

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE FÍSICA

SOBRE A DINÂMICA DAS TRANSIÇÕES DE FASE ESTRUTURAIS *

Joacir Thadeu Nascimento Medeiros

Tese apresentada ao Instituto de Física da UFRGS para obtenção do título de Doutor em Ciências.

* Trabalho parcialmente financiado pelo Banco Nacional do Desenvolvimento Econômico, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico e Agência Internacional de Energia Atômica.

Porto Alegre

1975

"Valeu a pena? Tudo vale a pena

Se a alma não é pequena."

(F.Pessoa)

"Acima dos olhos brilhantes e inspirados da mocidade

Vejo se levantar o gorro burlesco do rufião."

(H.Heine)

AGRADEÇO A

Arno Holz, pela brilhante orientação;
Victoria E. Herscovitz, pela leitura crítica do
manuscrito;
C.A.Gravina, pela capa;
Luisa Zafaneli e Beth Fiori, secretárias;
Zuleika Berto, bibliotecária.

DEDICO A

Meus amigos

Ênio 'Cabeça' Silveira,
Paulo Cesar 'Baixo' Tiam,
'Zé' Nicodemo Geralt.

Meus pais

Antônio e Belmira.

Memória de

Marcelo Renato.

RESUMO

Estuda-se a dinâmica das transições de fase estruturais com uma interação de quarta ordem entre os campos de fonons macios na aproximação $1/n$, utilizando o formalismo de muitos corpos a temperaturas finitas. Dois limites são analisados: temperatura de transição T_c alta (limite clássico) e $T_c = 0$ (limite quântico). Calcula-se a contribuição dinâmica ao coeficiente crítico η da função correlação nestes limites. No limite clássico não há efeito dinâmico em η , enquanto que no limite quântico, $\eta \neq 0$ somente para dimensões do sistema $d < 3$. Calcula-se também o coeficiente crítico dinâmico z em T_c ; no caso quântico z é o mesmo que na ausência da interação. O comportamento crítico dinâmico viola a hipótese de "scaling" dinâmico nos dois limites.

ABSTRACT

The dynamics of structural phase transitions with a fourth order interaction between the soft phonon fields is studied in the $1/n$ approximation, using many body methods at finite temperatures. Two limits are considered: High transition temperature T_c (classical limit) and $T_c = 0$ (quantum limit). The dynamical contribution to the critical coefficient η of the correlation function is calculated in these limits. It is found that there is no dynamical contribution to η in the classical limit, whereas in the quantum limit η is non-zero only for dimensions of the system $d < 3$. Also the dynamical critical coefficient z is calculated at T_c ; in the quantum limit z is the same as in the absence of interaction. The dynamical critical behaviour violates the dynamical scaling hypothesis in both limits.

Í N D I C E

INTRODUÇÃO	1
I - CONSIDERAÇÕES GERAIS	3
a. Universalidade e "Scaling"	5
b. Transições de Fase Estruturais	8
II - O MODELO E A APROXIMAÇÃO	13
a. O Modelo Teórico	13
b. A Aproximação $1/n$	20
III - CÁLCULO DO ELO ELEMENTAR	27
a. Limite Clássico	34
b. Limite Quântico	38
IV - COMPORTAMENTO CRÍTICO ESTÁTICO	46
a. Limite Clássico	47
b. Limite Quântico	49
V - COMPORTAMENTO CRÍTICO DINÂMICO	54
a. Limite Clássico	54
A Parte Imaginária da Auto-Energia	60
A Parte Real da Auto-Energia	67
b. Limite Quântico	75
CONCLUSÕES	78
APÊNDICE	84
REFERÊNCIAS	87

INTRODUÇÃO

Transições de fase estruturais mediadas por fonons macios têm merecido um grande interesse nos últimos anos, tanto experimental^{1,2} quanto teoricamente^{1,3}. Um dos aspectos interessantes deste fenômeno são as flutuações críticas associadas com as transições de fase de segunda ordem que determinam os coeficientes críticos de quantidades termodinâmicas e que se comportam bastante bem em termos de universalidade. Este fato tem sido mostrado experimentalmente e está confirmado teoricamente nos casos onde aproximações clássicas (estáticas) têm sido usadas. Em particular, Cowley e Bruce⁴ e também Jovet e Holz⁵ mostraram que uma transição de fase estrutural mediada por um campo de fonons com n componentes pode ser estudada por meio de um modelo de Ising. Uma certa falha nas aproximações acima é que a aproximação clássica a temperaturas finitas não está justificada e correções quânticas (dinâmicas) podem ter importância. Em particular, as aproximações clássicas não apresentam qualquer dinâmica e assim questões concernentes à resposta dinâmica do sistema próximo à transição de fase não podem ser tratadas.

A presente Tese⁶ trata do estudo da dinâmica das transições de fase estruturais como uma interação de quarta ordem entre os campos de fonons macios na aproximação $1/n$, utilizando o formalismo de muitos corpos a temperaturas finitas. Estudaremos dois casos limites: tempe-

raturas de transição alta e nula que serão chamados de limites clássico e quântico respectivamente. Será calculado o coeficiente crítico da função correlação η e o coeficiente crítico dinâmico z .

Assim, no primeiro capítulo algumas questões genéricas, como a caracterização das transições de fase estruturais e definições de coeficientes críticos serão revisadas e acomodadas ao espírito da Tese. No segundo capítulo descreveremos o hamiltoniano empregado e suas limitações, bem como a aproximação utilizada (a aproximação $1/n$). O elo elementar da cadeia de gráficos de Feynman será calculado no capítulo III nos limites mencionados. No capítulo IV calcularemos as contribuições dinâmicas ao coeficiente crítico η . O capítulo V está reservado à dinâmica do sistema, calculando-se na primeira secção a auto-energia clássica pelas relações de dispersão; na segunda secção estudamos o comportamento crítico dinâmico no limite quântico. Um pequeno apêndice trata da contribuição de um polo para o elo elementar na expressão da auto-energia clássica.

I - CONSIDERAÇÕES GERAIS

Um sistema macroscópico formado por um grande número de partículas pode estar em diversos estados de equilíbrio. Estes estados de equilíbrio, ou fases, são descritos termodinamicamente por algumas variáveis de estado que determinam as diferentes funções termodinâmicas, bem como as demais variáveis de estado⁷. As funções termodinâmicas devem ser funções analíticas das variáveis de estado; singularidades, se ocorrerem, devem-se a mudanças de estrutura do sistema ou transições de fase. A caracterização precisa destas singularidades é o problema fundamental da teoria das transições de fase.

A temperatura é, quase sempre, uma variável de estado fundamental nas transições de fase, no sentido de que acima de uma dada temperatura T_c (temperatura crítica), o sistema está em um estado de simetria diferente - em geral mais alto - do que para temperaturas abaixo de T_c . Existe assim uma quebra de simetria. Desta forma é útil lançar mão do conceito de parâmetro de ordem ψ . Este é definido tal que seja nulo para $T > T_c$ e diferente de zero para $T < T_c$. Se $\psi \rightarrow 0$ continuamente para $T \rightarrow T_c^-$, estamos frente a uma transição de fase de segunda ordem; caso ψ assuma valores diferentes para $T \rightarrow T_c^-$ e $T \rightarrow T_c^+$ (descontínuo em T_c) a transição de fase é de primeira ordem.

Normalmente a variação de ψ com a temperatura é da forma

$$\psi \propto \tau^\beta, \quad T < T_c \quad \text{e} \quad \beta > 0$$

com

$$\tau \equiv |T - T_c|/T_c; \quad (1.1)$$

β é um coeficiente crítico, o coeficiente crítico do parâmetro de ordem. Os coeficientes críticos são definidos pela relação entre duas variáveis termodinâmicas, quando as demais permanecem constantes. Se V for um campo externo que se acopla com o parâmetro de ordem, pode-se definir os coeficientes críticos da susceptibilidade generalizada χ :

$$\chi \equiv \left. \frac{\partial \psi}{\partial V} \right|_{V=0} \propto \begin{cases} \tau^{-\gamma'} & , T < T_c \\ \tau^{-\gamma} & , T > T_c \end{cases} \quad (1.2)$$

em que

$$\gamma, \gamma' > 0,$$

pois a susceptibilidade diverge na temperatura de transição.

Microscopicamente falando, a distância r até a qual uma variação local do parâmetro de ordem pode manifestar-se é o que se chama comprimento de correlação. Admite-se que a função correlação possua a forma

$$\exp [-r/\xi(T)]/r^{d-2+\eta} \quad (1.3)$$

onde ξ é o comprimento de correlação, d é a dimensionalidade do sistema e η é o coeficiente crítico da função correlação $G(r, t=0)$ do par de operadores associados a ψ .

A região crítica de uma transição de fase é aquela em que ξ é de dimensões macroscópicas; em T_c , numa transição de segunda ordem, é infinita. Assim

$$\xi \propto \begin{cases} \tau^{-\nu'} & , T > T_c \\ \tau^{-\nu} & , T < T_c \end{cases}$$

sendo

$$\nu, \nu' > 0$$

a. Universalidade e "Scaling"

Nos anos 60 algumas desigualdades foram previstas teoricamente entre os coeficientes críticos⁷. Fisher, por exemplo, estabeleceu que se a função correlação é uma função monotônica da temperatura e positivamente definida, então

$$(2 - \eta)\nu \geq \gamma. \quad (1.4)$$

No entanto, a comparação com resultados experimentais revelou que as desigualdades eram satisfeitas muito próximo a igualdades ou mesmo satisfeitas como igualdades.

As teorias do campo molecular médio também satisfazem as igualdades; por exemplo, a teoria de Landau dá $\nu = 1/2$, $\gamma = 1$ e $\eta = 0$; mas os coeficientes críticos

diferem bastante dos valores experimentais, pois não levam em conta flutuações microscópicas. Modelos mais sofisticados, que podem ser resolvidos exata ou aproximadamente, levam a melhores concordâncias com os resultados experimentais e ainda continuam a satisfazer as relações de igualdade entre os coeficientes críticos. O fato a ser notado é que tais igualdades apareciam como por acidente.

Nos anos 60, também se tinha idéia de que, na região crítica, a termodinâmica das transições de fase poderia ser caracterizada pelo comportamento coletivo de certos modos normais, em que a forma específica da interação entre os mesmos teria uma importância secundária. Tal fenômeno é o que se chama universalidade das transições de fase. A universalidade é, sem dúvida, válida para sistemas com a mesma dimensionalidade d e as interações com a mesma simetria ou graus de liberdade.

Uma hipótese, "scaling" estático pode ser feita: a função de Gibbs é uma função homogênea generalizada das variáveis de estado τ , eq. (1.1) e de V , campo externo. Com esta hipótese, a dedução matemática das igualdades é simples, mas fisicamente não justificada. Um passo adiante para melhor justificativa foi efetuado por Kadanoff⁸. Seu argumento é que se o comprimento de correlação na região crítica é muito maior do que a distância interatômica a , então, numa região L_a , tal que $a \ll L_a \ll \xi$, a descrição do sistema é equivalente à de outro sistema de dimensões microscópicas L_a , desde que seja tomado um valor médio nesta região das variáveis microscópicas. Resumiremos

a seguir a formulação de Halperin e Hohenberg⁹, pois a mesma é mais indicada ao nosso caso - "scaling" dinâmico.

Divide-se a transformada de Fourier $G(q, \omega)$ da função correlação em três regiões: I, II e III. Em I ($T < T_c$) e III ($T > T_c$) as equações hidrodinâmicas são válidas. Hidrodinâmica¹⁰ significa que variáveis termodinâmicas, densidades de energia e momentum dos modos normais estão relacionados por leis de conservação e equações de movimento através de um sistema de equações diferenciais válido para comprimentos de onda grande e frequências baixas, ou seja, $q, \xi \ll 1$. A região II, região crítica, é aquela em que as equações hidrodinâmicas não são mais válidas, ou seja, $q, \xi \gg 1$.

A hipótese de Halperin e Hohenberg é que uma única função matemática descreve o comportamento de $G(q, \omega)$ nas três regiões, caracterizada por uma única variável $q\xi$. Com esta hipótese, as relações de "scaling" estático são satisfeitas, como a relação (1.4). Se $\omega_c(q)$ for a frequência característica do modo normal crítico, o "scaling" dinâmico diz que

$$\omega_c(q) = q^z g_1(q\xi) \quad (1.5a)$$

onde z é um coeficiente crítico dinâmico e $g_1(x)$ é uma função regular do argumento e finita no infinito. Segue também do "scaling" dinâmico que, na temperatura de transição, a função correlação dinâmica deve ter a forma

$$G(q, \omega) = G(k, 0) g_2(\omega/\omega_c) \quad (1.5b)$$

onde $G(k, 0)$ é a função correlação estática e $g_2(x)$ é também uma função regular do argumento, com $g_2(0) = 1$.

As relações (1.5) são satisfeitas para $q, \omega \rightarrow 0$; sendo assim, são válidas também nas regiões hidrodinâmicas I e III. Em termos das equações hidrodinâmicas z pode ser relacionado com outros coeficientes críticos (mesmo dinâmicos), mas obviamente deveremos tratar com mais detalhe a dinâmica do sistema. Caso o parâmetro de ordem ψ não obedeça a uma lei de conservação e esteja mergulhado em um banho térmico, o único coeficiente crítico dinâmico é z .

b. Transições de Fase Estruturais

Um cristal ferroelétrico é aquele que apresenta uma polarização elétrica espontânea em uma certa faixa de temperatura. Polarização espontânea significa que os dipolos elétricos elementares do cristal estão alinhados, mesmo na ausência de um campo elétrico externo. Acima de uma certa temperatura T_c a polarização espontânea desaparece; o cristal efetuou uma transição de fase. Esta nova fase é a fase paraelétrica. Estas fases são análogas às fases magnéticas. Assim, um cristal antiferroelétrico é aquele em que a orientação dos dipolos elementares muda de sentido de uma célula unitária à seguinte. A completa orienta-

ção existe, é óbvio, somente a 0°K .

Até hoje a perfeita classificação dos cristais ferroelétricos é um problema aberto². Para nossa análise, no entanto, podemos dividi-los em dois tipos: ordem-desordem e deslocamento. Nos ferroelétricos tipo ordem-desordem, certos íons podem possuir duas ou mais posições favoráveis de equilíbrio, formando assim um dipolo elétrico reversível com duas ou mais orientações; por exemplo, KH_2PO_4 . Já nos ferroelétricos tipo deslocamento as forças repulsivas de curto alcance podem igualar-se às forças atrativas coulombianas de longo alcance que atuam em certos íons, resultando um deslocamento destes e o aparecimento de dipolos elétricos, por exemplo BaTiO_3 . Como nas transições de fase de cristais ferroelétricos tipo deslocamento ocorre uma mudança da estrutura da rede cristalina, recebem também o nome de transições de fase estruturais. Os cristais antiferroelétricos pertencem ao tipo deslocamento; por exemplo, LaAlO_3 .

Um cristal é estável frente a pequenas deformações se as frequências de seus modos normais forem reais. No entanto, a rede cristalina se torna instável se a frequência de um (ou mais) modo normal for imaginária, na aproximação harmônica. As interações não-harmônicas podem estabilizar a rede para temperaturas acima de uma temperatura T_c . Desta maneira, em T_c o cristal efetuará uma transição de fase pela presença deste modo normal cuja frequência varia com a temperatura, chegando eventualmente a anular-se em T_c . Neste caso as forças restauradoras deste modo normal anulam-se e os íons mudam-se para novas posi-

ções de equilíbrio determinadas pela simetria do mesmo . Esta é a teoria de modo normal macio ou fonon macio ("soft phonon"). estabelecida independentemente por W.Cochran e P.W.Anderson em 1960¹¹.

O conceito de fonon macio unifica a teoria das transições de fase estruturais. Assim, se o vetor de onda do fonon macio for nulo ter-se-á uma transição ferroelétrica e se a instabilidade do fonon ocorrer na superfície da Zona de Brillouin a transição será antiferroelétrica . Pensa-se que o parâmetro de ordem das transições estruturais é o valor médio da coordenada normal do fonon macio.

As transições de fase estruturais apresentam, na região crítica, desvios dos valores dos coeficientes críticos dados por teorias do campo molecular médio. Medidas recentes por espalhamento de neutrons¹² e ressonância paramagnética eletrônica (EPR)¹² mostraram que junto aos picos do fonon macio surge também um pico central ($\omega=0$) cuja intensidade diverge ao aproximar-se a temperatura de transição T_c pela fase paraelétrica.

