem uma análise diferenciada.

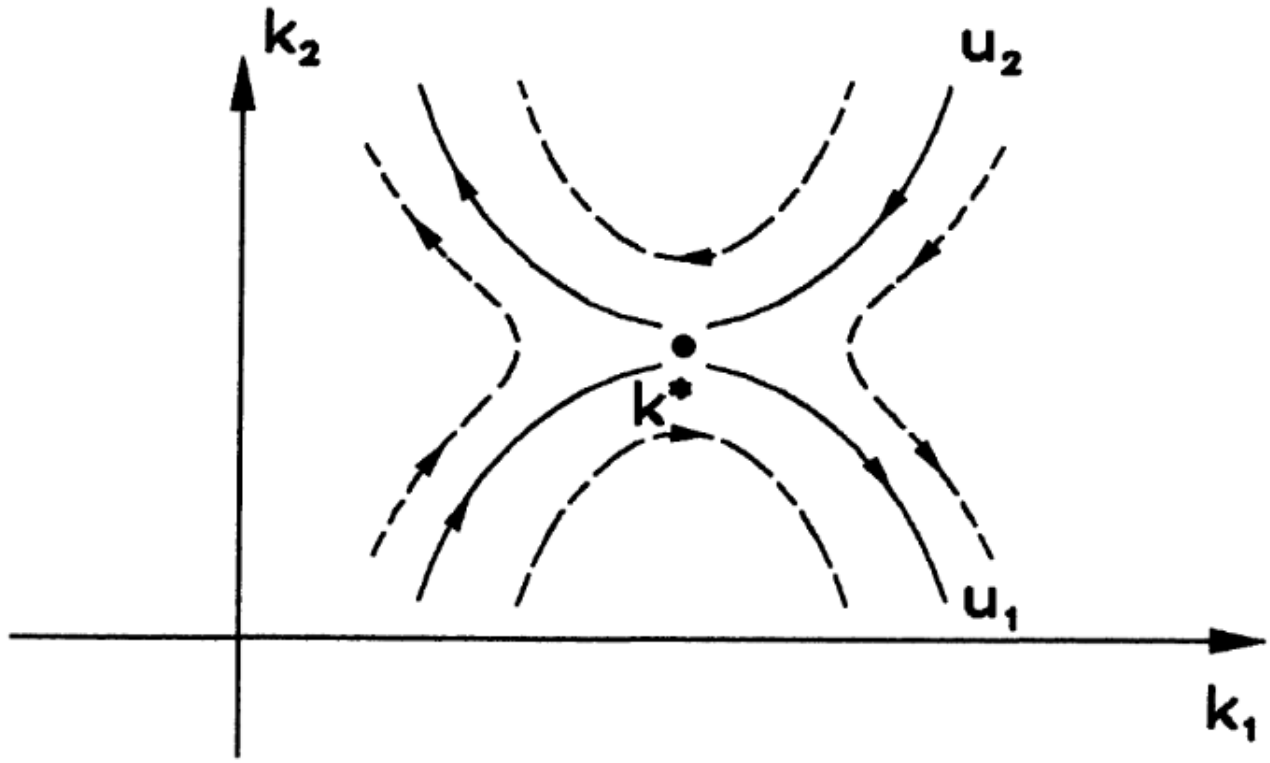

Figure 4: Ponto fixo (hiperbólico) para um espaço de parâmetros bidimensional adaptado para as coordenadas e os fluxos. Extraído da ref. 4.

Se todos os campos de escala são relevantes o ponto fixo K^* é *um nó instável*. Se todos os campos de escala são irrelevantes, ele é *um nó estável*. Finalmente, se temos os dois tipos de campos de escala, relevantes e irrelevantes, o ponto fixo é *um ponto de sela* ou *hiperbólico*. Vamos considerar esse caso. Consideremos um sistema com n campos de escala, sendo m relevantes:

$$|\lambda_1|, ..., |\lambda_m| > 1; \ |\lambda_i| \leq 1, \, i > m \tag{126}$$

A condição

$$v_1 = ... = v_m = 0 \tag{127}$$

determina uma hipersuperfície no espaço de parâmetros com dimensão $n - m$. Todos os pontos

na superfície levam a K^*enquanto que os pontos que não estão na superfície inicialmente levam a K^* mas a medida que se aproximam desse afastam-se, na medida que o número de interações aumentam. A figura 5 exemplifica a situação. A superfície é chamada de *variedde de atração (attraction manifold)* ou *superfície crítica* associada ao ponto fixo K^*.

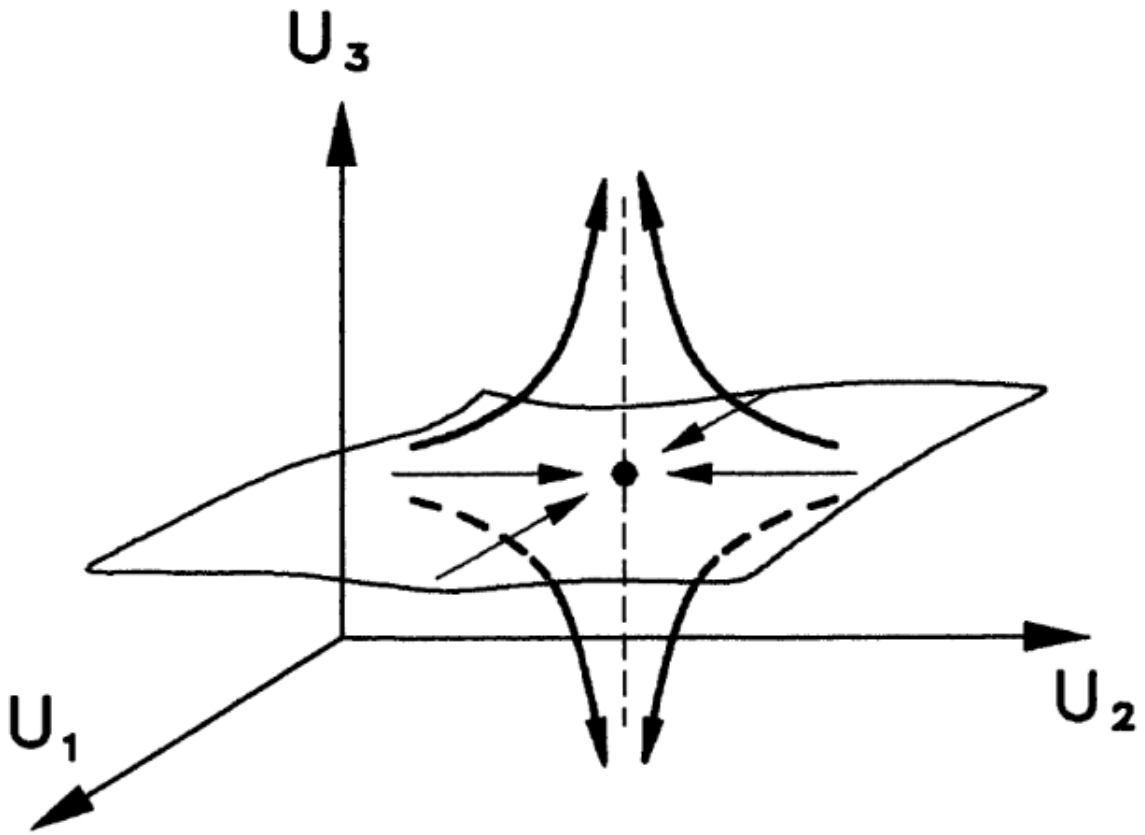

Figure 5: Superfície crítica de um ponto fixo hiperbólico com três campos de escala e $m = 1$. Extraído da ref. 4.

Vamos retornar agora a equação de recorrência 108 e utulizarmos os campos de escala como coordenadas locais na vizinhança de K^*:

$$g(v_1, v_2, ...) = \mu(v_1, v_2, ...) + b^{-d} g(\lambda_1 v_1, \lambda_2 v_2, ...) \tag{128}$$

Essa é uma *equa*ção linear não-homogênea. Sua solução geral é formada por uma solução particular mais uma solução geral da equação homogênea correspondente,

$$g(v_1, v_2, ...) = b^{-d} g(\lambda_1 v_1, \lambda_2 v_2, ...) \tag{129}$$

Vamos assumir que $\mu(v_1, v_2, ...)$seja uma função regular (analítica) dos cmapos de escala em torno da origem. Pode-se mostrar nesse caso (ver ref. 5) uma solução particular regular $g_{reg}(v_1, v_2, ...)$ pode ser obtida pela iteração de μ apenas. Podemos escrever então

$$g(v_1, v_2, ...) = g_{reg}(v_1, v_2, ...) + b^{-d} g_{sing}(v_1, v_2, ...) \tag{130}$$

onde g_{sing} é a parte da solução que apresenta um comportamento não-analítico em torno do ponto crítico e é obtida pela equação 129.

Pontos fixos, expoentes críticos e universalidade

O processo de renormalizarmos os sítios para blocos cada vez maiores tem o efeito de diminuir o comprimento de correlação, ξ. Exceto para o caso trivial, $\xi = 0$, um ponto fixo só é compatível com $\xi = \infty$. Todos os pontos na superfície crítica levam a K^* por meio de transformações de grupo de renormalização. Ou seja, *todos os pontos em uma superfície crítica devem ser críticos, isto é, ter* $\xi = \infty$. Podemos agora entender o significado de **classe de universalidade**: toda superfície crítica ou melhor todos os sistemas físicos que formam a mesma superfície crítica definem uma classe de universalidade dos sistemas críticos. Todos os sistemas físicos na superfície crítica serão direcionados para o mesmo ponto fixo K^* sob o efeito de operações de grupo de renormalização, ou seja, eles apresentarão o mesmo comportamento crítico. A diferença entre os sistemas físicos estabelece-se nos campos de escala irrelevantes, os quais não têm influência no comportamento crítico.

Vamos voltar para o nosso exemplo do modelo de Ising. Sabemos que para $t \neq 0$ o comprimento de correlação

e finito, o mesmo para $h \neq 0$. Portanto, $t = h = 0$ devem estar entre as condições que definiem a superfície crítica, ou seja, t e h devem estar associados a campos de escala relevantes. Podemos

fazer a associação $t \to 0 \Leftrightarrow v_1 \to 0$ e $h \to 0 \Leftrightarrow v_2 \to 0$. Vamos escrever os autovalores respectivos na forma

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= b^{D_t} \\ \lambda_2 &= b^{D_h} \end{aligned} \tag{131}$$

onde $D_t, D_h > 0$ para os campos relevantes e $b > 1$. A equação 129 tem a forma

$$g_{sing}(v_1, v_2) = b^{-d} g_{sing}(b^{D_t} v_1, b^{D_h} v_2) \tag{132}$$

Recuperamos de uma forma mais quantitativa o resultado do escalonamento de Widom. Com a diferença significativa que agora podemos calcular esses valores:

$$\begin{aligned} D_t &= \frac{\ln \lambda_1}{\ln b} \\ D_h &= \frac{\ln \lambda_2}{\ln b} \end{aligned} \tag{133}$$

Podemos ir mais longe ainda. Vamos chamar de v_t o campo de escala associado com a temperatura. Temos então, utilizando os autovetores a esquerda de $\bar{T}$,

$$v_t = \sum_\alpha \phi_\alpha^t (K_\alpha - K_\alpha^*) \tag{134}$$

Escrevendo explicitamente $K_\alpha = J_\alpha / k_B T$, a temperatura crítica $T_c = T_c(\{J_\alpha\})$ pode ser determinada com a condição $v_t = 0$, ou seja,

$$T_c(\{J_\alpha\}) = \frac{\sum_\alpha \phi_\alpha^t J_\alpha}{\sum_\alpha \phi_\alpha^t K_\alpha^*} \tag{135}$$

2.3 Aplicação: modelo de Ising em uma dimensão

Vamos considerar um exemplo simples, que tem solução exata, para entendermos melhor as idéias discutidas acima. Por falta de tempo, não vamos detalher muito o resultado. Para uma versão pedagógica, sugerimos a ref. 8. Aqui, vamos seguir resumidamente os passos do CL, na ausência de um campo externo.