Das transições de fase estruturais a mais estudada teoricamente na região crítica é, certamente, SrTiO_3 com $T_c \sim 107^\circ\text{K}$, que possui uma instabilidade no ponto R da Zona de Brillouin. Diversos modelos microscópicos de interação com o fonon macio têm sido propostos para explicar a sua transição de fase e o pico central. Esta interação é sempre de quarta ordem. Assim, um mecanismo estudado é a interação com dois fonons acústicos, cujas frequências podem ser degeneradas¹³ ou não¹⁴. Outro mecanismo

possível é que o fonon macio esteja ligado hidrodinamicamente a variações locais de temperatura descritas por modos térmicos¹⁵. Uma terceira possibilidade é a interação do fonon macio com uma ressonância com tempo de relaxação finita formada por um par de fonons¹⁶.

Acreditamos que os modelos acima descritos sejam os mais significativos. Infelizmente, nestes modelos os coeficientes críticos não são calculados, ou são utilizados como parâmetros. Quando calculados, chega-se aos resultados do campo molecular médio. Os trabalhos aqui citados são alvo de críticas, mesmo por parte dos autores, pois recentemente até se pensa que o pico central pode ser devido à presença de impurezas¹⁷ ou então de aglomerados que têm o comportamento de uma excitação coletiva¹⁸. Exceção é feita a um trabalho de 1969¹⁹ na aproximação auto-consistente de fonons que mostra desvio de teoria do campo molecular, mas onde o pico central não é previsto.

Existem situações em que a origem do pico central se faz mais natural, a saber, onde é possível o acoplamento do fonon macio com uma quantidade conservada, como a energia²⁰. Este não é o presente caso por razões de simetria. Simetricamente possível, no entanto, é o decaimento do fonon macio em um fonon na superfície da zona de Brillouin e um fonon acústico ou então um acoplamento em que somente quatro fonons macios são envolvidos*.

* Este último enfoque foi o começo do presente trabalho.

Transições de fase estruturais de segunda ordem a baixíssimas temperaturas são também dignas de estudo pois efeitos quânticos são dominantes, como as soluções sólidas de G_eT_e e S_nT_e com T_c variando entre $\sim 700^\circ K$ a $\sim 0^\circ K$, respectivamente²¹ e a peroviskita KT_aO_3 ($T_c \sim 10^\circ K$)²². Tais transições foram estudadas com teoria de campos auto-consistentes na aproximação "parquet"²³ e após estendidas levando em conta a anisotropia da interação e efeitos de impureza²⁴. Tais trabalhos não estudaram, entretanto, a dependência de q e ω do propagador do fonon macio, isto é, propriedades do "scaling" estático e dinâmico; contudo desvios do coeficiente crítico η aparecem claramente.

II - O MODELO E A APROXIMAÇÃO

Na primeira secção deste capítulo proporemos o modelo teórico para o estudo das transições de fase estruturais (displacivas) de segunda ordem mediadas por um campo de fonons de n componentes do tipo $g_0 \phi^4$, bem como algumas críticas. Na segunda secção, descreveremos a aproximação $1/n$ no contexto geral das aproximações utilizadas e escreveremos a expressão matemática da auto-energia.

a. O Modelo Teórico

No nosso trabalho essencialmente estaremos interessados nos fenômenos críticos estáticos e dinâmicos de uma interação anarmônica de uma rede cristalina simulando uma transição de fase do tipo estrutural. Atacaremos a dinâmica do sistema utilizando-nos do formalismo da teoria quântica de campos a temperaturas finitas aplicado a fonons²⁵. O hamiltoniano que utilizaremos pode ser escrito na forma

$$\begin{aligned} \Pi = & \sum_{\alpha, q} \frac{1}{2} \left[\dot{Q}_{\alpha}(q) \dot{Q}_{\alpha}(-q) + (\omega_q^0)^2 Q_{\alpha}(q) Q_{\alpha}(-q) \right] \\ & + \frac{g_0}{4!} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ q}} Q_{\alpha}(q_1) Q_{\alpha}(q_2) Q_{\beta}(q_3) Q_{\beta}(-q_1 - q_2 - q_3), \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde os somatórios estendem-se às n componentes do campo e a interação anarmônica é uma interação isotrópica do tipo $g_0 \phi^4$, g_0 é o vértice nú e

$$(\omega_q^0)^2 = m_0^2 + q^2 \quad (2.2)$$

o quadrado da frequência dos fonons óticos; m_0 é, na linguagem de teoria de campos, a massa nua dos fonons e que depende linearmente da temperatura. Ainda $\dot{Q} \equiv \frac{\partial Q}{\partial t}$, onde Q são as coordenadas normais do sistema, que obedecem à relação de comutação $[\dot{Q}_\alpha(q, t), Q_\alpha(q', t)] = (\hbar/i) \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{q, -q'}$.

O propagador e o parâmetro de ordem são dados respectivamente como

$$G_\alpha(q, t) = \langle Q_\alpha(q, t) Q_\alpha(-q, 0) \rangle \quad (1.3)$$

e

$$\psi = \langle Q \rangle$$

em que as médias são efetuadas sobre o ensemble apropriado.

O presente enfoque difere num ponto essencial da condensação de bosons, pois o propagador não perturbado dos fonons

$$G^0(q, \omega_n) = (-\omega_n^2 + m_0^2 + q^2)^{-1}, \quad (2.4)$$

onde foi eliminado o índice α por conveniência, tem uma dependência da frequência diferente do caso de bosons, em que

$$D^0(q, \omega_n) = (\omega_n - m_0^2 - q^2)^{-1} \quad (2.5)$$

com $\omega_n = 2\pi n/\lambda$ e m_0^2 é a massa nua no caso de fonons, e potencial químico nũ no caso de bosons. A diferença entre (2.4) e (2.5) requer, como será apresentado, uma computação totalmente nova de todos os gráficos relevantes.

A seguir, estudaremos o problema no limite para altas e baixas temperaturas de transição, isto é $T_c \rightarrow \infty$ e $T_c \rightarrow 0$, respectivamente. Estes limites devem ser entendidos no sentido de que a temperatura de transição, que é dada por uma função complicada de m_0 e g_0 varia para um conjunto de sistemas, de baixas para altas temperaturas. A seguir chamaremos $T_c \rightarrow 0$ e $T_c \rightarrow \infty$ os limites quântico e clássico da teoria. Na ausência de dinâmica, $\omega_n \rightarrow 0$ e é normalmente conhecido como limite clássico; para evitar confusões de nomenclatura, chamaremos este caso de limite estático.

O tratamento teórico das transições de fase estruturais tendo como modelo o hamiltoniano (2.1) é certamente um enfoque idealizado em dois aspectos. Primeiro, a anisotropia do problema que está sempre presente não foi levada em conta. O modelo pode, entretanto, ser generalizado neste sentido²⁶. A segunda e mais séria idealização é o fato de que o hamiltoniano (2.1) não se acopla com o sistema de fonons acústicos. Jouvett e Holz⁶ consideraram que no tratamento clássico do problema tal acoplamento produzirá divergências mais fracas nos propagadores dos fonons óticos. Em outras palavras, nosso sistema está a-

usente de qualquer hidrodinâmica.

Para qualquer tratamento termodinâmico, o ponto inicial é sempre a função partição²⁵

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta H}$$

onde $\beta = 1/k_B T$. É conveniente trabalharmos na representação de interação e escrever a função partição na forma

$$Z = \text{Tr } \exp \left\{ -\beta \frac{1}{2} \sum_{\ell, \alpha} \int_{\mathbf{q}} (-\omega_{\ell}^2 + m_0^2 + \mathbf{q}^2) Q_{\alpha}(\mathbf{q}, \omega_{\ell}) Q_{\alpha}(-\mathbf{q}, \omega_{\ell}) \right.$$

$$\left. - \frac{g_0}{4!} \sum_{\substack{\ell, \mathbf{q} \\ \alpha, \beta}} \int_{\mathbf{q}_1} \int_{\mathbf{q}_2} \int_{\mathbf{q}_3} Q_{\alpha}(\mathbf{q}_1, \omega_{\ell_1}) Q_{\alpha}(\mathbf{q}_2, \omega_{\ell_2}) \right.$$

$$\left. * Q_{\beta}(\mathbf{q}_3, \omega_{\ell_3}) Q_{\beta}(-\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_3, -\omega_{\ell_1} - \omega_{\ell_2} - \omega_{\ell_3}) \right\}$$

onde $\{\ell, \mathbf{q}, \alpha, \beta\}$ representa a soma sobre todas as variáveis indicadas e

$$\int_{\mathbf{q}} \equiv (2\pi)^{-d} \int d^d \mathbf{q}.$$

Por questão de conveniência, os momenta e frequências, bem como os operadores, serão normalizados como segue:

$$\begin{aligned}
m_0 \hbar\beta &\rightarrow m'_0, \\
q \hbar\beta &\rightarrow q', \\
\omega_q^0 \hbar\beta &\rightarrow \omega_{q'}^0, \\
\omega_n \hbar\beta &\rightarrow \omega'_n = 2\pi i n, \\
\frac{\beta}{(\hbar\beta)^{d+2}} Q^2 &\rightarrow Q'^2
\end{aligned}
\tag{2.6}$$

Com as novas variáveis, onde as linhas foram suprimidas, obtemos para Z

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Tr} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\ell, \alpha} \int_{\mathbb{Q}} (-\omega_\ell^2 + m_0^2 + q^2) Q_\alpha(q, \omega_\ell) Q_\alpha(-q, -\omega_\ell) \right. \\
&- \frac{1}{4!} g'_0 \sum_{\substack{\ell, q \\ \alpha, \beta}} \int_{\mathbb{Q}_1} \int_{\mathbb{Q}_2} \int_{\mathbb{Q}_3} Q_\alpha(q_1, \omega_{\ell_1}) Q_\alpha(q_2, \omega_{\ell_2}) \\
&\left. * Q_\beta(q_3, \omega_{\ell_3}) Q_\beta(-q_1 - q_2 - q_3, -\omega_{\ell_1} - \omega_{\ell_2} - \omega_{\ell_3}) \right\}
\end{aligned}
\tag{2.7}$$

$$* Q_\beta(q_3, \omega_{\ell_3}) Q_\beta(-q_1 - q_2 - q_3, -\omega_{\ell_1} - \omega_{\ell_2} - \omega_{\ell_3})$$

onde o novo vértice n'_0 é

$$g'_0 = \frac{g_0}{\beta} (\hbar\beta)^{4-d}
\tag{2.8}$$

que é adimensional. Com a expressão (2.7) para a função partição, todas as regras de cálculo de gráficos de Feynman podem ser aplicadas tomando $\hbar = 1$ e $\beta = 1$. A fim de expressar os resultados finais em termos das variáveis originais basta usar (2.6) no sentido inverso. Por exemplo, para obter a dependência em ω do propagador retardado original usa-se

$$\omega' \rightarrow \omega' + i0^+ = \omega_{\text{KB}} + i0^+.$$

Além das quantidades estabelecidas acima, deve-se também normalizar o momentum de corte Λ que surge nas integrações e que é da ordem de $1/a$, onde a é uma distância interatômica. Assim

$$\Lambda_{\text{KB}} \rightarrow \Lambda' \quad (2.9)$$

Em função de Λ' , os limites para altas e baixas temperaturas corresponderão a

$$\Lambda' \rightarrow \infty, \text{ para } T_c \rightarrow 0 \quad (2.10a)$$

$$\Lambda' \rightarrow 0, \text{ para } T_c \rightarrow \infty \quad (2.10b)$$

É interessante notar que Λ' pode (grosseiramente) ser equiparado a $\omega_D/k_B T$, onde ω_D é a frequência de Debye. Este fato não é óbvio, e resulta de que usamos momentos na dimensão de (segundo)⁻¹, isto é, incluímos os fatores usuais de velocidade em q e Q . Com esta última interpretação podemos ver que o limite clássico não é inteiramente alcançado, porque Λ' deve ser da ordem de 1 ou mesmo 1/5, caso contrário o cristal funde. Quando T_c for da ordem de um décimo da temperatura de Debye, $\Lambda' \sim 10$ e assim justifica o limite (2.10b) muito bem. É também possível que os dois limites de (2.10) podem originar comportamentos críticos diferentes, o que implicaria que os coe

ficientes críticos mostrem uma dependência da temperatura de transição.

É possível também normalizar o hamiltoniano com o momentum de corte Λ em vez de $k\beta$. Assim

$$\Lambda' = \Lambda, \quad m'_0 = m_0/\Lambda, \quad \omega'_n = 2\pi i n / k\beta \Lambda, \quad g'_0 = (g_0/\beta) \Lambda^{d-4} \quad (2.11)$$

e expressão semelhante para os outros termos. Aqui g'_0 é também adimensional. Decorre de (2.11) que o limite clássico $\beta \rightarrow 0$ é

$$g'_0 \rightarrow \infty; \quad \omega'_n \rightarrow \pm i \infty, \quad \text{para } n \neq 0$$

Da mesma forma que na teoria de Wilson do modelo de Ising (secção seguinte), o acoplamento nú vai a infinito; entretanto a massa nua mantém-se negativa e finita, mas não se aproxima de $-\infty$ como no modelo de Ising, em que só $n = 0$ contribui para a soma das frequências. É claro, porém, que para se conseguir uma dependência temporal do problema o limite $\beta \rightarrow 0$ não pode ser efetuado antes que as somas nas frequências sejam calculadas.

O limite quântico é alcançado a $T_c = 0$, o que requer, entretanto, $m_0^2 = 0$; porque, caso contrário, a transição seria a $T > 0$ e estaríamos estudando o estado ordenado. Desta forma obtemos para $\beta \rightarrow \infty$

$$m'_0 = 0, \quad \omega'_n \rightarrow 0, \quad g'_0 \rightarrow 0$$

Neste caso o problema está já resolvido e obteríamos uma teoria livre. Nos capítulos seguintes veremos como podemos resolver tal situação.

b. A Aproximação $1/n$

Existem diversos níveis de sofisticação usando gráficos de Feynman para calcular a função partição e/ou coeficientes críticos. Uma característica central dos métodos é que a dimensão n do campo vetorial ϕ está completamente dissociada da dimensão d do espaço de coordenadas; n e d podem ser considerados como parâmetros arbitrários e independentes. É essencial que um deles seja tomado como parâmetro porque assim podemos fazer uma expansão perturbativa em d próximo a 4, a chamada expressão ϵ ($\epsilon = 4-d$) ou então para n grande, a chamada expansão $1/n$. Teoria de perturbação convencional em g_0 não é indicada, pois o comportamento crítico, como foi dito, independe de g_0 .

Efeitos dinâmicos na aproximação $1/n$ para condensação de bosons²⁷, têm recebido bastante atenção nos últimos anos, utilizando, é claro, propagadores da forma (2.5). Na expansão ϵ foi calculado recentemente no modelo de Landau-Ginsburg²⁸, um modelo semi-microscópico em que os campos são números c . O "scaling" estático, bem como o dinâmico são satisfeitos nestas aproximações, quando testados; existem, no entanto, algumas discrepâncias entre os valores encontrados pelos diversos autores.

É totalmente diversa, no entanto, a situação das transições de fase estruturais. Do nosso conhecimento, somente foi tratado o caso $n \rightarrow \infty$, o modelo esférico²⁹. Os coeficientes críticos estáticos encontrados são os deste modelo. Não foi calculado o coeficiente crítico dinâmico.

A expansão ϵ , formulada brilhantemente por K. Wilson³⁰, utiliza as idéias de Kadamoff (página 6) e procura pontos fixos do hamiltoniano H^* . Este é definido a partir de transformações do chamado grupo de renormalização R:

$$H_1 = R(H), H_2 = R(H_1), \dots, H_j = R(H_{j-1}), \dots$$

até que

$$H^* = R(H^*) \quad (2.12)$$

onde H é definido em (2.1), em que $\dot{Q} = 0$. Uma solução é $g^* = 0$, ponto fixo gaussiano. Outra solução possível é $g^* \neq 0$, mas como a aproximação g_j para g^* é lenta, Wilson tomou um valor g_0 , de ordem ϵ , em que a convergência é rápida e todos os termos necessários para o cálculo dos coeficientes críticos exponenciam-se, como deve ser. Na expansão ϵ , o "scaling" estático é plenamente realizado, obtendo os coeficientes críticos do modelo de Ising bi- e tri-dimensional. O hamiltoniano H não necessita ser obrigatoriamente (2.1): podem ocorrer, por exemplo, termos

de acoplamento anisotrópico³¹ Δ ; no entanto, $\Delta^* = 0$. Δ é, assim, chamada uma variável irrelevante.

A expansão $1/n$ ³² é complementar à expansão ϵ , no sentido de que ϵ não necessita ser pequeno. A idéia básica é que, se n é grande e g_0 da ordem $1/n$, então um pequeno número de gráficos de Feynman predominará sobre os demais numa mesma ordem, podendo assim os coeficientes críticos ser expandidos em uma série em $1/n$. Para ilustração, consideremos a contribuição de terceira ordem para o vértice e que é representada na fig. 1.

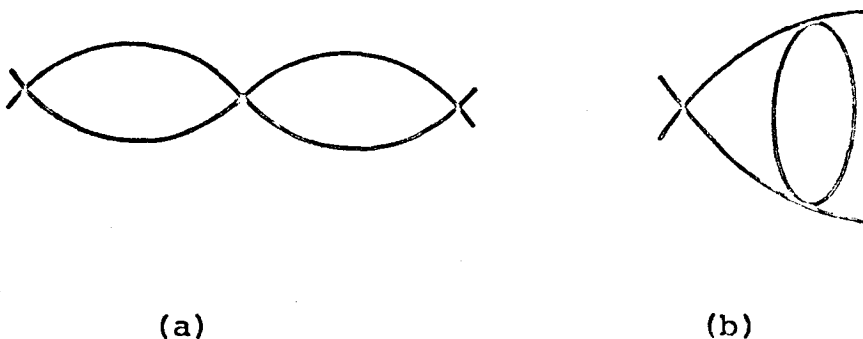


Fig. 1 - Contribuição de terceira ordem para o vértice.

No entanto, para n grande o fator peso do gráfico (a) é de ordem n^2 , enquanto o gráfico (b) é de ordem n ; pois em (a) a soma nas componentes α do campo Ω são independentes, o que não acontece em (b).

Para calcular os gráficos dominantes na aproximação $1/n$, podemos, por conveniência, fazer uma renormalização de massa e reescrever o hamiltoniano (2.1) em uma

parte livre

$$H_0 = \sum_{\alpha, q} \frac{1}{2} [\dot{Q}_\alpha(q) \dot{Q}_\alpha(-q) + (m^2 + q^2) Q_\alpha(q) Q_\alpha(-q)], \quad (2.12a)$$

e uma perturbação

$$H_1 = \frac{g_0}{4!} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ q}} Q_\alpha(q_1) Q_\alpha(q_2) Q_\beta(q_3) Q_\beta(-q_1 - q_2 - q_3) \quad (2.12b)$$

$$+ \sum_{\alpha, q} \frac{1}{2} (m_0^2 - m^2) Q_\alpha(q) Q_\alpha(-q)$$

Em princípio podemos escolher m^2 à vontade, desde que tomemos os contratermos de massa em (2.12b). Uma escolha particularmente apropriada é definir m^2 como o inverso de (1.2), ou então relacioná-la com a função correlação (2.3) como

$$m^2 = G^{-1}(q=0, \omega=0) \quad (2.13)$$

possuindo assim um significado físico. Com a escolha (2.13) os contratermos são considerados desde que subtraímos da auto-energia seu valor a momentum e frequência nulos, pois o propagador vestido,

$$G^{-1}(q, \omega_n) = -\omega_n^2 + \omega_q^2 - \Sigma(q, \omega_n, m^2),$$

em função de (2.13) implica que $\Sigma(0, 0, m^2) = 0$. Desta forma podemos reescrever G como

$$G^{-1}(q, \omega_n) = -\omega_n^2 + \omega_q^2 - [\Sigma(q, \omega_n, m^2) - \Sigma(0, 0, m^2)] \quad (2.14)$$

O propagador nũ (2.4) fica, então,

$$G^2(q, \omega_n) = (-\omega_n^2 + \omega_q^2)^{-1},$$

onde, é claro,

$$\omega_q^2 = m^2 + q^2 \quad (2.15)$$

Os termos dominantes para a auto-energia serão os correspondentes aos gráficos da fig. 2. Como se vê, a auto-energia é dada por uma soma de diagramas em elo, com exceção do primeiro, daí também ser chamada aproximação "cadeia".



Fig. 2 - Gráficos de Feynman para a auto-energia na aproximação cadeia.

Na aproximação cadeia, decorrente da aproximação $1/n$, os gráficos somam-se em uma série geométrica em termos do elo elementar, conforme fig. 3.

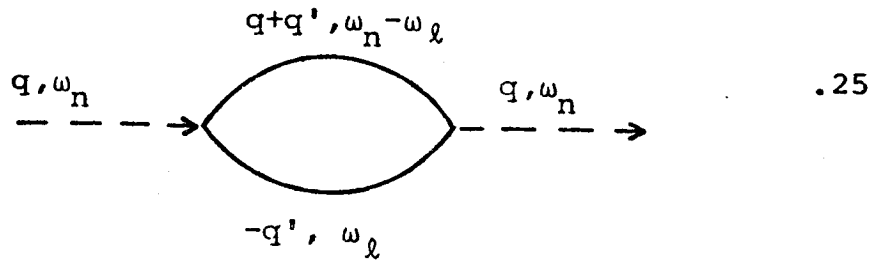


Fig. 3 - Gráfico de Feynman do elo elementar.

O elo elementar transferindo momentum e energia q, ω_n terá, utilizando-se as regras usuais de cálculo de gráficos, a expressão

$$I(q, \omega_n, m^2) = \int_{\ell} \frac{1}{m^2 + (q+q')^2 - (\omega_n - \omega_\ell)^2} \cdot \frac{1}{m^2 + q'^2 - \omega_\ell^2} \quad (2.16)$$

A partir da expressão matemática do elo elementar podemos escrever a auto-energia como:

$$\begin{aligned} \Sigma(q, \omega_n, m^2) &= m^2 - m_0^2 - \frac{n+2}{6} g_0' \int_{\ell} \frac{1}{m^2 + q'^2 - \omega_\ell^2} \\ &+ \frac{n+8}{18} g_0'^2 \int_{\ell} \frac{I(q', \omega_\ell, m^2)}{1 + \frac{n+8}{6} g_0' I(q', \omega_\ell, m^2)} \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$* \frac{1}{m^2 + (q+q')^2 - (\omega_n - \omega_\ell)^2}$$

e utilizando (2.14) e a expressão acima, os coeficientes críticos em T_c são obtidos a partir de

$$\Delta \Sigma(q, \omega_n, 0) = \frac{n+2}{18} g_0' \int_{\ell} \frac{I(q', \omega_\ell, 0)}{1 + \frac{n+8}{6} g_0' I(q', \omega_\ell, 0)} \quad (2.18)$$

$$* \left[\frac{1}{(q+q')^2 - (\omega_n - \omega_\ell)^2} - \frac{1}{q'^2 - \omega_\ell^2} \right]$$

Nos capítulos seguintes estaremos calculando as expressões (2.16) e (2.18) e, a partir das mesmas, coeficientes críticos

III - CÁLCULO DO ELO ELEMENTAR

O cálculo do elo elementar $I(q, \omega_n, m^2)$, definido em (2.16), é bastante difícil, se não impossível, de ser efetuado exatamente. Assim, neste capítulo, $I(q, \omega_n, m^2)$ será calculado nos limites clássico e quântico. No limite clássico, o cálculo para $T = T_c$, ou seja, $m^2 = 0$, exige algumas aproximações que, acreditamos, estão plenamente justificadas. Já para temperaturas acima da temperatura de transição ($m^2 \neq 0$), as dificuldades de cálculo são enormes e as aproximações tão drásticas que não confiamos nos resultados, não sendo portanto apresentados. A seguir, calcularemos o elo elementar utilizando-nos dos parâmetros de Feynman, integrais de contorno e propriedades das funções hipergeométricas.

Se utilizamos a fórmula de Feynman

$$\frac{1}{A B} = \int_0^1 d\alpha_1 \int_0^1 d\alpha_2 \delta(1-\alpha_1-\alpha_2) [\alpha_1^A \alpha_2^B]^{-2}$$

podemos escrever o elo elementar (2.16) na forma

$$I(q, \omega_n, m^2) = \int_{\ell} \int_{q'} \int_0^1 d\alpha_1 \int_0^1 d\alpha_2 \delta(1-\alpha_1-\alpha_2) \quad (3.1)$$

$$* \{ \alpha_1 (-\omega_{\ell}^2 + \omega_{q'}^2) + \alpha_2 [-(\omega_n - \omega_{\ell})^2 + \omega_{q+q'}^2] \}^{-2}$$

onde, conforme (2.15)

$$\omega_{q+q'}^2 = m^2 + (q + q')^2$$

Note-se que $(q+q')$ é uma "soma vetorial" num espaço de d dimensões. Substituindo

$$q' \rightarrow q' + p$$

com (3.2)

$$p = - \frac{\alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2} q$$

obtemos para o denominador D^2 de (3.1)

$$D^2 = \{m^2 + q'^2 + \alpha_1 \alpha_2 q^2 - \alpha_1 \omega_\ell^2 - \alpha_2 (\omega_n - \omega_\ell)^2\}^2$$

Lançando mão das integrais³⁰

$$(2\pi)^{-d} \int_{\mathbf{q}} f(\mathbf{q}) = K_d \int_0^\Lambda q^{d-1} f(q) dq,$$

$$(2\pi)^{-d} \int_{\mathbf{q}} f(q^2, \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}') = (2\pi)^{-1} K_{d-1} \int_0^\pi \text{sen}^{d-2} \theta d\theta \quad (3.3)$$

$$* \int_0^\Lambda q^{d-1} f(q^2, \mathbf{q} \cdot \mathbf{q}') dq,$$

onde

$$K_d \equiv 2^{-(d-1)} \pi^{-d/2} \left[\Gamma(d/2) \right]^{-1}; \quad (3.4)$$

a integração angular em (3.1) é imediata e obtemos

$$I(q, \omega_n, m^2) = 2^{-(d-1)} \pi^{-d/2} \Gamma^{-1}(d/2) \sum_{\ell} \int dq' q'^{d-1} \quad (3.5)$$

$$* \int_0^1 d\alpha_1 \int_0^1 d\alpha_2 \frac{\delta^{(1-\alpha_1-\alpha_2)}}{D^2}$$

Evidentemente $D > 0$ para ω_n e ω_ℓ assumindo valores ao longo do eixo imaginário, e $q^2 > -4m^2$. Para $\omega_n = \omega_\ell = 0$, o extremo de D ocorre para $\alpha_1 = \alpha_2 = 1/2$.

A integração em q' em (3.5) pode ser feita utilizando a integral³³

$$\int_0^u \frac{x^{b-1}}{(1+\beta x)^a} dx = \frac{u^b}{b} F(a, b, 1+b; -\beta u) \quad (3.6)$$

$$\arg(1+\beta u) < \pi, \operatorname{Re} u > 0.$$

$F(a, b; c; z)$ é a função hipergeométrica; esta é definida para $|z| < 1$ e apresenta um ramo de corte no eixo real, estendendo-se de $z = 1$ até infinito. A fim de separarmos um polo simples do ramo de corte no plano complexo de ω_ℓ fizemos antes uma integração parcial obtendo

$$I(q, \omega_n, m^2) = 2^{-(d-1)} \pi^{-d/2} \Gamma^{-1}(d/2) \sum_{\ell} \int_0^1 d\alpha_1 \int_0^1 d\alpha_2 \delta(1-\alpha_1-\alpha_2) \quad (3.7)$$

$$* \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\Lambda^{d-2}}{A^2 + \Lambda^2} + \frac{1}{2} \frac{(\Lambda^2)^{d/2-1}}{\Lambda^2} F(1, d/2-1, d/2; -\Lambda^2/A^2) \right\}$$

onde

$$A^2 = m^2 + \alpha_2(1-\alpha_2) q^2 - \alpha_1 \omega_\ell^2 - \alpha_2 (\omega_n - \omega_\ell)^2.$$

Para efetuar a soma em ω_ℓ usaremos o procedimento comum de integração de contorno. O plano de Riemann do integrando (3.7) está esquematizado na fig. 4. Os ramos de corte são devidos à função hipergeométrica e os polos

simples são devidos à primeira parcela de (3.7). A integração é efetuada deformando-se o contorno de C para C' .

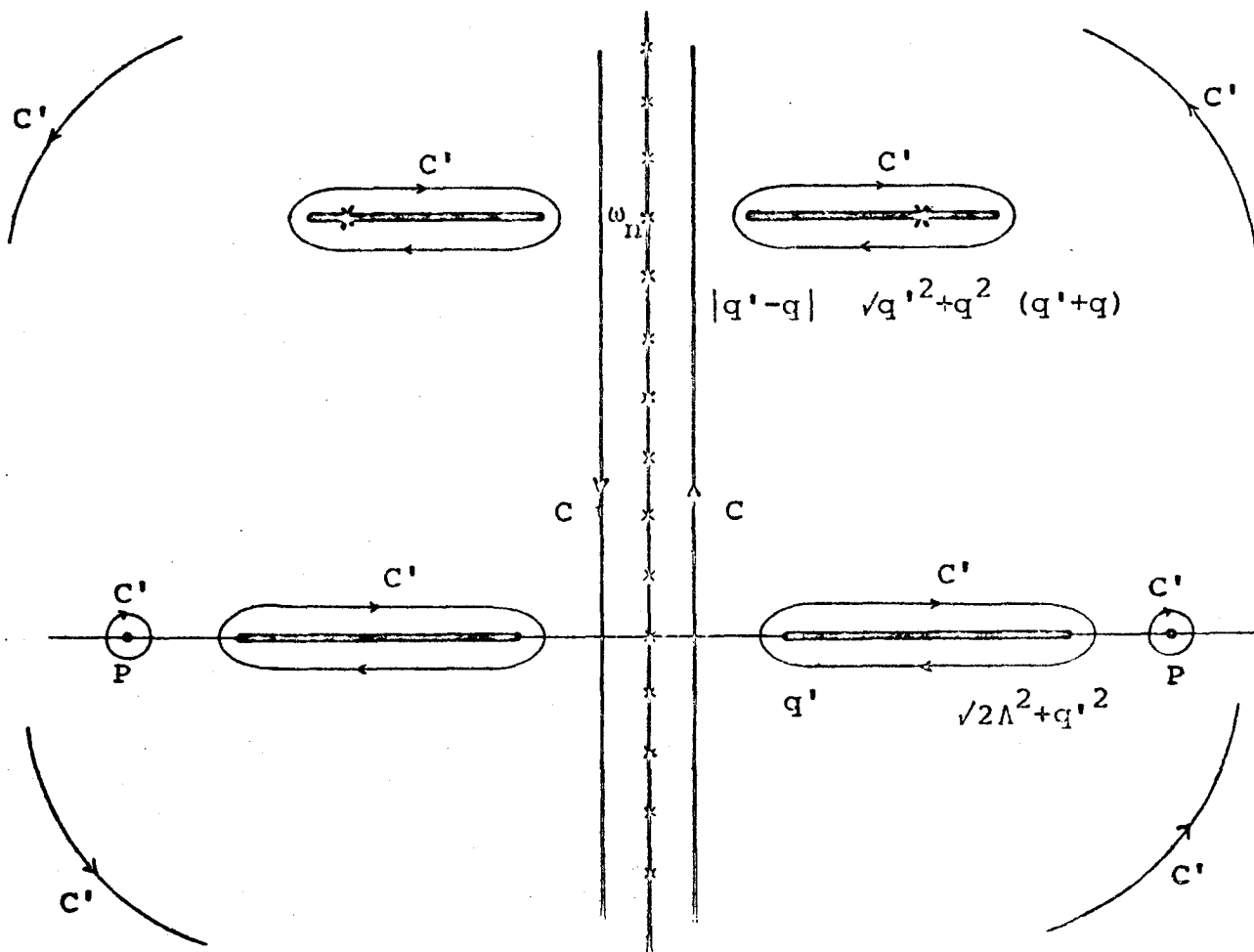


Fig. 4 - Plano de Riemann para a integração do elo em ω_g .