Solução exata O hamiltoniano de Ising em uma dimensão e na ausência de campo externo pode ser escrito de forma geral

$$\begin{aligned} -\bar{\mathcal{H}} &= -\frac{\mathcal{H}}{T} = K\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} + L\sum_i \sigma_i + \sum_i C \\ &= K\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{1}{2}L\sum_i(\sigma_i + \sigma_{i+1}) + \sum_i C \\ &= \sum_i \bar{K}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \end{aligned} \tag{136}$$

onde $K = J/T$ e $L = h/T$, sendo que J é a integral de troca e h é o campo magnético externo. C é uma constante que define o zero de energia.

Para calcularmos a função de partição utilizamos matrizes de transferência. Vemos que podemos escrever a expoentencia de $\bar{K}(\sigma, \sigma')$ na forma

$$e^{\bar{K}(\sigma,\sigma')} = e^C \begin{bmatrix} e^{K+L} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K+L} \end{bmatrix} \equiv \bar{M}(K, L, C) \tag{137}$$

Quanto $h = 0$ e $C = 0$, temos

$$\bar{M}(K, 0, 0) = \cosh K(1 + \sigma\sigma' \tanh K) \tag{138}$$

Para calcular a função de partição vamos utilizar condições de contorno periódicas. Com isso, podemos escrever

$$Z_N = \sum_{\sigma_\prime,\ldots,\sigma_N} e^{-\bar{\mathcal{H}}} = \mathrm{Tr}\bar{M}^N = e^{NC}(\lambda_+^N + \lambda_-^N) \tag{139}$$

onde $\lambda_\pm$ são autovalores de $\bar{M}(K, L, 0)$,

$$\lambda_\pm = e^K \cosh L \pm (e^{2K}\sinh^2 L + e^{-2K})^{1/2} \tag{140}$$

Na ausência de campo, $h = 0$, o autovalor maior é $\lambda_+ = 2\cosh K$. No limite de N grande, λ_-^N pode ser desprezado e a energia livre por spin é

$$\begin{aligned} \frac{f}{T} &= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}[-Z_N] \\ &= -C - \ln[e^K \cosh L + (e^{2K}\sinh^2 L + e^{-2K})^{1/2}] \end{aligned} \tag{141}$$

e, para $T(K \to \infty)$ pequeno e $h(L \to 0,\ Le^{2K} \ll 1)$ pequeno, temos

$$f - f_0 \to -Te^{-2K} - \frac{1}{2}e^{2K}\left(\frac{h^2}{T}\right) \tag{142}$$

onde

$$f_0 = -J - TC \tag{143}$$

A energia por spin do estado fundamental é J quando $C = 0$ e temos um gap no espectro de excitação com uma dependência exponencial com a temperatura no estado fundamental. A susceptibilidade a baixas temperaturas é

$$\chi = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2} = \frac{1}{T}e^{2K} \tag{144}$$

Temos a divergência de χ para $T \to 0$, o que indica que há um ponto crítico em $T = 0$ no modelo de Ising em uma dimensão. Esse resultado era esperado qualitativamente uma vez que

em uma dimensão não deveríamos esperar uma transição para fase ordenada para temperaturas não nulas. A fase a $T = 0$ é com os spins totalmente ordenados enquanto que a $T \neq 0$, os spins aparecem desordenados.

Renormalização Vamos proceder agora com o processo de renormalização de Kadanoff. Para isso, vamos reescrever a rede em blocos de $b - 1$ spins, deixando um spin em cada sítio como na figura . A função de partição da nova rede é igual a da rede original e pode ser escrita na forma

$$Z_N(K, L, C) = \mathrm{Tr}\bar{M}^N = \mathrm{Tr}[\bar{M}^b]^{N'} = Z_{N'}(K', L', C') \tag{145}$$

onde $N' = N/b$ é o número de sítios da nova rede. Os potencias da rede decimada podem ser determinados por

$$\bar{M}(K', L', C') = \bar{M}^b(K, L, C) \tag{146}$$

Quando $L = 0$, temos

$$\begin{aligned} \tanh K' &= (\tanh K)^b \\ \Rightarrow K' &= \tanh^{-1}[(\tanh K)^b] \end{aligned} \tag{147}$$

Essa equação é a *relação de recursão do grupo de renormalização.* Ela pode ser iterada um certo número de vezes e, no infinito, K chega a um *ponto fixo* K^*, tal que $K' = K = K^*$. Nesse caso temos apenas dois pontos fixos:

$$\begin{aligned} \tanh K &= 0 \ (K = \infty) \\ \tanh K &= 1 \ (K = 0) \end{aligned} \tag{148}$$

$\tanh K$ diminui a cada iteração aproximando-se do ponto fixo $\tanh K = 0$ na medida que o número de interações tendem ao infinito. Se $K = \infty$, $\tanh K$ permanece com valor unitário qualquer número de iterações. Como todos os valores de K outros que não seja $K = \infty$ tendem a $K = 0$, dizemos que o ponto fixo $\tanh K = 0 (T = \infty)$ é *estável*. O ponto fixo em $K = \infty$ é *instável*, uma vez que os pontos de atração para esse valor é apenas o próprio ponto $K = \infty$. A figura resume essa descrição.

O ponto fixo estável descreve o comportamento para todas as temperaturas finitas. Ele está associado a fase paramagnética. O ponto instável descreve a transição de fase em $T = 0$.

O comprimento de correlação é

$$\xi' = \xi / b \tag{149}$$

ou seja, o comprimento de correlação medido no parâmetro de rede da nova rede é b^{-1} vezes o comprimento de correlação medido na rede original. O comprimento de correlação diminui na medida que ele é reescalonado. Temos apenas dois pontos fixos: $\xi = 0$ e $\xi = \infty$.O segundo caso corresponde ao ponto crítico enquanto que o primeiro corresponde a temperaturas altas não críticas.

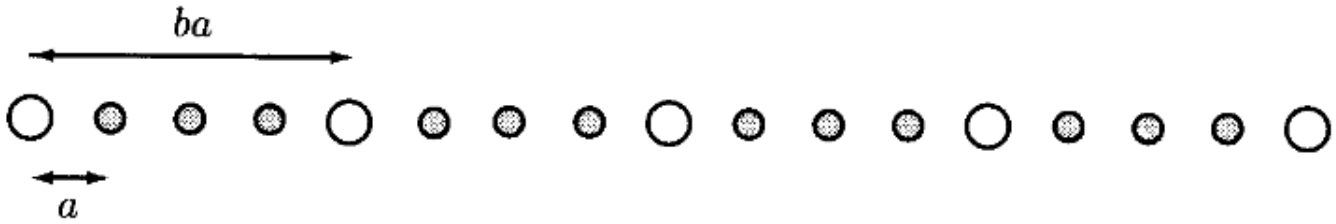

Figure 6: Esquema de decimação de uma cadeia de Ising unidimensional. Extraído de CL.