Com a expressão da continuação analítica para funções hipergeométricas³³

$$\begin{aligned}
 F(a,b,c;z) = & \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} F(a,a+1-c, a+1-b; 1/z) \\
 & + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b} F(b,b+1-c, b+1-a; 1/z)
 \end{aligned}
 \tag{3.8}$$

onde

$$a - b \neq \text{inteiro}$$

e

$$|\arg(-z)| < \pi;$$

verificamos que a integral ao longo do grande círculo anula-se, pois $F(a,b,c;0) = 1$. Além disso, $F(1,d/2-1;d/2;z)$ converge em todo o círculo unitário com exceção do ponto $z = 1$. Nas proximidades deste ponto, o termo dominante desta função é³⁴

$$F(1,d/2-1, d/2;z) \sim -\log(1-z); \quad |\arg(1-z)| < \pi$$

e, assim, esta singularidade não contribui para a integração. Desta maneira, utilizando as regras usuais para integrações no plano complexo para formalismo dependente da temperatura²⁵, a contribuição dos polos é

$$I_{\text{polo}}(q^2, \omega_n, m^2) = 2^{-(d-1)} \pi^{-d/2} \Gamma^{-1}(d/2) \Lambda^{d-2} \quad (3.9)$$

$$* \int_0^1 d\alpha_2 \{ N^0(\alpha_2 \omega_n - \sqrt{\Lambda^2 + B^2}) - N^0(\alpha_2 \omega_n + \sqrt{\Lambda^2 + B^2}) (\Lambda^2 + B^2)^{-1/2},$$

onde

$$N^0(x) = (e^x - 1)^{-1} \quad (3.10)$$

é a distribuição de Bose-Einstein e

$$B^2 = m^2 + (1 - \alpha_2) \alpha_2 (q^2 - \omega_n^2). \quad (3.11)$$

A contribuição para os ramos de corte é

$$I_{\text{corte}}(q, \omega_n, m^2) = 2^{-d} \pi^{-d/2} \Gamma^{-1}(d/2) \Lambda^{d-2} \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 d\alpha_2$$

$$* \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dx N^0(x + \alpha_2 \omega_n) \left\{ \frac{F(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; -\frac{\Lambda^2}{B^2 - (x + i0^+)^2})}{B^2 - (x + i0^+)^2} \right. \right.$$

$$\left. - \frac{F(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; -\frac{\Lambda^2}{B^2 - (x - i0^+)^2})}{B^2 - (x - i0^+)^2} \right\} \theta(x^2 - B^2) \theta(B^2 + \Lambda^2 - x^2) \quad (3.12)$$

Na verdade, as funções de Heaviside são redundantes, pois a diferença entre as funções hipergeométricas somente é diferente de zero no intervalo especificado por aquelas. Para calcularmos (3.12) devemos utilizar (3.8) e assim

$$\begin{aligned}
F(1, d/2-1, d/2; z) &= \frac{\Gamma(d/2)\Gamma(d/2-1)}{\Gamma^2(d/2-1)} (-z)^{-1} F(1, 2-2/d, 1-d/2; 1/z) \\
&+ \Gamma(d/2)\Gamma(2-d/2) (-z)^{1-d/2} F(d/2, 0, d/2-1; 1/z)
\end{aligned}
\tag{3.13}$$

Esta expressão mostra claramente que a primeira parcela dá a contribuição dominante, pois o expoente de z na primeira é maior do que o da segunda e, além disso, $F(a, 0; c; z) = 1$.

Somando as contribuições para o elo elementar fica-se com

$$\begin{aligned}
I(q, \omega_n, m^2) &= f(d) \frac{\text{sen}(\frac{\pi}{2} d) (\Lambda^2)^{d/2-1}}{\pi(1-d/2)} \frac{1}{2} \int_0^1 d\alpha_2 \\
&* \frac{N^0(\alpha_2 \omega_n - \sqrt{\Lambda^2 + B^2}) - N^0(\alpha_2 \omega_n + \sqrt{\Lambda^2 + B^2})}{(\Lambda^2 + B^2)^{1/2}} \\
&+ f(d) \left(-\frac{\text{sen} \frac{\pi}{2} d}{\pi}\right) \int_0^1 d\alpha_2 \int_B^{(\Lambda^2 + B^2)^{1/2}} dx \frac{N^0(x + \alpha_2 \omega_n) - N^0(-x + \alpha_2 \omega_n)}{(x^2 - B^2)^{2-d/2}}
\end{aligned}
\tag{3.14}$$

onde B^2 é dado por (3.11) e

$$f(d) \equiv 2^{-d} \pi^{-d/2} \Gamma^{-1}(d/2) \frac{(1-d/2)\pi}{\text{sen} \frac{\pi}{2} d}
\tag{3.15}$$

A expressão (3.14) é exata, mas muitas integrações devem ser efetuadas. Integraremos (3.14) nos dois casos limites (2.10a) e (2.10b).

a. Limite Clássico

No limite clássico, justifica-se certamente expandir as funções de Bose-Einstein na forma

$$N^0(x+\alpha_2\omega_n) - N^0(-x+\alpha_2\omega_n) \sim \frac{1}{x+\alpha_2\omega_n} - \frac{1}{-x+\alpha_2\omega_n} \quad (3.16)$$

e assim a segunda parcela de (3.14) dá a contribuição dominante para o elo elementar.

Para $T = T_c$ ou $m^2 = 0$, a integração em x de (3.14) é fácil desde que não nos descuidemos dos zeros de B^2 para $\alpha = 0$ e 1 , resultando

$$I(q, \omega_n, 0) \sim \frac{f(d) \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} d}{(d/2-1)} \frac{\Lambda^d}{d/2} \int_0^1 d\alpha \frac{1}{\left[\frac{1}{2} \alpha (q^2 - \omega_n^2) - \frac{1}{4} \alpha^2 q^2 \right]^2} \quad (3.17)$$

$$* F\left(2, \frac{d}{2}, \frac{d}{2} + 1; - \frac{\Lambda^2}{\frac{1}{2} \alpha (q^2 - \omega_n^2) - \frac{1}{4} \alpha^2 q^2}\right).$$

Para a integração seguinte aplicamos uma série de substituições para expressar o argumento da função hipergeométrica na própria variável de integração. Obtemos

$$I(q, \omega_n, 0) \sim - \frac{f(d) \operatorname{sen} \frac{\pi d}{2}}{\pi (d/2-1) d/2} \Lambda^{d-4} \frac{2\Lambda^2}{q^2} \quad (3.18)$$

$$* \int_S^\infty dz \frac{F(2, d/2, d/2+1; -z)}{\left(-\frac{4\Lambda^2}{q^2} \frac{1}{z} + x^2\right)^{1/2}}$$

onde

$$x \equiv (q^2 - \omega_n^2) / q^2 \quad (3.19)$$

e

$$s = \frac{4^2}{q^2(2x-1)}$$

Na forma (3.19) vê-se facilmente que o corte de $I(q, \omega_n, 0)$ estende-se de $\omega^2 = q^2/2$ até $q^2/2 + 2\Lambda^2$. O elo envolve um processo de dois fonons, e para que o momentum q seja transferido, dois fonons de momentum $q/2$ devem ser criados a fim de que se obtenha a mínima energia ao quadrado, isto é, $\omega^2 = q^2/4 + q^2/4$. É o que indica a fig. 5a. A máxima energia ao quadrado é $2\Lambda^2$ para transferir momentum q , pois Λ é, como se sabe, o momentum de corte, conforme fig. 5b. Entretanto, devido à translação do espaço de momenta via integração de Feynman, ver (3.2), uma transferência de energia $q^2/2 + 2\Lambda^2$ é possível, como está indicado na fig. 5c. Esta é uma interpretação que não é fundamental.

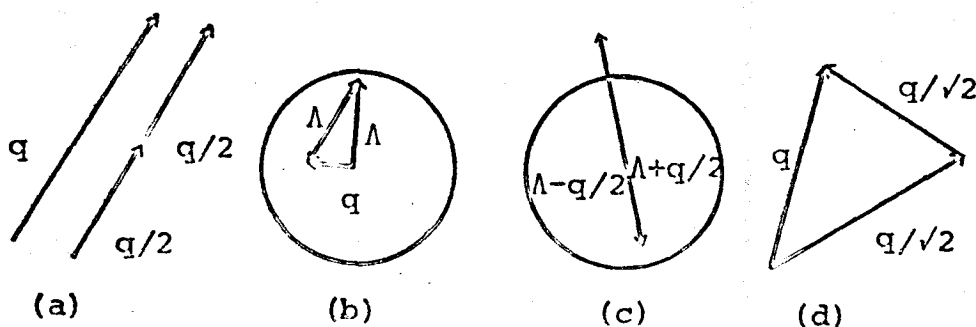


Fig. 5 - Processos de dois fonons da estrutura dos ramos de corte do elo.

O cálculo da expressão (3.18), para o caso $X=1$, pode ser efetuado facilmente, até sem as passagens intermediárias que levam a (3.18). Obtém-se

$$I(q,0,0) \sim f(d) B(d/2-1, d/2-1) \frac{1}{q^{4-d}} \quad (3.20)$$

Já para o caso $X \neq 1$ e

$$\left| \frac{4\Lambda^2}{q^2(2X-1)} \right| \gg 1 \quad (3.21)$$

obtém-se

$$I(q, \omega_n, 0) \sim \frac{f(d) 2^{3-d}}{(d/2-1)} \frac{1}{q^2 - \omega_n^2} \frac{1}{q^{2-d}} (2X-1)^{d/2-1} \quad (3.22)$$

$$* F\left(\frac{1}{2}, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; \frac{2X-1}{X^2}\right).$$

Certamente a expressão acima só é boa quando a desigualdade (3.21) for satisfeita, ou seja, ao longo do ramo de corte que se estende de $X = 1/2$ até $X = 2\Lambda^2/q^2 + 1/2$, como foi dito antes. Mesmo a aproximação (3.21) não sendo uma boa aproximação para $X = 2\Lambda^2/q^2 + 1/2$, já que o primeiro membro de (3.21) é igual à unidade, ela poderia funcionar. O problema fundamental, entretanto, recai no fato de que o argumento da função hipergeométrica em (3.22) varia ao longo do ramo de corte de zero até infinito e retorna a zero no fim do corte. Desta forma, nenhuma aproximação simples de (3.22) válida em todo o ramo de corte pode ser usada.

Uma substancial simplificação pode surgir se olharmos o denominador da integral (3.17). Verificamos que a parcela $\alpha^2 q^2/4$ dificulta a situação e não é de muita importância, pois a contribuição dominante para a integração resulta de valores de α pequenos. Ignorando assim o termo $\alpha^2 q^2/4$ no denominador do integrando de (3.17) e usando a representação integral para as funções hipergeométricas³³

$$F(a, b, c; z) = B^{-1}(b, c-b) \int_0^1 t^{b-1} (1-t)^{c-b-1} (1-tz)^{-a} dt, \quad (3.23)$$

$$\text{Re } c > \text{Re } b > 0, \quad |\arg(1-z)| < \pi \quad (3.23)$$

e trocando a ordem das integrações, obtemos

$$I_a(q, \omega_n, 0) \sim - \frac{2f(d) \text{sen}(\frac{\pi}{2} d)}{(d/2-1)^2 \pi} \frac{\Lambda^{d-2}}{q^{2-\omega_n}} F(1, \frac{d}{2}-1, \frac{d}{2}; - \frac{2\Lambda^2}{q^{2-\omega_n}}) \quad (3.24)$$

Com esta expressão obtemos no limite $\omega_n = 0$ e $q/\Lambda \ll 1$

$$I_a(q, 0, 0) \sim \frac{2^{2-3d/2} \pi^{1-d/2}}{\Gamma(d/2) \text{sen} \frac{\pi}{2} d} \frac{1}{q^{4-d}}.$$

Esta expressão aproximada pode ser comparada com a expressão exata (3.20). Obtemos assim para a razão

$$\rho \equiv I(q, 0, 0)/I_a(q, 0, 0) = 2^{d/2-1} \frac{\Gamma(d/2)\Gamma(d/2-1)}{\Gamma(d-2)}$$

e que dá para os pares de pontos (d, ρ) os valores (4,1)

(3, $\pi/\sqrt{8}$) e (2,1). Vê-se assim que o resultado aproximado difere do valor exato no máximo em 10%, o que é aceitável.

Com respeito à estrutura dinâmica de (3.24) vê-se que o corte em ω^2 agora estende-se de $\omega^2 = q^2$ até $q^2 + 2\Lambda^2$. A transferência mínima de energia envolvendo momentum q se deve à criação de dois fonons com vetores de onda perpendiculares e módulo $q/\sqrt{2}$, como mostra a fig. 5d.

Admitimos que a diferença em relação à expressão matemática exata do elo modificará somente números mas não a forma qualitativa das singularidades. Devido ao fato de que o limite estático de (3.24) quase coincide com o resultado correto, pensamos que está justificado o uso da expressão (3.24) com $\omega_n \neq 0$.

b. Limite Quântico

No limite quântico, $T_c = 0$, é difícil utilizar um esquema de cálculo semelhante ao do limite clássico; como veremos abaixo, é mais indicado extrair a dependência em T e, a seguir, fazer o limite $T \rightarrow 0$, implicando obrigatoriamente $m^2 = 0$, pois em caso contrário recairíamos no limite clássico. No entanto, mantemos inicialmente $m^2 \neq 0$ para comparar ao resultado clássico.

O limite quântico inicia já com um esquema de aproximação diferente, devido a ser $\Lambda \gg q$. De acordo com (3.10) somos tentados a aplicar as aproximações

$$N^0(\alpha_2 \omega_n - \sqrt{\Lambda^2 + B^2}) \rightarrow -1$$

e

(3.25)

$$N^0(\alpha_2 \omega_n + \sqrt{\Lambda^2 + B^2}) \rightarrow 0,$$

na expressão (3.14) do elo elementar.

Fazendo a substituição $x \rightarrow x+B$ em (3.14) obtemos para o elo

$$I(q, \omega_n, m^2) \sim - \frac{f(d) \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} d}{2\pi(1-d/2)} \Lambda^{d-2} \int_0^1 \frac{d\alpha_2}{(\Lambda^2 + B^2)^{1/2}}$$

$$- \frac{f(d) \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} d}{\pi} \int_0^1 d\alpha_2 \int_0^U dx \quad (3.26)$$

$$* \frac{[N^0(x+B+\alpha_2 \omega_n) - N^0(\alpha_2 \omega_n - x - B)]}{x^{2-d/2} (x+2B)^{2-d/2}}$$

onde

$$U = -B + \sqrt{\Lambda^2 + B^2} \quad (3.27)$$

Aqui também o segundo termo dará a contribuição mais importante. Está claro também que o comportamento singular deste termo é devido à integração para x pequeno. Neste caso, não está justificado fazer a aproximação

$$N^0(\alpha_2 \omega_n + x + B) \rightarrow 0,$$

$$N^0(\alpha_2 \omega_n - x - B) \rightarrow -1$$

como em (3.25). Com esta última aproximação, (3.14) resultaria em

$$\begin{aligned}
 I(q, \omega_n, m^2) &= - \frac{f(d) \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} d}{2\pi(1-d/2)} \Lambda^{d-2} \int_0^1 \frac{d\alpha_2}{(\Lambda^2 + B^2)^{1/2}} \\
 &= - \frac{f(d) \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} d}{\pi} \int_0^1 d\alpha_2 \int_0^U \frac{dx}{x^{2-d/2} (x+2B)^{2-d/2}}
 \end{aligned}
 \tag{3.28}$$

Comparemos agora esta forma de $I(q, \omega_n, m^2)$ com a forma que teria se a soma em (2.16) fosse feita diretamente, isto é, substituir a soma por uma integral

$$\Sigma \rightarrow \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} dz
 \tag{3.29}$$

onde $z = 2\pi i l$ (ver, por exemplo, ref. ²³). A expressão (3.7) pode assim ser escrita

$$\begin{aligned}
 I(q, \omega_n, m^2) &= 2^{-(d-1)} \pi^{-d/2} \Gamma^{-1}(d/2) \frac{1}{2\pi i} \\
 & * \int_{-i\infty}^{+i\infty} dz \int_0^1 d\alpha_2 \left\{ - \frac{1}{2} \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2 + \Lambda^2} + \frac{1}{2} \frac{\Lambda^{d-2}}{\Lambda^2} F\left(1, \frac{d}{2} - 1; \frac{d}{2}; - \frac{\Lambda^2}{\Lambda^2}\right) \right\};
 \end{aligned}
 \tag{3.30}$$

Os ramos de corte no plano de Riemann em z estão esboçados na fig. 6.