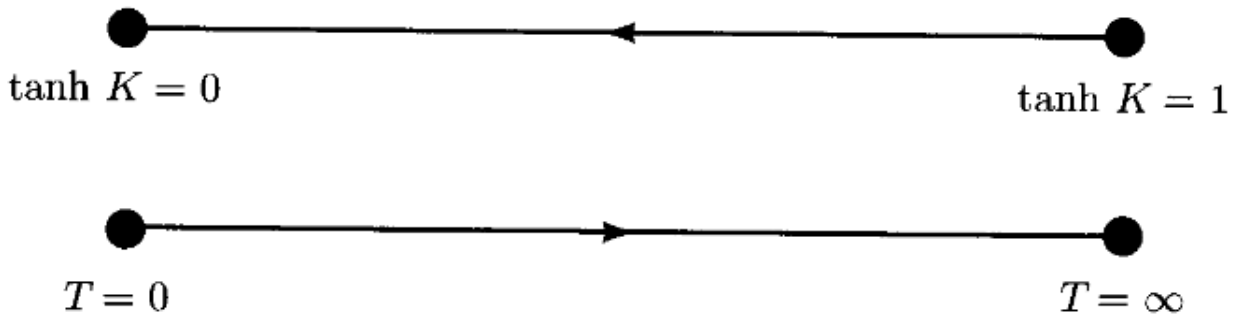

Figure 7: Fluxo do grupo de renormalização para $\tanh K$ e T, mostrando os pontos fixos estável em $\tanh K = 0\,(T = \infty)$ e instável em $\tanh K = 1\,(T = 0)$. Extraído de CL.

No caso em que L e C não são nulos, podemos encontrar as relações de recorrência a partir da equação 146. Para $b = 2$ temos

$$\begin{aligned} x' &= \frac{x(1+y)^2}{(x+y)(1+xy)} \\ y' &= \frac{y(x+y)}{(1+xy)} \\ w' &= \frac{w^2 xy}{(1+y)^2(x+y)(1+xy)} \end{aligned} \tag{150}$$

onde

$$\begin{aligned} x &= e^{-4K} \\ y &= e^{-2L} \\ w &= e^{-4C} \end{aligned} \tag{151}$$

As equaões para x e y não dependem de w e têm três pontos fixos:

$$
\begin{aligned}
(1)\, x^* &= y^* = 0 \\
(2)\, x^* &= 1,\ y^* \text{ arbitrário} \\
(3)\, x^* &= 0,\ y^* = 1
\end{aligned} \tag{152}
$$

O primeiro ponto fixo corrresponde a uma configuração onde todos os spins estão alinhados para todas as temperaturas e corresponde a um campo externo infinito. O segund ponto fixo descreve a fase paramagnética a altas temperaturas. Finalmente, o terceiro ponto fixo descreve o ponto crítico a $T = 0$. Vamos observar esse caso com mais cuidado, que é o mais interessante. Linearizando as equações de recorrência próximo ao ponto fixo temos

$$
\begin{aligned}
\delta y' &= (-2L') = 2\delta y = 2(-2L) \\
\delta x' &= 4\delta x
\end{aligned} \tag{153}
$$

onde $\delta x = x - x^*$ e $\delta y = y - y^*$.

A energia livre se escreve na forma

$$
\frac{f(K,L,C)}{k_B T} = -\frac{1}{N} \ln Z_N(K,L,C) = -\frac{1}{bN'} \ln Z'_{N'}(K',L',C') \tag{154}
$$

A única dependência da função de partição em C é por meio do fator e^{NC}. Podemos escrever então,

$$
f(K,L,C) = C + f_{sing}(K,L) \tag{155}
$$

Retirando a parte não-singular, C, temos

$$
f_{sing}(\delta x, \delta y) = b^{-1} f_{sing}(b^2 \delta x, b\delta y) \tag{156}
$$

para $b = 2$. Com $\delta y = -2L$ e $\delta x = e^{-4K}$, temos

$$f_{sing}(e^{-K}, L) = e^{-2K} f_{sing}(Le^{2K}) \tag{157}$$

que é o resultado que se obtém da solução exata (ver CL).

A figura 8 mostra o fluxo no espaço de parâmetros para três valores de h.