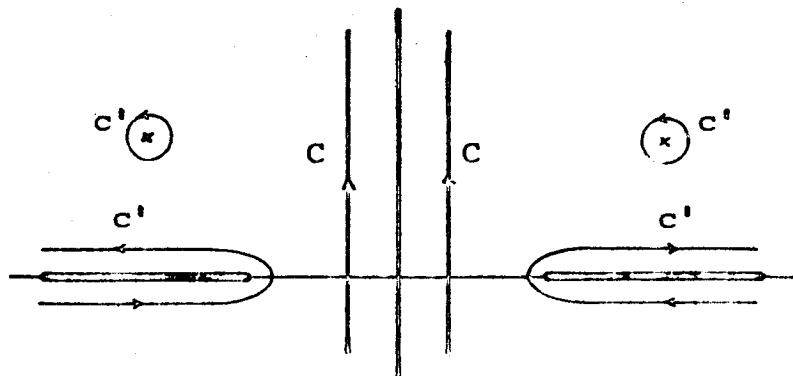


Fig. 6 - Plano de Riemann para a integração do elo em $T_c = 0$.

Podemos integrar a expressão (3.30) ao longo do contorno C , no eixo imaginário, duas vezes, ou deformar o contorno para C' . A integração pode ser feita exatamente como antes, a não ser por diferenças em sinal e $N(x) = 1$. Ao final o resultado deve ser multiplicado por $1/2$ pois a integral foi calculada duas vezes. Com algumas operações simples obtemos (3.28).

Antes de discutir a relevância das duas representações (3.26) e (3.30) de $I(q, \omega_n, m^2)$ a baixas temperaturas, calculemos (3.30). O termo dominante pode ser calculado usando a integral (3.6), em que U é dado por (3.27). Admitamos que a contribuição mais importante para a integração em α vem da região $U/2B \gg 1$, que corresponde a $\alpha \rightarrow 0$ ou $q^2 - \omega_n^2 \rightarrow 0$. Com esta suposição podemos representar a função hipergeométrica por meio de (3.8), onde é válido aproximar as funções hipergeométricas do segundo membro à unidade. A integração assim pode ser feita exatamente e obtemos

$$I(q, \omega_n, 0) = \frac{f(d) \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} d}{(d/2-1)} \Lambda^{d-3} \left\{ \left[- \frac{\Gamma(d/2)}{(d-3)\Gamma(d/2-1)} \right] \right. \quad (3.31a)$$

$$\left. + \frac{\Gamma(4-d)\Gamma(3/2)\Gamma(d/2-1/2)}{(d-3)\Gamma(2-d/2)} \frac{\Lambda^{3-d}}{(q^2 - \omega_n^2)^{\frac{3-d}{2}}} \right\},$$

válida para $2 < d < 4$ e $d \neq 3$, e

$$I(q, \omega_n, 0) = \frac{f(3)}{2\pi} \ln \frac{\Lambda^2}{q^2 - \omega_n^2}, \quad \text{para } d = 3 \quad (3.32)$$

Para $d > 3$, o primeiro termo em (3.31a) domina

$$I(q, \omega_n, 0) \propto \Lambda^{d-3} \quad (3.31b)$$

enquanto para $d < 3$ o segundo termo domina

$$I(q, \omega_n, 0) \propto (q^2 - \omega_n^2)^{\frac{d-3}{2}} \quad (3.31c)$$

Se compararmos (3.31) e (3.32) com a expressão de altas temperaturas (3.24), observamos que as potências de $q^2 - \omega_n^2$ e Λ são completamente distintas nos dois limites. Consequentemente, diferentes propriedades críticas devem ser obtidas nos dois limites, significando que os coeficientes críticos são função da temperatura de transição. Este fato contradiz frontalmente a hipótese da universalidade. Vê-se, então, que a passagem de (3.28) para (3.30) não está justificada porque uma vez obtida (3.30) os termos mais divergentes são calculados a partir dos termos dominantes; o último é obtido da integração para pequenos x . Desta forma, as duas distribuições de Bose-Einstein não podem ser aproximadas como em (3.25). A aparente conclusão é que, independente dos limites de alta e baixa temperatura, as contribuições dominantes devem ser obtidas de (3.14).

Está claro, então, que para $T_c = 0$ o presente esquema de normalização é difícil de encontrar e assim é mais indicado extrair T das diversas quantidades que são envolvidas antes que o limite $T \rightarrow 0$ seja efetuado. Tal

enfoque é feito abaixo.

No limite de temperatura nula, em vez de usar o propagador (2.4) podemos usar

$$G^0(q, \omega) = (-\omega^2 + m_0^2 + q^2 - i0^+)^{-1} \quad (3.33)$$

onde o fator $i0^+$ implica que para $\omega > 0$ o polo está abaixo do eixo real de ω , enquanto para $\omega < 0$ o polo está acima do mesmo, conforme indica a fig. 7.

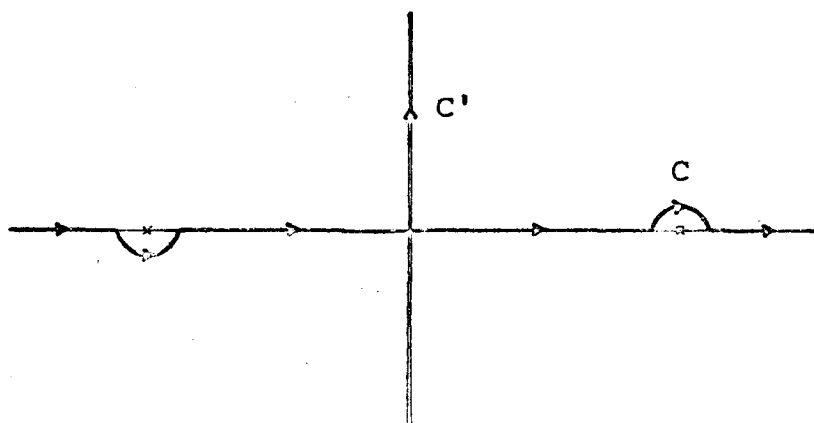


Fig. 7 - Plano de Riemann para o propagador não perturbado a $T = 0$.

O propagador é o mesmo que o propagador de Feynman da teoria de mésons descritos por uma equação de Klein-Gordon. A integração em ω é efetuada ao longo do contorno C da fig. 7, que pode ser girado de 90° até C'. Consequentemente, podemos utilizar o formalismo dependente da temperatura usado anteriormente, fazendo

$$\omega_n \rightarrow \omega \quad e \quad \Sigma \rightarrow \frac{\Lambda \beta}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} d\omega$$

É interessante notar que todos os fatores $\Lambda\beta$ se cancelam. Assim obtemos, para $T = 0$, a expressão (3.28). Queremos dizer que quando T é extraído e o limite $T \rightarrow 0$ é efetuado, chega-se a uma expressão idêntica à (3.28).

Pode-se então integrar (3.28) de maneira mais precisa. Por integração parcial (3.28), pode ser posta sob a forma

$$\begin{aligned} I(q, \omega_n, 0) &= f(d) \left(-\frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi}\right) \frac{1}{4(d/2-1)} \int_0^1 d\alpha_2 \int_0^{\Lambda^2} dy \frac{y^{\frac{d}{2}-1}}{(y+B^2)^{3/2}} \\ &= f(d) \left(-\frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi}\right) \frac{\Lambda^d}{2d(d-2)} \int_1^\infty d\alpha_2 \frac{1}{(B^2)^{3/2}} \\ &\quad * F(3/2, d/2, d/2+1; -\frac{\Lambda^2}{B^2}) \\ &= f(d) \left(-\frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi}\right) \frac{\Lambda^d}{2d(d-2)} \int_1^\infty dy \frac{F(\frac{3}{2}, \frac{d}{2}, \frac{d}{2}+1; -\frac{4\Lambda^2 y}{q^2-\omega^2})}{(\frac{q^2-\omega^2}{4})^{3/2} (y-1)^{1/2}} \end{aligned}$$

Transformando o argumento da função hipergeométrica para

$$y' = 4\Lambda^2 y / (q^2 - \omega^2)$$

e escrevendo-a sob a forma integral e mudando a ordem de integração, numa etapa intermediária teremos

$$\int_{\frac{4\Lambda^2}{q^2-\omega^2}}^{\infty} \frac{dx}{(1+tx)^{3/2} \left(\frac{q^2-\omega^2}{4\Lambda^2} x-1\right)^{1/2}} = \frac{1}{t^{3/2}} \left(\frac{q^2-\omega^2}{4\Lambda^2}\right)^{-1/2}$$

$$* B(1, 1/2) \left(\frac{1}{t} + \frac{4\Lambda^2}{q^2-\omega^2}\right)^{-1},$$

resultando finalmente

$$I(q, \omega_n, 0) = f(d) \left(-\frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi}\right) \frac{\Lambda^{d-3}}{(d-2)(d-1)} \frac{4\Lambda^2}{q^2-\omega^2} \quad (3.34)$$

$$* F\left(1, \frac{d-1}{2}, \frac{d+1}{2}; -\frac{4\Lambda^2}{q^2-\omega^2}\right).$$

Observemos que o ramo de corte desta função no plano de ω^2 se estende de q^2 até $4\Lambda^2 + q^2$, enquanto para $T_c \neq 0$ era de $q^2/2$ até $2\Lambda^2 + q^2/2$. A diferença resulta do fato de que para $T_c \neq 0$, ω^2 é a soma das energias ao quadrado de dois fonons do elo em que as médias são efetuadas sobre o ensemble macrocanônico (não existe coerência de fase entre os fonons excitados) e não sobre estados puros, como é o caso para $T_c = 0$. Neste caso, ω^2 é a soma das energias dos fonons participantes ao quadrado. Assim, o mínimo de ω^2 é $(q/2 + q/2)^2 = q^2$ e o máximo é $(\Lambda + \Lambda)^2 = 4\Lambda^2$. Devido ao deslocamento da origem de integração, como antes, este máximo fixa a $4\Lambda^2 + q^2$.

IV - COMPORTAMENTO CRÍTICO ESTÁTICO

Com o cálculo do elo elementar $I(q, \omega_n, m^2)$ efetuado no capítulo anterior à temperatura crítica ou $m^2=0$, estamos em condições de calcular a contribuição dinâmica para o coeficiente crítico estático η , definido em (1.3). A função correlação ou propagador vestido no espaço de momento e frequências, para $\omega=0$, pode ser escrito como

$$G(q, 0, 0) = Z/q^{2-\eta},$$

Aqui Z é um fator de normalização que não afeta η .

Geralmente admite-se que η é determinado por flutuações críticas estáticas e que não aparecem efeitos dinâmicos no mesmo. Pelo menos é o caso da dinâmica de um campo de bosons²⁷. A razão determinante é que na soma em ω_ℓ na expressão (2.18) da auto-energia para $\omega_n = 0$, o termo mais singular surge de $\omega_\ell = 0$.

Para calcular η , coloquemos (2.18) sob a forma

$$\begin{aligned} \Delta\Sigma(q, \omega_n, 0) &= \frac{1}{3} \frac{n+2}{n+8} g'_0 \int \frac{d^3q'}{\ell} \left[\frac{1}{(\omega_n - \omega_\ell)^2 + (q+q')^2} - \frac{1}{-\omega_\ell^2 + q'^2} \right] \\ &- \frac{1}{3} \frac{n+2}{n+8} g'_0 \int \frac{d^3q'}{\ell} \frac{1}{1 + \frac{n+8}{6} g'_0 I(q', \omega_\ell, 0)} \quad (4.1) \\ &* \left[\frac{1}{(\omega_n - \omega_\ell)^2 + (q+q')^2} - \frac{1}{-\omega_\ell^2 + q'^2} \right] \end{aligned}$$

Colocando $\omega_n = 0$ devemos encontrar um termo do tipo $q^2 \ln q$, cujo fator multiplicativo exponenciado dá o valor de η em primeira ordem.

a. Limite Clássico

Para o cálculo de η no limite clássico, seguiremos uma prova semelhante à de Abe³⁵, para a condensação de bosons. Para $\omega_\ell = 0$, a segunda parcela de (4.1) dá a contribuição estática, já que $I(q', 0, 0)$ é o próprio elo estático. Assim

$$\eta = -2^2 \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi} \frac{\Gamma(d-2)}{\Gamma(d/2)\Gamma(d/2-1)} \frac{4-d}{d} \quad (4.2a)$$

e

$$\eta_a = -2^{d/2} \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi} \frac{4-d}{d} \quad (4.2b)$$

onde η_a foi calculado com a expressão aproximada I_a (3.24).

A primeira parcela de (4.1) resulta num termo proporcional a q^2 . Para $\omega_\ell \neq 0$, primeiramente devemos mostrar que $I(q, \omega_\ell, 0)$ é uma função positiva. Na forma (3.17) vê-se que é este o caso, pois a função hipergeométrica em sua representação integral (3.23) mostra que

$$F(1, d/2-1, d/2; -2\Lambda^2/(q^2 - \omega_\ell^2)) > 0$$

para qualquer $\omega_\ell = 2\pi i\ell$. Além disto, o fator que aparece multiplicando a função hipergeométrica é sempre positivo. O mesmo resultado é obtido para a representação de $I(q, \omega_n, 0)$

na forma (3.18), pois $X > 1$ para qualquer $\ell \neq 0$, isto é, o intervalo de integração é positivo, a raiz quadrada no denominador é positiva e a função hipergeométrica é positiva. Nas duas situações tal deve acontecer, já que o elo é uma quantidade essencialmente positiva para qualquer $\omega_n = 2\pi i n$, como segue da expressão (2.16).

Expandindo agora os termos entre colchetes de (2.18) obtemos

$$\Delta \Sigma'(q, 0, 0) \sim \frac{1}{3} \frac{n+2}{n+8} \sum_{\ell} \int_{q'} \frac{\frac{n+8}{6} g'_0 I(q', \omega_n, 0)}{1 + \frac{n+8}{6} g'_0 I(q', \omega_{\ell}, 0)} \quad (4.3)$$

$$* \left[- \frac{q^2 + 2q \cdot q'}{(q'^2 + \omega_{\ell}^2)^2} + \frac{(q^2 + 2q \cdot q')^2}{(q'^2 - \omega_{\ell}^2)^3} - \dots \right],$$

onde a linha sobre o somatório indica que somente os termos $\ell \neq 0$ são somados. A integração angular elimina os termos ímpares em q e chegamos a uma série com termos do tipo q^{2n} , $n=1, 2, 3, \dots$. Como a soma em ω_{ℓ} é finita comportando-se como $1/\omega_{\ell}^4$, e o primeiro termo do integrando é sempre menor que a unidade, não surgem singularidades para $q' \rightarrow 0$ e como o limite superior é limitado, segue que os coeficientes de q^{2n} são todos finitos. Admitindo que o raio de convergência da série q^{2n} seja finito segue que o termo dominante de (4.3) é q^2 , podendo assim ser desconsiderado.

É conveniente enfatizar que a demonstração de que não há efeito dinâmico em η envolve dois passos. O primeiro passo é o que para $\omega_\ell = 0$ obtém o elo estático e o segundo é que (4.3) dá uma contribuição proporcional a q^2 . Assim mostramos rigorosamente que $\Delta\Sigma^i(q,0,0) \sim q^2$, e que para $\omega_\ell = 0$ resulta o elo estático, pode ser visto utilizando a integral (3.14); passando por (3.17) chega-se a (3.20). Já que ω_n pode ser igualada a zero em (3.14) e como estamos tratando o limite clássico ($\sqrt{\Lambda^2+B^2} \ll q$) a expansão da função de Bose-Einstein está plenamente justificada.

b. Limite Quântico

Calculemos agora $\tilde{\eta}$ para o caso $T_c = 0$. Como foi visto antes, é mais indicado extrairmos a dependência em T . Desta forma, nos utilizaremos de (2.6), (2.8) e (3.29).

Se todas as quantidades forem substituídas como indicado, obteremos para a auto-energia (2.18) a expressão

$$\begin{aligned} \Delta\Sigma(q, \omega_n, 0) &= \frac{1}{3} \frac{n+2}{n+8} g'_0 \kappa \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} dz \left[\frac{1}{(q+q')^2 - (\omega_n - z)^2} - \frac{1}{q'^2 - z^2} \right] \\ &- \frac{1}{3} \frac{n+2}{n+8} g'_0 \kappa \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} dz \frac{1}{q' \left[1 + \frac{n+8}{6} g'_0 \text{HI}(q', z, 0) \right]} \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$* \left[\frac{1}{(q+q')^2 - (\omega_n - z)^2} - \frac{1}{q'^2 - z^2} \right]$$

que pode levar a auto-energia retardada pela continuação analítica $\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$.