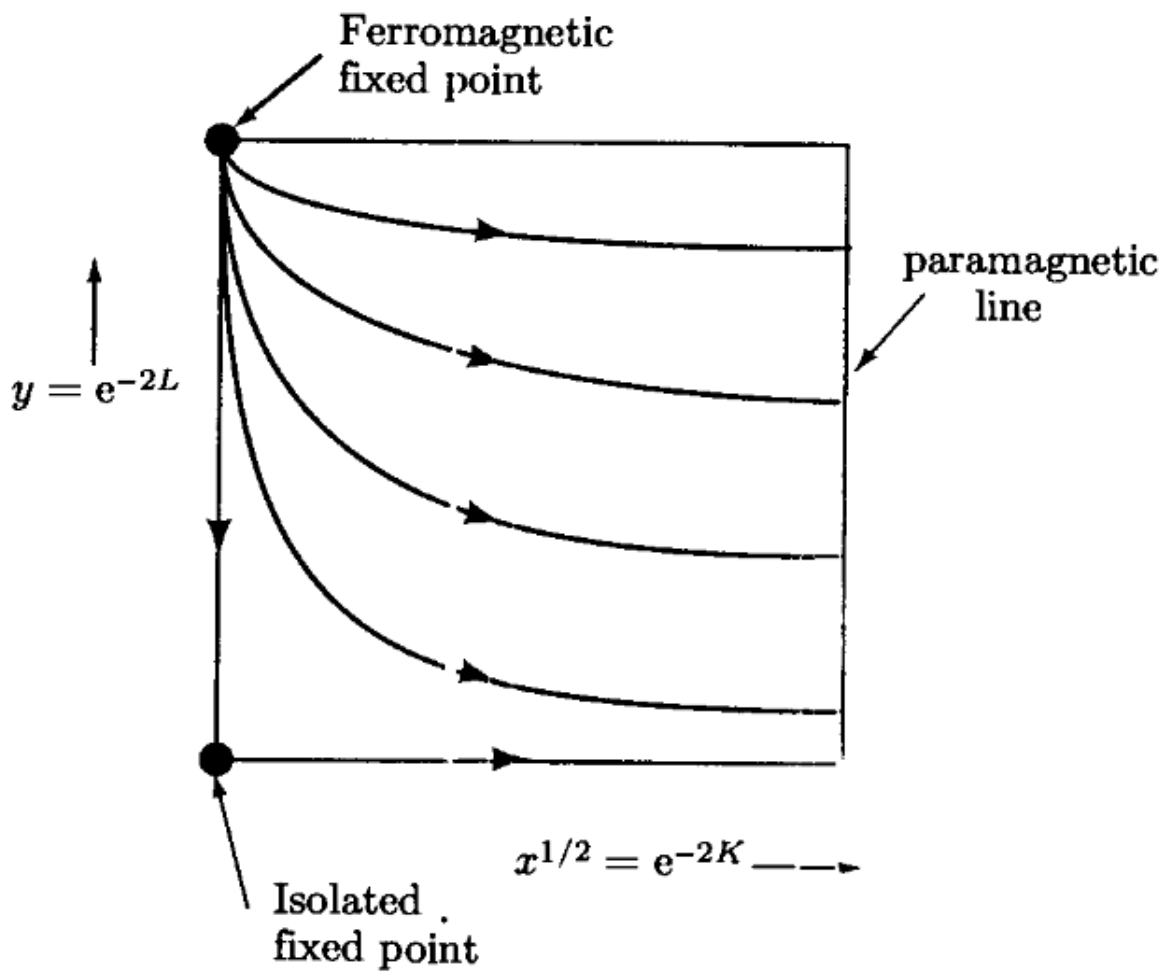

Figure 8: Fluxo de grupo de renormalização na presença de campo externo mostrando três pontos fixos. Extraído de CL (ref. original D.R. Nelson e M.E. fisher, *Ann. Phys.* **91**, 226 (1975)).

2.4 Modelo de Ising em duas dimensões

Em duas dimensões as transformadas das constantes de acoplamento tornam-se cada vez mais complexas. Em particular, partindo do hamiltoniano com interação entre os primeiro vizinhos a primeira transformação leva a uma interação entre segundos vizinhos, além da dos primeiros vizinhos, e uma interação entre quatro spins (ver ref. 8). Essa última cria problemas cada vez mais complexos. Sucessivas interações tornam o hamiltoniano impraticável. Aproximações são necessárias. O CL discute uma solução que introduz o método de Migdal-Kadanoff. O Morandi et al. (ref. 4) discute uma solução utilizando expansão em cumulantes.

2.5 Renormalização no espaço de momentos

Vamos trabalhar no espaço-$\vec{k}$. Para isso, vamos relembrar alguns resultados úteis para a transformada de Fourier:

$$\begin{aligned}
\int \mathrm{d}^d r\, |\nabla\phi(\vec{r})|^2 &= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} k^2 \phi^*(\vec{k})\phi(\vec{k}) \\
\int \mathrm{d}^d r \phi(\vec{r}) h(\vec{r}) &= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} \phi(\vec{k}) h^*(\vec{k}) \\
\int \mathrm{d}^d r\, |\phi(\vec{r})|^2 &= \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}} \phi^*(\vec{k})\phi(\vec{k}) \\
\int \mathrm{d}^d r\, |\phi(\vec{r})|^4 &= \frac{1}{V^3}\sum_{\vec{k}_1,\ldots,\vec{k}_4} \delta_{\vec{K}}(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_3-\vec{k}_4)\phi^*(\vec{k}_1)\phi^*(\vec{k}_2)\phi(\vec{k}_3)\phi(\vec{k}_4)
\end{aligned} \tag{158}$$

A função de partição que consideramos é

$$\mathcal{Z}(h,t) = e^{-G(h,t)/k_B T} = \int D\tilde{\phi}(\vec{r}) e^{-(\tilde{\mathcal{H}} - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\tilde{\phi}(\vec{r}))/k_B T}$$

onde

$$\tilde{\mathcal{H}} = \int \mathrm{d}^d r \tilde{f}[\tilde{\phi}(\vec{r})] + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d r [\nabla\tilde{\phi}(\vec{r})]^2$$

onde

$$\tilde{f}[\tilde{\phi}(\vec{r})] = \frac{1}{2}\left|\nabla\tilde{\phi}(\vec{r})\right|^2 + \frac{1}{2}r\tilde{\phi}(\vec{r})^2 + u\tilde{\phi}(\vec{r})^4 + ...$$

onde escolhemos o coeficiente do termo gradiente como sendo 1/2 o que definie a normalização de ϕ. Escrevendo no espaço de transformada de Fourier, temos

$$\mathcal{H}(t) - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\tilde{\phi}(\vec{r}) = \frac{1}{2V}\sum_{\vec{k}}(r+k^2)\left|\phi(\vec{k})\right|^2 + \frac{u}{V^3}\sum_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}\vec{q}'}\phi(\vec{k})\phi(\vec{k}')\phi(\vec{q})\phi(\vec{q}')\delta_{\vec{k}+\vec{k}'+\vec{q}+\vec{q}',0} - \frac{1}{V}\sum_{\vec{k}}\phi(\vec{k})h(-\vec{k}) + ...$$

A somatória assume que há um cutoff para grandes vetores de onda. Para uma rede hipercúbica esse pode ser simplesmente $|k_{max}| = 2\pi/a$, onde a é o parâmetro da rede. No limite do contínuo, precisamos introduzir o cutoff artificialmente. Em geral, optamos, por simplicidade, por um cutoff esférico, $\left|\vec{k}\right| < \Lambda$. Mais uma vez, as previsões físicas devem ser independentes do cutoff, no limite deste indo para o infinito.

Assumindo uma aproximação contínua para a rede, para campo externo constante, a energia pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} G(t,h) = \mathcal{H}(t) - \int \mathrm{d}^d r h(\vec{r})\tilde{\phi}(\vec{r}) &= -h\phi(0) + \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}(r + \left|\vec{k}\right|^2)\left|\phi(\vec{k})\right|^2 \\ &\quad + u\int \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}\frac{\mathrm{d}^d k'}{(2\pi)^d}\phi(\vec{k}+\vec{q})\phi(\vec{k}'-\vec{q})\phi(-\vec{k}')\phi(-\vec{k}) + ... \end{aligned}$$

onde a integral subentende um limite do tipo $\left|\vec{k}\right| < \Lambda$.

A função de partição é calculada agora na forma

$$\mathcal{Z} = \mathcal{N}\int D\phi(\vec{k})D\phi(\vec{k})^* e^{-G(h,t)}$$

onde

$$\int D\phi(\vec{k})D\phi(\vec{k})^* \to \prod_{|\vec{k}|<\Lambda} \mathrm{d}\mathcal{R}\phi(\vec{k})\mathrm{d}\mathcal{I}\phi(\vec{k})$$

Para um parâmetro de ordem rela, nos restringimos a metada do espaço-$\vec{k}$ tendo em vista a condição $m(\vec{k})^* = m(-\vec{k})$.

O processo de renormalização consiste agora em continuar o processo de granularidade espessa para comprimentos de onda cada vez maiores, sucessivamente. Esse processo de granular o sistema a cada renormalização consiste em alterar sucessivamente o valor do cutoff para Λ/b. A figura 9 ilustra esse processo, comparando a renormalização do espaço real com a do espaço $\vec{k}$. Para cada renormalização, integramos os valores de k na camada definida pelos raios Λ e Λ/b e reescalonamos o problema a seguir. O que temos que desenvolver agora, dentro da mesma idéia da renormalização no espaço direto, é um processo de efetuar a média sobre as flutuações do parâmetro de ordem em distâncias curtas (ou grandes vetores de onda) e reescalonar o mesmo e o momento de forma que possamos obter uma energia livre com a mesma forma funcional e o mesmo cutoff para altos valores do momento (cutoff no ultra-violeta). Devemos, aqui também, esperar que novos acoplamentos apareçam. Ou seja, temos de considerar um espaço de constantes de acoplamento bastante geral (infinito).

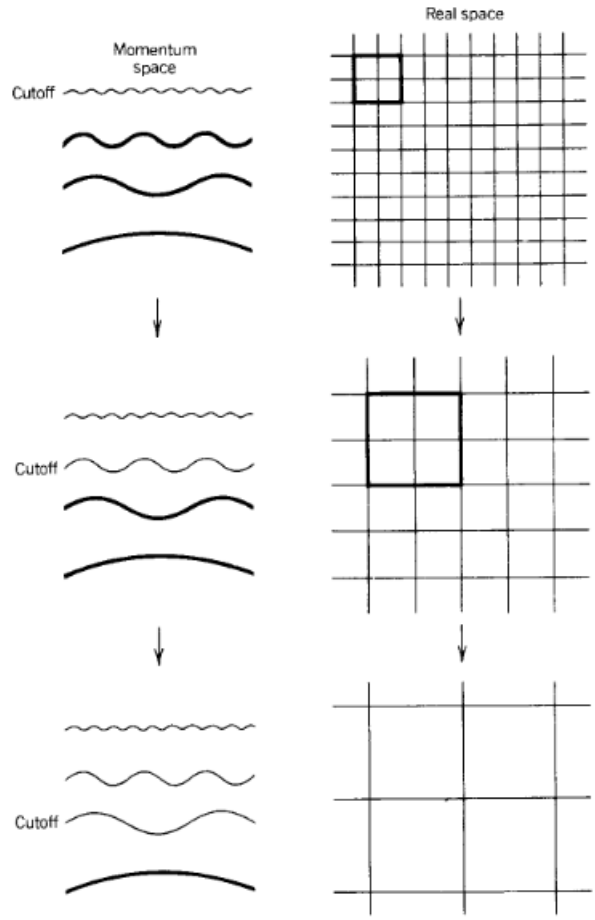

Figure 9: Comparação entre a granularidade espessa no espaço real e no espaço de momentos. Extraído de 2.

Podemos esquematizar a metodologia em três passos (por praticidade vamos incluir o termo de campo no hamiltoniano):

1. *Integração*: Definir um novo hamiltoniano $\mathcal{H}'$ integrando $\vec{k}$ entre os valores absolutos Λ e Λ/b $(b > 1)$:

$$e^{-\mathcal{H}'[\phi(\vec{k})]} = e^{\Omega} \prod_{\Lambda/b<\left|\vec{k}\right|<\Lambda} \int \mathrm{d}\phi(\vec{k})\mathrm{d}\phi * (\vec{k}) e^{-\mathcal{H}[\phi(\vec{k})]} \tag{159}$$

onde Ω [e uma constante que depende do cutoff Λ e das constantes de acoplamento. O novo hamiltoniano depende apenas de $\phi(\vec{k})$ onde $\left|\vec{k}\right| < \Lambda/b$. Com essa diferença ele tem a mesma forma do hamiltoniano original mas com novas constantes de acoplamento. A função de

partição tem a forma

$$\mathcal{Z} = e^{-G} = e^{\Omega}\mathcal{N} \prod_{|\vec{k}|<\Lambda/b} \int \mathrm{d}\phi(\vec{k})\mathrm{d}\phi * (\vec{k}) e^{-\mathcal{H}'[\phi(\vec{k})]} \tag{160}$$

2. *Reescalonamento*: Devemos restaurar o cutoff para o valor Λ. Para isso aumentamos a unidade de comprimento pelo fator b mudando a variável

$$\vec{k}' = b\vec{k} \tag{161}$$

O hamiltoniano deve ser escrito agora na forma

$$\mathcal{H}'[\phi(\vec{k})] \to b^{-d}\mathcal{H}'[\phi(\vec{k}')] \tag{162}$$

3. *Normalização*: Finalmente devemos restaurar a normalização do parâmetro de ordem. Para isso fazemos o coeficiente do termo de gradiente para 1/2. Isso é feito com uma operação do tipo

$$\phi(\vec{k}) \to \alpha(b)\phi(b\vec{k}') \tag{163}$$

Como

$$\alpha(b)\alpha(b') = \alpha(bb'),\ \ b, b' > 1 \tag{164}$$

com a condição $\alpha(1) = 1$, então definindo

$$y = \frac{\mathrm{d}\alpha(b)}{\mathrm{d}b}|_{b=1}$$

e derivando a eq. 164, temos

$$b\frac{\mathrm{d}\alpha(b)}{\mathrm{d}b} = y\alpha(b);\ \alpha(1) = 1$$

o que resulta, após a integração, em

$$\alpha(b) = b^y$$

As figuras 10 e 11 ilustram esse procedimento.