Primeiramente demonstraremos que a primeira parcela $\Delta\Sigma^{(1)}$ de (4.4) não dá contribuição além de q^2 , para $\omega_n = 0$. Substituindo $z \rightarrow iz$ e integrando em z obtemos para a mesma

$$\begin{aligned} \Delta\Sigma^{(1)}(q,0,0) &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{q'} \left[\frac{1}{(q+q')^2+z^2} - \frac{1}{q'^2+z^2} \right] \\ &= \frac{1}{2} K_{d-1} q^{d-1} \int_0^{\Lambda/q} dx x^{d-1} \int_0^\pi d\theta \sin^{d-2}\theta \left[\frac{1}{(1+x^2+2x\cos\theta)^{1/2}} - \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde K_{d-1} é dado em (3.4).

A integração para valores grandes de x em (4.5) comportam-se como x^{d-4} , e assim

$$\Delta\Sigma^{(1)}(q,0,0) \sim q^{d-1} \left[\text{constante} + (\Lambda/q)^{d-3} + o((\Lambda/q)^{d-5}) \right]$$

Consequentemente

$$\Delta\Sigma^{(1)}(q,0,0) \sim \begin{cases} q^2 & , \quad d \geq 3 \\ q^{d-1} & , \quad d \leq 3. \end{cases} \quad (4.7a)$$

$$(4.7b)$$

Pode haver uma contribuição anômala em $\tilde{\eta}$ para $d < 3$ se o fator de proporcionalidade em (4.7b) não é zero. Para $d < 3$ a integral em (4.6) é finita para $\Lambda \rightarrow \infty$. Neste caso, entretanto, o integrando de (4.5) pode ser deslocado e obtemos

$$\begin{aligned}
\Delta\Sigma^{(1)}(q,0,0) &\sim \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{q'} \left[\frac{1}{(q'+q/2)^2+z^2} - \frac{1}{(q'-q/2)^2+z^2} \right], \quad d < 3 \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{q'} \frac{-2q \cdot q'}{(q^2+q'^2+z^2)^2 - (q \cdot q')^2} \\
&= 0.
\end{aligned}$$

A última passagem resulta de que o integrando é ímpar. Assim a primeira parcela $\Delta\Sigma^{(1)}$ de (4.4) não contribui.

Consideremos agora a segunda parcela de (4.4), $\Delta\Sigma^{(2)}(q,0,0)$. Segue de (3.31) e de propriedades da função hipergeométrica que $I(q,0_n,0)$ é grande somente para $d \leq 3$. Neste caso, o denominador de $\Delta\Sigma^{(2)}(q,0,0)$ em (4.4) que contém o elo pode ser expandido em série de Taylor. A contribuição dominante poderá ser escrita como

$$\begin{aligned}
\Delta\Sigma^{(2)}(q,0,0) &\sim \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{1}{2} \frac{K_{d-1}}{2} \frac{(d-2)(d-1)}{\Gamma(d) \operatorname{tg} \frac{\pi}{2} d} q^2 \\
&* \int_{-1}^{+1} dx x^{d-1} \int_{-\Lambda(x)}^{+\Lambda(x)} dz \int_0^\pi d\theta \operatorname{sen}^{d-2} \theta \quad (4.8) \\
&* \frac{(x^2+z^2)^{\frac{3-d}{2}}}{4} \left[\frac{1}{(1+x^2+2x\cos\theta)^2+z^2} - \frac{1}{x^2+z^2} \right]
\end{aligned}$$

onde $\Lambda(x) = (4\Lambda^2/q^2 - x^2)^{1/2}$.

Os pequenos argumentos de x e z na integração de

(4.8) são proporcionais a q^2 e não têm, portanto, interesse. Como a integral diverge, a contribuição dominante resultará de grandes valores de x . Expandindo o integrando de (4.8) e fazendo-se a integração angular como em (3.3) resulta

$$\Delta\Sigma^{(2)}(q,0,0) \sim \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{1}{\pi} \frac{K_{d-1}}{2\pi} \frac{(d-2)(d-1)}{f(d) \operatorname{tg} \frac{\pi}{d}} \frac{1}{2^{3-d}} B(1/2, d/2-1/2) \quad (4.9)$$

$$* q^2 \int_0^{\Lambda/q} dx x^{d-1} \int_{-A(x)}^{+A(x)} dz \frac{1}{(x^2+z^2)^{\frac{d+1}{2}}} \left(-1 + \frac{4}{d} \frac{x^2}{x^2+z^2}\right).$$

A integração em z pode ser feita exatamente e resulta

$$\Delta\Sigma^{(2)}(q,0,0) \sim C_I q^2 \int_0^{\Lambda/q} \frac{dx}{x^2} (4\Lambda^2/q^2 - x^2)^{1/2} * \left[-F\left(1+d, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; -\frac{4\Lambda^2/q^2 - x^2}{x^2}\right) + \frac{4}{d} F\left(3+d, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; -\frac{4\Lambda^2/q^2 - x^2}{x^2}\right) \right] \quad (4.10)$$

onde C_I é uma abreviação para o que vem em frente a q^2 em (4.9). Como os argumentos das funções hipergeométricas são sempre maiores do que a unidade, estas podem ser colocadas na forma dada por (3.8). O termo dominante será então

$$\Delta\Sigma^{(2)}(q,0,0) \sim C_I \frac{2\Gamma(3/2)\Gamma(d+1/2)}{\Gamma(d+1)} \left[-1 + \frac{4}{d} \frac{(d+3/2)(d+1/2)}{(d+2)(d+1)} \right] * q^2 \ln q \quad (4.11)$$

Notemos que (4.11) é exatamente o termo dominante de (4.9) pois, da representação (3.8), segue que a função hipergeométrica que contribui para (4.10) é idêntica à unidade. De (4.11) obtemos $\tilde{\eta}$

$$\tilde{\eta} = 0, \quad \text{para } 3 < d < 4$$

$$\tilde{\eta} = - \frac{n+2}{(n+8)^2} (d-2)^2 (d-1) 2^{d-5} \pi^{1/2} \frac{\Gamma(d+1/2)}{\Gamma(d+1)} \cos \frac{\pi}{2} d \quad (4.12)$$

$$* \left[-1 + \frac{(2d+3)(2d+1)}{d(d+2)(d+1)} \right], \quad \text{para } 2 < d < 3.$$

Segue de (4.12) que $\tilde{\eta} \geq 0$. Para $d = 3$, $\tilde{\eta} = 0$, sendo contínua neste ponto.

Para $T_c \neq 0$ não podemos utilizar a forma (3.31), conforme foi citado antes, mas sim a expressão clássica para $I(q, \omega_n, 0)$. Conseqüentemente, para $T_c \neq 0$, obtemos η estático. Existe, entretanto, um domínio em q onde a dimensão é anômala e que é extremamente pequeno para $d > 3$, sendo da ordem de

$$q < q_c \sim \Lambda^{-\frac{d-3}{4-d}}$$

E para $d \leq 3$, η apresenta um comportamento igual ao calculado estaticamente.

V - COMPORTAMENTO CRÍTICO DINÂMICO

O comportamento crítico dinâmico para a rede não-harmônica será estudado abaixo, calculando o propagador dos fonons na temperatura de transição T_c , ou seja, $m^2 = 0$; e a partir daí o coeficiente crítico dinâmico $z.0$ presente capítulo está dividido em duas secções. A primeira tratará do limite clássico e contém duas sub-secções : na primeira sub-secção calcularemos a parte imaginária da auto-energia clássica $\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0)$ que dá a densidade espectral e a partir da mesma calcularemos, na segunda sub-secção, a parte real da auto-energia através da relação de dispersão que a auto-energia obedece. Na segunda secção estudaremos o comportamento da auto-energia no limite quântico.

a. Limite Clássico

Para o cálculo de $\text{Im}\Sigma(q, \omega+i0^+, 0)$ não é necessária a forma subtraída $\Sigma(q, \omega_n, 0) - \Sigma(0, 0, 0)$ pois a segunda parcela entre colchetes de (2.18) não contribui para a parte imaginária. Entretanto, a fim de salientar algumas propriedades de $\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0)$ utilizaremos a expressão (2.18), que pode ser escrita como em (4.1). A primeira parcela da expressão (4.1) não contribui para a parte imaginária de $\Delta\Sigma(q, \omega_n, 0)$ já que a soma em ω_l pode ser deslocada,

$(\omega_\ell \rightarrow \omega_n + \omega_\ell)$ não dependendo mais de ω_n . Desta forma, contribuirá somente com um termo em q^2 e será esquecida. Pelo mesmo argumento, a segunda parcela de (4.1) modifica a situação desde que $\frac{n+8}{6} g'_0 I(q', \omega_\ell, 0) \gg 1$. Como vamos calcular (4.1) através de integração de contorno, é importante termos um conhecimento preciso do integrando no plano z ($\omega_\ell \rightarrow z$). Vamos nos concentrar inicialmente neste ponto.

Representando a soma em ℓ na expressão (4.1) por uma integração ao longo do contorno C , como ilustra a fig. 8, obtemos

$$\Delta \Sigma(q, \omega_n, 0) = - \frac{1}{3} \frac{n+2}{n+8} g'_0 \frac{1}{2\pi i} \int_C dz \int_{q'} \frac{1}{1 + \frac{n+8}{6} g'_0 I(q', z, 0)} \quad (5.1)$$

$$* \left[\frac{1}{(q+q')^2} - \frac{1}{(\omega_n - z)^2} - \frac{1}{q'^2 - z^2} \right].$$

O contorno C pode ser deformado para C' . É fá - cil verificar que a integral sobre o grande círculo se a - nula, pois utilizando a expressão (3.14) e fazendo $x \rightarrow z = \Omega e^{i\phi}$ e $\Omega \rightarrow \infty$, resulta $I(q, z, 0) \rightarrow 0$ e o termo entre colchetes em (5.1) se anula como Ω^{-1} . Tal verificação pode ser feita também com (3.22) e (3.24). Recordemos que o elo tem um ramo de corte no plano z^2 que se estende de q^2 até $2\Lambda^2 + q^2$. A expressão (3.24) mostra que $I(q, z, 0)$ tem valores reais negativos para z real e $z^2 > 2\Lambda^2 + q^2$; assim, é de se esperar que o elo produza outros ramos de corte no plano z^2 após a integração em q' . Na fig. 8 não

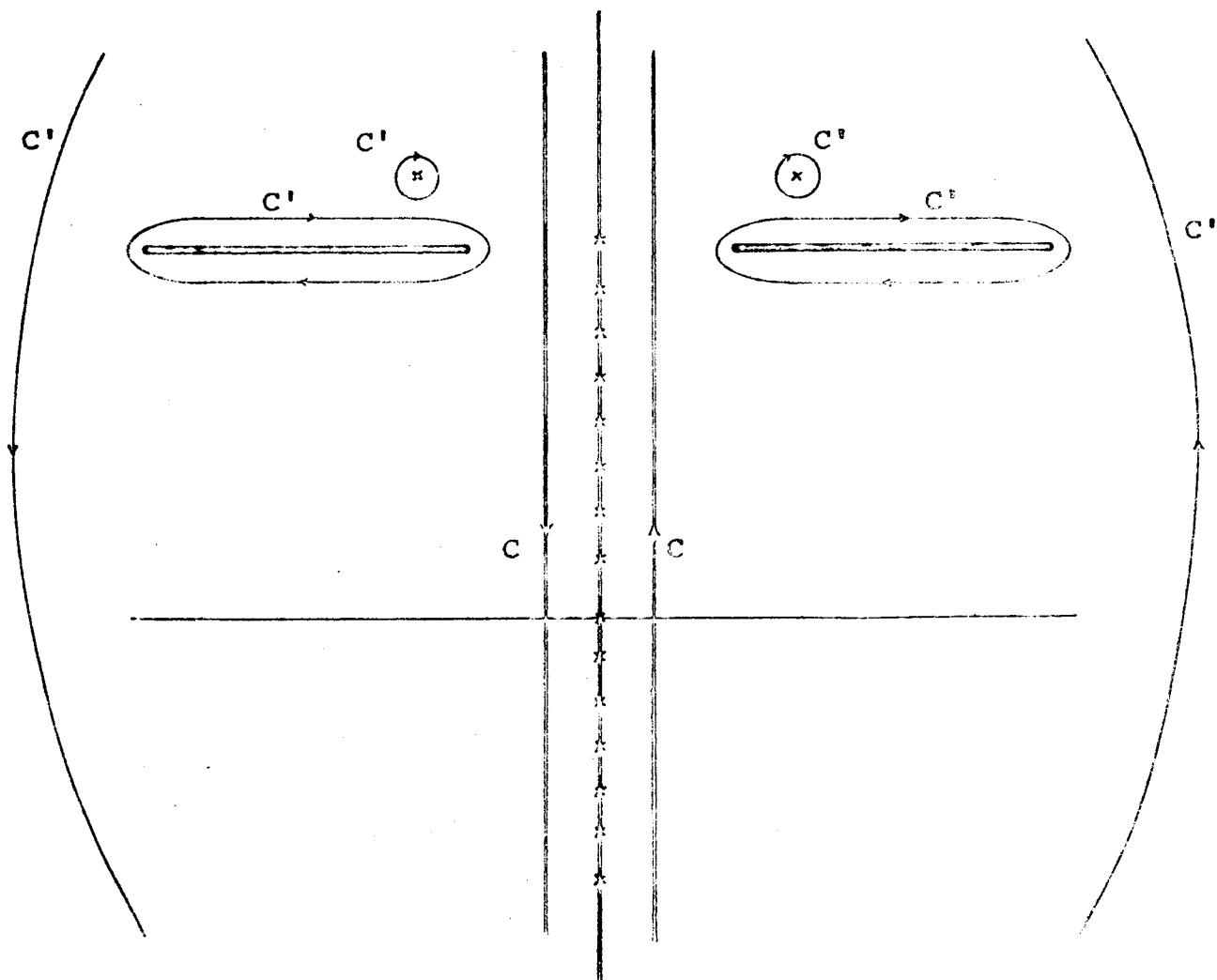


Fig. 8 - Plano de Riemann para a integração da auto-energia clássica em ω_ℓ .

foi efetuada ainda a integração em q' e, pois, os cortes aparecem como polos. Estes polos P correspondem a um estado ligado de dois fônons com energia bastante grande ($z^2 > 2\Lambda^2$). Admitiremos que este estado não contribua significativamente para as baixas energias em que estamos interessados. Que esta suposição é verdadeira, pode ser visto no apêndice.

O primeiro passo é aproximar o primeiro fator do integrando de (5.1) como no caso estático

$$\left[1 + \frac{n+8}{6} g_0' I(q', z, 0) \right]^{-1} \approx \left[\frac{n+8}{6} g_0' I(q', z, 0) \right]^{-1} \quad (5.2)$$

para $z^2 \leq 2\Lambda^2 + q'^2$. Esta aproximação está claramente justificada para $z^2 \sim q'^2$, como se vê por (3.24); note-se que $2 < d < 4$. Podemos também admitir que a região $z^2 \sim q'^2$ dá a contribuição dominante para (5.1).

Usando (5.2) e (3.24), bem como as integrais

$$\int_0^\pi \frac{d\theta \sin^{d-2} \theta}{1+v \cos \theta} = B(d/2-1/2, 1/2) F(1, 3/2, d/2; v^2), \quad (5.3)$$

$$\int_0^\pi \frac{d\theta \cos \theta \sin^{d-2} \theta}{1+v \cos \theta} = -v B(d/2-1/2, 3/2) F(1, 3/2, d/2+1; v^2)$$

onde

$$v \equiv \frac{2q \cdot q'}{q^2 + q'^2 - (\omega_n - z)^2} \quad (5.4)$$

obtemos para a expressão (5.1)

$$\Delta\Sigma(q, \omega_n, 0) \sim 2 \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{(d/2-1)^2 \pi/2}{f(d) \sin \frac{\pi}{2} d} \Lambda^{1-d} \frac{K_{d-1}}{2\pi}$$

$$* \int_{C'} \frac{dz}{2\pi i} N^0(z) \int_0^\Lambda dq' q'^{d-1} F^{-1}\left(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; -\frac{2\Lambda^2}{q'^2 - z^2}\right)$$

(5.5)

$$* \left\{ \frac{-q^2 + \omega_n^2 - 2\omega_n z}{2qq'} v B(d/2-1/2; 1/2) F(1, 1/2, d/2+1; v^2) \right.$$

$$\left. + v^2 B(d/2-1/2, 3/2) F(1, 3/2, d/2+1/2; v^2) \right.$$

Os dois cortes da fig. 3 com $\text{Im}z = \omega_n$ resultam da integração angular. Os pontos $\omega_n \pm \sqrt{q'^2 + q^2}$ correspondem aos zeros do denominador de v , expressão (5.4). Pode-se mostrar que estes pontos não dão contribuição adicional utilizando (3.26) e (3.6). Daí resulta

$$\lim_{v \rightarrow \infty} v F(1, 1/2, d/2+1; v^2) = \text{constante}$$

$$\lim_{v \rightarrow \infty} v^2 F(1, 3/2, d/2+1; v^2) = \text{constante.}$$

Como já vimos, $F(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; -\frac{2\Lambda^2}{q'^2 - z^2})$, no ponto $z^2 = 2\Lambda^2 + q'^2$ tem uma singularidade logarítmica não resultando contribuição extra alguma. Quando $z^2 = q'^2$, podemos escrever

$$F^{-1}\left(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; -\frac{2\Lambda^2}{q'^2 - z^2}\right) \sim \left(\frac{q'^2 - z^2}{2\Lambda^2}\right)^{1-d/2}, \quad z^2 = q'^2,$$

não aparecendo assim contribuição extra. Pelo que foi dito,

podemos concluir que os oito pontos finais dos quatro cortes da fig. 8 são, para $d < 4$, pontos do corte.