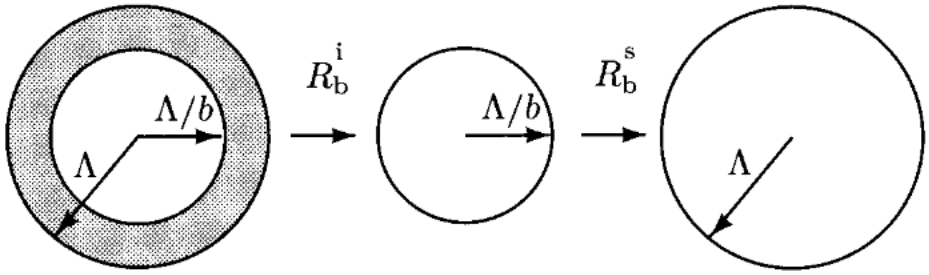

Figure 10: Efeito de diminuir os graus de liberdade na zona de Brillouin. A esfera original tem raio Λ. Todos os campos com vetor de onda $\vec{k}$ entre Λ/b e Λ são removidos, ficando uma zona de Brillouin com raio Λ/b. Na transformação seguinte os vtores de onda são reescalonados para $\vec{k} = b\vec{k}$. A nova zona de Brillouin tem raio Λ mas o número total de vetores de ona $\vec{k}$ diminui para $N' = N/b^d$. Extraído de CL.

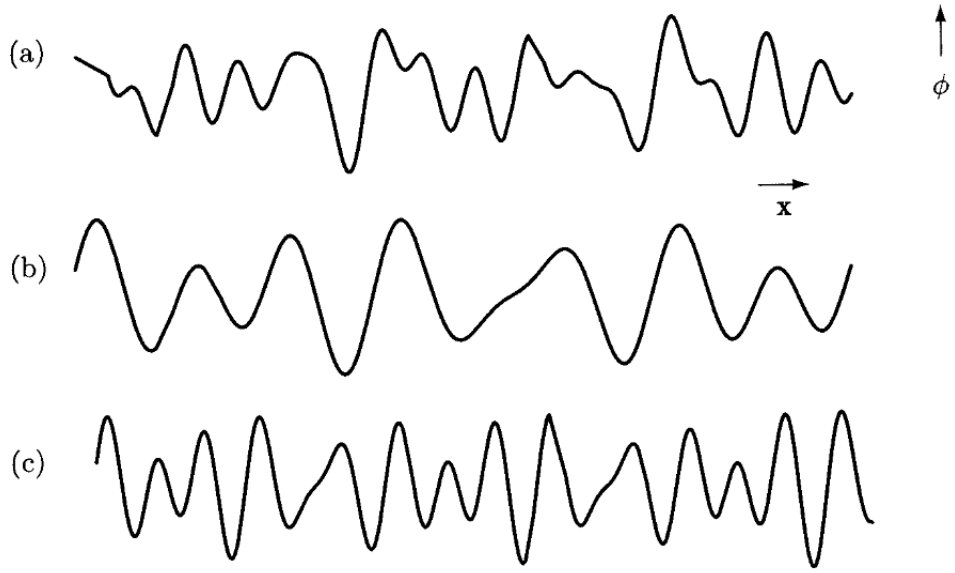

Figure 11: (a) Representação esquemática dos campos $\phi(\vec{r})$ com variação espacial em uma dimensão com o máximo de vetores de onda na transformada de Fourier com cutoff Λ. (b) Os campos $\phi(\vec{r})$ depois que os vetores de onda de maior grau de liberdade foram removidos. Os vetores de onda com maior valor são Λ/b. (c) Reescalonamento do campo $\phi'(\vec{r})$ em função da coordenada reescalonada $\vec{r}' = \vec{r}/b$. O vetor de onda máximo em unidades reescalonadas é novamente Λ, como mostram as oscilações de $\phi'(\vec{r}')$. Extraído de CL.

Esse procedimento estabelece novamente uma transformação $\mathcal{R}$que permite calcular as constantes de acoplamento:

$$\mathcal{K}' = \mathcal{R}_b(\mathcal{K}) \tag{165}$$

com

$$\mathcal{R}_1 = \text{identidade}$$

e

$$\mathcal{R}_b\mathcal{R}_{b'} = \mathcal{R}_{bb'}$$

A análise que fizemos para as transformações de blocos no espaço real permane válida. O ponto

fixo é encontrado por meio da equação

$$\mathcal{K}^* = \mathcal{R}_b(\mathcal{K}^*) \tag{166}$$

2.6 Modelo gaussiano

Vamos aplicar o método de renormalização no espaço-$\vec{k}$ para o modelo gaussiano. A energia llivre é descrita pelo funcional

$$\mathcal{F}\left\{\phi(\vec{k}), h\right\} = -h\phi(0) + \frac{1}{2}\int_{|k|<\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}[\left|\vec{k}\right|^2 + r(T)\left|\phi(\vec{k})\right|^2 \tag{167}$$

1. A primeira etapa é calculada sem problemas uma vez que a integração envolve modos independentes. Temos então,

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0 \prod_{\left|\vec{k}\right|<\Lambda/b} \int \mathrm{d}\phi(\vec{k})\mathrm{d}\phi(\vec{k})^* e^{-\mathcal{H}'\{\phi,h\}} \tag{168}$$

onde

$$\mathcal{H}'\{\phi, h\} = -h\phi(0) + \frac{1}{2}\int_{\left|\vec{k}\right|<\Lambda/b} \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}[\left|\vec{k}\right|^2 + r(T)]\left|\phi(\vec{k})\right|^2 \tag{169}$$

A parte regular $\mathcal{Z}_0$ é

$$\mathcal{Z}_0 = \mathcal{N} \prod_{\Lambda>\left|\vec{k}\right|>\Lambda/b} \left\{\pi[r(T) + \left|\vec{k}\right|^2]^{-1}\right\} \tag{170}$$