Podemos agora escrever a expressão (5.5) na forma

$$\begin{aligned}
 \Delta\Sigma(q, \omega_n, 0) &\sim \frac{C_{III}}{2\pi i} \int_0^\Lambda dq' q'^{d-1} \int_{-\beta}^{+\infty} dz \\
 &* \{ \theta(z^2 - q'^2) \theta(2\Lambda^2 + q'^2 - z^2) N^0(z) \\
 &* \left[F^{-1}\left(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; \frac{-2\Lambda^2}{q'^2 - (z+i0^+)^2}\right) - F^{-1}\left(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; \frac{-2\Lambda^2}{q'^2 - (z-i0^+)^2}\right) \right] \\
 &* \left[-\frac{q'^2 + \omega_n^2 - 2\omega_n z}{2qq'} v_B(d/2 - 1/2, 1/2) F(1, 1/2, d/2, v^2) \right. \\
 &\quad \left. + v^2 B(d/2 - 1/2, 3/2) F(1, 3/2, d/2 + 1; v^2) \right] \\
 &\quad + \theta(z^2 - (q' - q)^2) \theta((q + q')^2 - z^2) N^0(z + \omega_n) \tag{5.6} \\
 &* F^{-1}\left(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; \frac{-2\Lambda^2}{q'^2 - (z + \omega_n)^2}\right) \\
 &* \left[\frac{-q'^2 + \omega_n^2 - 2\omega_n(z + \omega_n)}{2qq'} B(d/2 - 1/2, 1/2) \right. \\
 &\quad \left. * (v_+ F(1, 1/2, d/2; v_+^2) - v_- F(1, 1/2, d/2; v_-^2)) \right. \\
 &\quad \left. + B(d/2 - 1, 3/2) \right. \\
 &\quad \left. * (v_+^2 F(1, 3/2, d/2 + 1; v_+^2) - v_-^2 F(1, 3/2, d/2 + 1; v_-^2)) \right] \} ,
 \end{aligned}$$

onde

$$v_{\pm} \equiv \frac{2qq'}{q^2 + q'^2 - (z \pm i0^+)^2} .$$

As funções 0 em (5.6) são redundantes pois as mesmas surgem nas diferenças das funções hipergeométricas, diferenças que são não nulas apenas nos intervalos especificados pelas funções θ . Usamos também a abreviação

$$C_{II} \equiv -2 \frac{n+2}{(n+8)^2} \pi^{-1/2} \frac{\Gamma(d/2)}{\Gamma(d/2-1/2)} (d/2-1) \Lambda^{2-d} .$$

A Parte Imaginária da Auto-Energia

A partir de (5.6) pode-se calcular a parte imaginária da auto-energia retardada, obtida pela continuação analítica $\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$. Aqui outra aproximação deve ser feita, porque de acordo com (3.8) $F^{-1}(1, d/2-1, d/2; z)$ pode ser aproximada como em (3.13).

Na região de corte, a segunda parcela de (3.13) dá a contribuição dominante ($d < 4$) e pode-se desprezar a primeira, pois sua contribuição é de ordem mais elevada. Agora podemos calcular (5.6), onde trasladando $z \rightarrow z + \omega_n$ no primeiro termo e fazendo $N^0(z + \omega_n) = N^0(z)$ obtemos

$$\begin{aligned}
\text{Im}\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0) &\sim -C_{II} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{2\pi} \frac{1}{\Gamma(d/2)\Gamma(2-d/2)} \frac{(2\Lambda^2)^{d/2-1}}{q} \int_0^\Lambda dq' q'^{d-2} \\
&* \left\{ - \int_0^\infty dz \theta((z+\omega)^2 - q'^2) \theta(2\Lambda^2 + q'^2 - (z+\omega)^2) \left[(z+\omega)^2 - q'^2 \right]^{1-d/2} \right. \\
&\quad * \theta(V^2-1) \left[(-q'^2 - \omega^2 - 2\omega z) T(V) - (q'^2 + q'^2 - z^2) T(V) \right] \\
&\quad * \left[N^0(z+\omega) - \text{sinal}(z+\omega) N^0(z) \right] \\
&- \int_0^\infty dz \theta((z-\omega)^2 - q'^2) \theta(2\Lambda^2 + q'^2 - (z-\omega)^2) \left[(z-\omega)^2 - q'^2 \right]^{1-d/2} \quad (5.6) \\
&\quad * \theta(V^2-1) \left[(-q'^2 - \omega^2 + 2\omega z) T(V) - (q'^2 + q'^2 - z^2) T(V) \right] \\
&\quad * \left[N^0(-z+\omega) - \text{sinal}(z+\omega) N^0(-z) \right] \\
&+ 2 \int_0^\omega dz \theta((z-\omega)^2 - q'^2) \theta(2\Lambda^2 + q'^2 - (z-\omega)^2) \left[(z-\omega)^2 - q'^2 \right]^{1-d/2} \\
&\quad * \theta(V^2-1) \left[(-q'^2 - \omega^2 + 2\omega z) T(V) - (q'^2 + q'^2 - z^2) T(V) \right] \\
&\quad * \text{sinal}(z) N^0(-z+\omega) \left. \right\} ,
\end{aligned}$$

onde

$$T(V) \equiv \pi(1 - 1/V^2)^{\frac{d-3}{2}} \quad (5.7)$$

foi obtida por simples propriedades de funções hipergeométricas com

$$V \equiv \frac{2q, q'}{q'^2 + q'^2 - z^2} .$$

Podemos rapidamente mostrar que a parte imaginária da auto-energia satisfaz a simetria concreta

$$\text{Im}\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0) = -\text{Im}\Delta\Sigma(q, -\omega+i0^+, 0) \quad (5.8)$$

a fim de que o sistema não tenha nenhuma instabilidade adicional além da necessária em $\omega = 0$. Para mostrar (5.7) temos somente que usar identidades do tipo

$$N^0(-z-\omega) - N^0(-z) = - \left[N^0(z+\omega) - N^0(z) \right],$$

e a expressão (5.6). Podemos agora colocar (5.6) numa forma muito mais simples

$$\begin{aligned} \text{Im}\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0) = & -\text{sinal } \omega C_{II} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{2\Gamma(d/2)\Gamma(2-d/2)} \frac{(2\Lambda^2)^{d/2-1}}{q} \\ & * \int_0^\Lambda dq' q'^{d-2} \\ & * \left\{ \int_0^\infty dz (1-V^{-2})^{d/2-3/2} \cdot \left[(z+\omega)^2 - q'^2 \right]^{2-d/2} \cdot \left[N^0(z+\omega) - N^0(z) \right] \right. \\ & * \theta((z+\omega)^2 - q'^2) \theta(2\Lambda^2 + q'^2 - (z+\omega)^2) \theta(V^2 - 1) \\ & + \int_0^\infty dz (1-V^{-2})^{d/2-3/2} \cdot \left[(z-\omega)^2 - q'^2 \right]^{2-d/2} \cdot \left[N^0(-z+\omega) - N^0(-z) \right] \\ & * \theta((z-\omega)^2 - q'^2) \theta(2\Lambda^2 + q'^2 - (z-\omega)^2) \theta(V^2 - 1) \cdot \left[1 - 2\theta(\omega - z) \right] \end{aligned} \quad (5.9)$$

onde a relação (5.7) foi usada, e todos os ω dentro de parêntesis são entendidos como sendo $|\omega|$.

Para calcular (5.9), primeiramente integramos em z , isto é, colocamos os domínios de integração que são es-

pecificados pelas funções θ nos limites de integração. É tedioso, mas trivial. Obtemos

$$\text{Im}\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0) = -\text{sinal } \omega C_{II} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{2\Gamma(d/2)\Gamma(2-d/2)} \frac{(2\Lambda^2)^{d/2-1}}{q}$$

$$* \int_0^\Lambda dq' q'^{d-2}$$

$$* \left\{ \left[\theta(|q'-q|+\omega-q') \int_{|q'-q|}^{q'+q} dz + \theta(-|q'-q|-\omega+q') \int_{q'-\omega}^{q''+q} dz \right] \right.$$

$$* (1-v^{-2})^{d/2-3/2} \cdot \left[(z+\omega)^2 - q'^2 \right]^{2-d/2} \cdot \left[N^0(z+\omega) - N^0(z) \right] \quad (5.10)$$

$$+ \left[\theta(|q'-q|-\omega-q') \int_{|q'-q|}^{q'+q} dz + \theta(q \neq \omega) \theta(q'+\omega-|q'-q|) \int_{q'+\omega}^{q'+q} dz \right.$$

$$- \theta(\omega-2q'-q) \int_{|q'-q|}^{q'+q} dz - \theta(2q'+q-\omega) \theta(-q'+\omega-|q'-q|) \int_{|q'-q|}^{-q'+\omega} dz$$

$$* (1-v^{-2})^{d/2-3/2} \cdot \left[(z-\omega)^2 - q'^2 \right]^{2-d/2} \cdot \left[N^0(-z+\omega) - N^0(-z) \right] \} .$$

Calculemos a expressão acima no limite clássico, isto é, $\Lambda \ll q$. Assim podemos expandir as funções de Bose-Einstein

$$N^0(z+\omega) - N^0(z) \sim \frac{\omega}{z(z+\omega)} ,$$

(5.11)

$$N^0(-z+\omega) - N^0(-z) \sim \frac{\omega}{z(-z+\omega)} .$$

A seguir, normalizando as quantidades conforme

$$z/q = X, \quad q'/q = y \quad e \quad \omega/q = x, \quad (5.12)$$

obtemos para (5.10), usando (5.11)

$$\text{Im}\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0) = - \text{sinal } \omega \, C_{II} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{2\Gamma(d/2)\Gamma(2-d/2)} (2\Lambda^2)^{d/2-1}$$

$$* q\omega \int_0^{\Lambda/q} dy y^{d-2}$$

$$* \left\{ \theta(|y-1|+x-y) \int_{|y-1|}^{y+1} \frac{dx}{|y-1|} + \theta(-|y-1|-x-y) \int_{y-x}^{y+1} \frac{dx}{y-x} \right\}$$

$$* (1-W^{-2})^{d/2-3/2} \cdot \left[(x+x)^2 - y^2 \right]^{2-d/2} \cdot \frac{1}{x(x+x)} \quad (5.13)$$

$$+ \left\{ \theta(|y-1|-y-x) \int_{|y-1|}^{y+1} \frac{dx}{|y-1|} + \theta(1-x)\theta(y+x-|y-1|) \int_{y+x}^{y+1} \frac{dx}{y+x} \right\}$$

$$- \theta(x-2y-1) \int_{|y-1|}^{y+1} \frac{dx}{|y-1|} - \theta(2y+1-x)\theta(-y+x-|y-1|) \int_{|y-1|}^{-y+x} \frac{dx}{|y-1|}$$

$$* (1-W^{-2})^{d/2-3/2} \cdot \left[(x-x)^2 - y^2 \right]^{2-d/2} \cdot \frac{1}{x(-x+x)}$$

onde

$$W \equiv \frac{2y}{1+y^2-x^2}$$

A integração em y na expressão (5.13) pode ser separada em duas partes

$$\int_0^{\Lambda/q} dy = \int_0^1 dy + \int_1^{\Lambda/q} dy, \quad (5.14)$$

onde, a seguir, chamaremos $\text{Im}\Delta\Sigma^{(1)}$ e $\text{Im}\Delta\Sigma^{(2)}$ as contribuições das primeira e segunda parcelas de (5.14) para $\text{Im}\Delta\Sigma$.

Para estimar qual das duas partes da integração dá a contribuição mais importante, faremos uso do seguinte argumento. Admitamos ser x da ordem da unidade; então $\text{Im}\Delta\Sigma^{(1)} \sim q\omega$ enquanto $\text{Im}\Delta\Sigma^{(2)}$ diverge no limite superior de integração. Admitindo agora $x \gg 1$, $\text{Im}\Delta\Sigma^{(1)}$ comporta-se como $\omega^{3-d} q^{d-1}$ e assim tende a zero com $q \rightarrow 0$. Finalmente, se $x \ll 1$ enquanto $\omega \rightarrow 0$ e q é mantido finito, $\text{Im}\Delta\Sigma^{(1)}$ se anula. Desta maneira podemos admitir

$$\text{Im}\Delta\Sigma^{(2)} \gg \text{Im}\Delta\Sigma^{(1)}$$

substituindo em (5.13) $x \rightarrow x + y$ e observando que $y \gg 1$ obtemos

$$\text{Im}\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0) \sim -\text{ sinal } \omega C_{II} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{2\Gamma(d/2)\Gamma(2-d/2)} (2\Lambda^2)^{d/2-1}$$

$$* q\omega \int_1^{\Lambda/q} dy y^{d-2}$$

$$* \left\{ \theta(x-1) \int_{-1}^{+1} dx + \theta(1-x) \int_{-x}^1 dx \right\}$$

$$* (1-x^2)^{d/2-3/2} \cdot (x+x+2y)^{2-d/2} \cdot \frac{(x+x)^{2-d/2}}{(x+y)(x+y+x)} +$$

$$+ \theta(1-x) \int_x^1 dx$$

$$* (1-x^2)^{d/2-3/2} \cdot (x+x+2y)^{2-d/2} \cdot \frac{(x-x)^{2-d/2}}{(x+y)(x-y-x)} \quad (5.15)$$

que pode ainda ser simplificado para

$$\text{Im} \Delta \Sigma(q, \omega + i0^+, 0) \sim 2 \frac{n+2}{(n+8)^2} \pi^{-3/2} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{(d/2-1)} \frac{\Gamma(d/2)}{\Gamma(d/2-1/2)}$$

$$* \Lambda^{d/2-1} \omega q^{2-d/2}$$

$$* \left\{ \left[\theta(x-1) \int_{-1}^{+1} dx + \theta(1-x) \int_{-x}^1 dx \right] (1-x^2)^{d/2-3/2} \cdot (x+x)^{2-d/2} \right. \\ \left. - \theta(1-x) \int_x^1 dx (1-x^2)^{d/2-3/2} \cdot (x-x)^{2-d/2} \right\} \quad (5.16)$$

Notemos que na passagem de (5.13) para (5.16) deve ser satisfeita a relação $y \gg x$. É sempre o caso, pois decorre da hipótese que $\omega, q \ll \Lambda$. Mesmo no caso em que $x \rightarrow \infty$, Λ/q vai mais rápido a infinito porque $\omega \ll \Lambda$.

O limite $x \gg 1$ pode ser calculado utilizando a integral

$$\int_{-1}^{+1} dx (1-x^2)^{d/2-3/2} = 2^{d-2} \frac{\Gamma^2(d/2-1/2)}{\Gamma(d-1)},$$

e assim

$$\text{Im}\Delta\Sigma(0, \omega+i0^+, 0) \sim \frac{n+2}{(n+8)^2} \pi^{-3/2} \frac{\text{sen}^2 \frac{\pi}{2} d}{(d-2)} \omega^{d+1}$$

$$* \frac{\Gamma(d/2)\Gamma(d/2+1)}{\Gamma(d)} \text{ sinal } \omega. \omega^{3-d/2} \omega^{d/2-1}, \quad (5.17)$$

onde

$$2 < d < 4.$$

Notemos que a demonstração de que $\text{Im}\Delta\Sigma^{(2)}$ dá a contribuição mais importante para $\text{Im}\Delta\Sigma$, é consistente com a aproximação (5.2). Esta aproximação baseou-se na suposição de que $z^2 \sim q'^2$ daria a contribuição mais importante, ou de acordo com (5.12) $x^2 \sim y^2$, que é o caso, como se pode ver, de (5.15), onde foi feita a substituição $x \rightarrow x + y$.