2. O segundo passo se transforma na forma

$$\mathcal{H}' \to -h\phi(0) + \frac{1}{2}b^{-d}\int_{\left|\vec{k}\right|<\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}[b^{-2}\left|\vec{k}\right|^2 + r(T)]\left|\phi(\vec{k}/b)\right|^2 \tag{171}$$

3. O terceiro passo tem apenas uma solução,

$$y = 1 + \frac{d}{2}$$

ou seja,

$$\phi(\vec{k}') = b^{-(d+2)/2}\phi(\vec{k}) = b^{-(d+2)/2}\phi(\vec{k}'/b) \tag{172}$$

O resultado final é

$$\mathcal{H}'\{h,\phi\} = -h'\phi(0) + \frac{1}{2}\int_{|\vec{k}|<\Lambda} \frac{\mathrm{d}^d k}{(2\pi)^d}[\left|\vec{k}\right|^2 + r'(T)]\left|\phi(\vec{k})\right|^2 \tag{173}$$

onde

$$\begin{aligned} h' &= b^{1+d/2}h \\ r' &= b^2 r \end{aligned} \tag{174}$$

de onde temos

$$\begin{aligned} D_t &= 2 \\ D_h &= 1 + \frac{d}{2} \end{aligned} \tag{175}$$

e como $b > 1$, r e t são variáveis relevantes.

O comprimento de correlação pode ser obtido da condição

$$
\begin{aligned}
\xi r &= \text{constante} \\
\Rightarrow \quad \xi &= \sim r^{-1/2} \sim t^{-1/2}
\end{aligned} \tag{176}
$$

Os demais expoentes podem ser obtidos das relações de escalonamento.

O resultado tem um aprendizado importante: *podemos obter os expoentes críticos em um sistema contínuo realizando uma transformação infinitesimal uma vez que tudo que precisamos é a razão da variação das constantes de acoplamento.*

2.7 Modelo ϕ^4

Para uma análise completa ver a ref. 6. Uma análise qualitativa, ver a ref. 7. Aqui seguimos os passos da ref. 2.

Vamos aplicar a técnica de grupo de renormalização para o modelo ϕ^4 de Landau. A energia é expressa na forma (onde novamente estamos incluindo a parte em gradiente do parâmetro de ordem):

$$
\mathcal{H}[\phi] = \int \mathrm{d}^d r \left\{ \frac{1}{2} \left| \nabla \phi(\vec{r}) \right|^2 + \frac{1}{2} r \phi(\vec{r})^2 + u \phi(\vec{r})^4 \right\} \tag{177}
$$

O primeiro passo é integrar a energia em uma camada infinitesimal do espaço $\vec{k}$, reduzindo o cutoff para Λ/b, com $b \sim 1$. Para um volume finito grande V, o número de estados na camada é

$$
\begin{aligned}
N &= \frac{1}{2} V S_d(\Lambda) \Delta k \\
\frac{\Delta k}{\Lambda} &= \frac{\Delta \Lambda}{\Lambda} = \Delta(\ln \Lambda) \\
&= \ln \Lambda - \ln(\Lambda/b) = \ln b
\end{aligned} \tag{178}
$$

onde $S_d(\Lambda)$ é a área da superfície da esfera de raio Λ e dimensão-d.

Vamos escrever

$$\phi(\vec{r}) = \langle\phi(\vec{r})\rangle + \delta\phi(\vec{r}) \tag{179}$$

$\langle\phi(\vec{r})\rangle$ é o parâmetro de ordem médio, que apresenta uma média com granularidade mais espessa que $\phi(\vec{r})$. $\delta\phi(\vec{r})$ contém as componentes de Fourier a serem integradas.

Vamos analizar $\delta\phi(\vec{r})$ expandindo em um conjunto de N pacotes de onda reais $\varphi_i(\vec{r})$, $i = 1, ..., N$, os quais são construídos por ondas planas cujos valores de $\vec{k}$ encontra-se na camada em consideração e seus centros são escolhidos de forma a cobrir todo o espaço do sistema. A extensão no espaço real é grande, da ordem de $|\Delta\vec{r}| \sim 1/\Delta k$, contendo ondas com vetores de onda extremamente pequenos, da ordem de $\sim 1/\Lambda$. Assumimos as seguintes aproximções/valores:

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}^d r[\varphi_i(\vec{r})]^2 &= 1 \\ \int \mathrm{d}^d r[\varphi_i(\vec{r})]^n &\approx 0 \text{ para } n \text{ impar} \\ \int \mathrm{d}^d r\varphi_i(\vec{r})\varphi_j(\vec{r}) &\approx 0 \end{aligned} \tag{180}$$

Ou seja,

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}) &= \langle\phi(\vec{r})\rangle + \delta\phi(\vec{r}) \\ \delta\phi(\vec{r}) &= \sum_{i=1}^{N} c_i\varphi_i(\vec{r}) \end{aligned} \tag{181}$$

Para calcular o primeiro passo, substituímos a eq. 181 na eq. 177 e integramos os termos em $\delta\phi(\vec{r})$. Utilizamos os resultados da eq. 180 e também as seguintes aproximações:

1. $\langle\phi(\vec{r})\rangle$ é aproximadamente constante no pacote de onda.

2. $\int \mathrm{d}^d r\, |\nabla\varphi_i(\vec{r})|^2 \approx \Lambda^2$

3. Termos em $\delta\phi(\vec{r})^4$ são desprezados.

Os valores obtidos são

References

[1] Chaikin e Lubenski, **Condensed Matter Physics**, Oxford, 1995.

[2] Kerson Huang, **Statistical Mechanics**, 2a. ehttp://www.libgen.info/d. John Wiley & Sons, 1987.

[3] Edouard Brézin, **Introduction to Statistical Field Theory**, Cambridge, 2010.

[4] G. Morandi, F. Napoli e E. Ercolessi, **Statistical Mechanics: An Intermediate Course**, 2a. ed., World Scientific, 2001.

[5] Th. Niemeijer a J.M.J. van Leeuwen, em **Phase Transitions and Critical Phenomena**, vol. 6, pp. 425-505, C. Domb e M.S. Green, eds., Academic Press, 1976.

[6] K.G. Wilson e J. Kogut, *Phys. Rep. C* **12**, 75 (1974).

[7] K.G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 583 (1983).

[8] H.J. Maris e L.P. Kadanoff, "Teaching the renormalization group", *Am. J. Phys.* **46**, 652 (1978).