Os resultados mais importantes deste parágrafo são (5.16) e (5.17). Em particular, (5.17) parece ser um resultado interessante. Como os propagadores não perturbados não têm parte imaginária, é natural que não tenhamos obtido um primeiro termo do tipo $\omega^2 \ln \omega$, que não pode ser exponenciado, mas, ao contrário, uma potência de ω . Para $d > 4$ obteríamos provavelmente uma proporcionalidade em ω .

A Parte Real da Auto-Energia

Para calcular a parte real da auto-energia é consideravelmente mais simples começar com a expressão (4.1) e colocar $q = 0$. Seguindo uma análise similar à da primeira parte desta secção obtemos

$$\begin{aligned}
\text{Im}\Delta\Sigma(0, \omega+i0^+, 0) &= \text{sinal } \omega \cdot \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{\text{sen}^2 \frac{\pi}{2} d}{\pi} 2^{d/2-1} \\
&* \int_0^\Lambda dq q^{d-2} \\
&*\{\theta(\omega^2-2q\omega)\theta(2\Lambda^2-\omega^2+2\omega q) (\omega^2-2\omega q)^{2-d/2} \quad (5.18) \\
&* [N(\omega-q) - N(-q)] \\
&+ \theta(2\Lambda^2-\omega^2-2\omega q) (\omega^2+2\omega q) \cdot [N(-q-\omega) - N(-q)]\},
\end{aligned}$$

onde dentro das chaves temos $|\omega|$.

Obtemos a parte real através das relações de dispersão que a auto-energia satisfaz²⁵

$$\text{Re}\Delta\Sigma(0, \omega, 0) = P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{\pi} \text{Im}\Delta\Sigma(0, \omega'+i0^+, 0) \left(\frac{1}{\omega-\omega'} - \frac{1}{\omega'}\right). \quad (5.19)$$

Aqui a segunda parcela dentro do parênteses leva em conta a subtração da auto-energia, implicando que $\text{Re}\Delta\Sigma(0, 0, 0)=0$. Não há termo constante em (5.19) já que a integral sobre o grande círculo se anula, como foi demonstrado antes. Usando $N(x) \sim 1/x$ e (5.19), podemos escrever (5.18) na forma

$$\begin{aligned}
\text{Re}\Delta\Sigma(0, \omega, 0) &\sim \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{\text{sen}^2 \frac{\pi}{2} d}{\pi} 2^{d/2} \\
&* P \int_0^\infty \frac{d\omega'}{\omega'^2-\omega^2} \int_0^\Lambda dq q^{d-3} *
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & * \{ \theta(\omega'^2 - 2\omega'q) \theta(2\Lambda^2 - \omega'^2 + 2\omega'q) \frac{(\omega'^2 - 2\omega'q)^{2-d/2}}{\omega' - q} \\
 & + \theta(2\Lambda^2 - \omega'^2 - 2\omega'q) \frac{(\omega'^2 + 2\omega'q)^{2-d/2}}{\omega' + q} \} \quad (5.20)
 \end{aligned}$$

Como esta é uma expressão assaz importante, mostraremos o cálculo de (5.20) em detalhes. Das funções θ , obtemos

$$\begin{aligned}
 \text{Re}\Delta\Sigma(0, \omega, 0) & \sim C_{III} \omega^2 \int_0^\Lambda dq q^{d-3} \\
 & * P \int_q^{\sqrt{2\Lambda^2 + q^2}} \frac{d\omega'}{\omega'} (\omega'^2 - q^2)^{2-d/2} \quad (5.21) \\
 & * \left[\frac{1}{(\omega' - q)^2 - \omega^2} + \frac{1}{(\omega' + q)^2 - \omega^2} \right],
 \end{aligned}$$

onde na primeira parcela de (5.21) fizemos a substituição $\omega' \rightarrow \omega' + 2q$ e abreviamos

$$C_{III} = \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{\text{sen} \frac{\pi}{2} d}{\pi} 2^{d/2}$$

A seguir podemos colocar (5.21) sob a forma

$$\begin{aligned}
 \text{Re}\Delta\Sigma(0, \omega, 0) & \sim C_{III} \omega^2 \int_0^\Lambda dq q^{d-3} \\
 & * P \int_q^{\sqrt{2\Lambda^2 + q^2}} \frac{d\omega'}{\omega'} (\omega'^2 - q^2)^{2-d/2} \\
 & * \frac{2(\omega'^2 + q^2 - \omega^2)}{\left[\omega'^2 - (q+\omega)^2 \right] \cdot \left[\omega'^2 - (q-\omega)^2 \right]};
 \end{aligned}$$

substituindo $\omega'^2 = x$ e deslocando $x \rightarrow x + q^2$, resulta

$$\text{Re} \Delta \Sigma(0, \omega, 0) = c_{III} \omega^2 \int_0^\Lambda dq q^{d-3} P \int_0^{2\Lambda^2} \frac{dx}{x+q^2} x^{2-d/2} \quad (5.22)$$

$$* \frac{x+2q^2-\omega^2}{(x-\omega^2-2\omega q) \cdot (x-\omega^2+2\omega q)}.$$

O passo seguinte consiste em desenvolver o denominador de (5.22) em frações parciais. Todas as integrais podem ser calculadas por métodos convencionais. Assim,

$$P \int_0^{2\Lambda^2} dx \frac{x^{2-d/2}}{x-\omega^2-2\omega q} \quad (5.23)$$

pode ser obtida por integração do contorno ilustrado na fig. 9, e da qual resulta

$$- e^{i\pi(2-d/2)} \int_0^{2\Lambda^2} dx \frac{x^{2-d/2}}{x+\omega^2+2\omega q} + P \int_0^{2\Lambda^2} dx \frac{x^{2-d/2}}{x-\omega^2-2\omega q} \quad (5.24)$$

$$- i\pi(\omega^2+2\omega q)^{2-d/2} + i \int_0^\pi d\phi \frac{(2\Lambda^2 e^{i\phi})^{2-d/2}}{1 - \frac{\omega^2+2\omega q}{2\Lambda^2} e^{i\phi}} = 0.$$

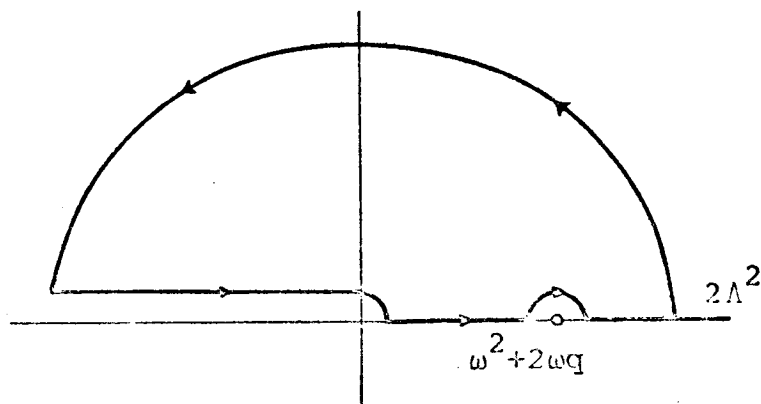


Fig. 9 - Contorno de integração para a expressão (5.23).

Expandindo em série de Taylor a última parcela de (5.24) e separando as partes real e imaginária resultam as integrais que buscamos. Os termos dominantes são facilmente obtidos como

$$\int_0^{2\Lambda^2} dx \, x^{2-d/2} \cdot \left\{ \begin{array}{l} (x+\omega^2+2\omega q)^{-1} \\ (x-\omega^2-2\omega q)^{-1} \\ (x-\omega^2+2\omega q)^{-1} \end{array} \right\} \sim \frac{(2\Lambda^2)^{2-d/2}}{2-d/2} \quad (5.25)$$

Usando, em adição

$$\int_0^{2\Lambda^2} dx \, \frac{x^{2-d/2}}{x+q^2} = \frac{1}{q^2} \frac{(2\Lambda^2)^{3-d/2}}{3-d/2} F(1, 3-d/2, 4-d/2; -2\Lambda^2/q^2)$$

eventualmente obteremos

$$\text{Re}\Delta\Sigma(0, \omega, 0) \sim C_{III} \omega^2 (2\Lambda^2)^{2-d/2} \int_0^{\Lambda} dq \, \frac{q^{d-3}}{q^2 - \omega^2} \quad (5.26)$$

$$* \left\{ \frac{F(1, 3-d/2, 4-d/2; -2\omega^2/q^2)}{(q^2/2\Lambda^2)(3-d/2)} - \frac{1}{2-d/2} \right\}$$

Como $2\Lambda^2/q^2 \gg 1$, podemos usar (3.8) para representar a função hipergeométrica

$$F(1, 3-d/2, 4-d/2; -2\Lambda^2/q^2) = \frac{3-d/2}{2-d/2} \frac{q^2}{2\Lambda^2} F(1, d/2-2, d/2-1; -q^2/2\Lambda^2) \\ + \frac{(3-d/2)\pi}{\text{sen } \frac{\pi}{2} d} (q^2/2\Lambda^2)^{3-d/2} \quad (5.27)$$

Expandindo a função hipergeométrica do segundo membro de (5.27) de acordo com

$$F(1, d/2-2, d/2-1; -q^2/2\Lambda^2) \sim 1 + \frac{2-d/2}{d/2-1} \frac{q^2}{2\Lambda^2} - \dots$$

observamos que a segunda parcela de (5.27) dá a contribuição dominante para $2 < d < 4$, isto é, (5.26) pode ser escrita como

$$\text{Re}\Delta\Sigma(0, \omega, 0) \sim C_{\text{III}} \frac{\pi}{2 \text{sen } \frac{\pi}{2} d} \omega^2 \int_0^\Lambda \frac{dq^2}{q^2 - \omega^2}$$

e conseqüentemente

$$\text{Re}\Delta\Sigma(0, \omega, 0) \sim \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi} 2^{d/2} \omega^2 \ln(\Lambda/\omega) \quad (5.28)$$

Para $q = 0$, o propagador retardado vestido pode ser escrito até a ordem $1/n$ como segue

$$G^{-1}(0, \omega + i0^+, 0) \sim \omega^2 - \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi} 2^{d/2} \omega^2 \ln(\Lambda/\omega) \quad (5.29)$$

$$- \text{Im} \Delta \Sigma(0, \omega + i0^+, 0),$$

onde o último termo é dado por (5.18). Exponenciando os primeiros dois termos de (5.29) para $\omega^{2+\lambda}$ resulta

$$\lambda = - \frac{n+2}{(n+8)^2} \frac{\text{sen } \frac{\pi}{2} d}{\pi} 2^{d/2}, \quad 2 < d < 4. \quad (5.30)$$

Desconsiderando por um momento a parte imaginária de (5.29), obtemos

$$G^{-1}(q, \omega, 0) \sim q^{2-\eta} - \omega^{2+\lambda} = q^{2-\eta} \left[1 - (\omega/\omega_c)^{2+\lambda} \right]$$

e onde a frequência característica $\omega_c \sim q^2$, conforme a expressão (1.5b), é dada por

$$\omega_c \sim q^{(2-\eta)/(2+\lambda)} \quad (5.31)$$

Como calculamos o coeficiente crítico dinâmico com a expressão aproximada para o ejo, devemos comparar λ também com η_a como é dado em (4.2b)

$$\lambda = \eta_a \frac{d}{4-d},$$

e desta forma

$$z = 1 - \eta_a \frac{2}{4-d} \quad (5.32)$$

Este resultado é de certa forma surpreendente por que deveríamos esperar $\lambda \sim \epsilon^2$ pelo método do ponto fixo de Wilson³⁰. Nesta aproximação (5.31) representa uma frequência característica oscilatória enquanto deveríamos prever um modo relaxativo. Esta situação pode ser melhorada levando em conta a parte imaginária do propagador. De fato, a frequência característica também pode ser obtida como os polos do propagador retardado na parte inferior do plano ω .

$$\left[G^R(q, \omega, 0) \right]^{-1} = q^2 - \omega_c^2 + \left[\Sigma(q, \omega_c, 0) + 2i \text{Im} \Sigma^R(q, \omega_c, 0) \right] = 0, \quad (5.33)$$

onde efetuamos a continuação analítica na parte inferior do plano ω . Aqui $\Sigma(q, \omega, 0)$ é a função auto-energia, que é analítica em todo o plano ω , a não ser o corte no eixo real de ω . $\text{Im} \Sigma^R$ é a continuação analítica da parte imaginária de Σ^R do eixo real de ω para o semiplano inferior. Como (5.33) não pode ser solucionada facilmente, devemos tomar nossas expansões aproximadas. O propagador pode ser escrito agora como

$$\left[G^R(q, \omega, 0) \right]^{-1} = q^2 - \omega_c^2 + \lambda - i \omega q^{2-d/2} \Lambda^{d/2-1} h(\omega/\Lambda), \quad (5.34)$$

onde $h(\omega/\Lambda)$ é uma abreviação da função (5.16) entre chaves e alguns fatores. Se ignoramos a dependência em ω/Λ na função $h(x)$ na (5.34) conseguimos a solução aproximada

$$\omega_c \sim iq^{d/2-\eta}, \text{ para } 4 > d > 2 + \eta \quad (5.35)$$

Uma solução mais geral de (5.34) seria

$$\omega_c \sim -\frac{1}{2} ih q^{2-d/2} \pm \left[-\frac{h^2 q^{4-d}}{4} + q^{2-\eta} \right]^{1/2} \quad (5.36)$$

Não tentamos resolver (5.34) mais exatamente, porque tentaríamos de resolver (5.33). Em termos gerais, a frequência característica (5.35) que é do tipo relaxamento, descreve a solução de (5.34) mais acuradamente que (5.31) para $4 > d > 2 + \eta$, enquanto para $2 < d < 2 + \eta$ deveros obter (5.31).

b. Limite Quântico

Nesta secção, nosso interesse está no comportamento de $\Delta\Sigma(q, \omega+i0^+, 0)$ com $T_c = 0$. Como nos cálculos anteriores, deveríamos estudar o comportamento analítico do integrando de (4.1) no plano complexo de z . Nossa atenção deveria recair no caso em que $2 < d < 3$, pois para $3 < d < 4$ obtemos os resultados do campo molecular médio para os coeficientes críticos. De uma análise imediata dos ramos de corte e polos do integrando obteríamos uma contribuição $\tilde{\eta}\omega^2 \ln(\Lambda/\omega)$ somente para a parte real da auto-energia, como no limite clássico. Da mesma forma, da parte imaginária resultaria um fator dependente de Λ/q . Em outras palavras, o "scaling" dinâmico é violado.

A contribuição dominante para o elo elementar po de ser escrita a partir de (3.31) como

$$I(q, \omega_n, 0) \sim R_1 \Lambda^{d-3} + R_2 (-q^2 - \omega_n^2)^{\frac{d-3}{2}}, \quad 2 < d < 3 \quad (5.37)$$

onde R_1 e R_2 são fatores independentes de q, ω_n e Λ . Para $3 < d < 4$ o elo é independente de q e ω_n em sua contribuição dominante.

Como verificamos no Cap. III, o limite quântico é equivalente a uma teoria quântica de campos de mesons com interação da forma $g_0 \phi^4$. Na expressão da auto-energia (4.1) e do elo elementar (3.30), fazendo a substituição $z \rightarrow iz$, podemos usar a integração em z e q' como uma única variável, com $d + 1$ dimensões com uma métrica euclidiana. Wilson³⁶ estudou a teoria de mesons com interação $g_0 \phi^4$ em um espaço de dimensões d_w menor que 4, no limite $n \rightarrow \infty$, com propagadores da forma (3.33). Ressalve-se no entanto, que sua métrica é não-euclidiana para que a teoria seja relativisticamente invariante e com um corte de momentum e energia Λ . A expressão para o elo-fórmula (2.11) do seu trabalho pode ser escrita como

$$I_w(k+i0^+, 0) \sim R_1^w \Lambda^{-\epsilon_w} + R_2^w (-k^2 - i0^+)^{-\epsilon_w/2}$$

com R_1^w e R_2^w constantes independentes de k e Λ e onde $\epsilon_w \equiv 4 - d_w$ e $d_w = d + 1$. Vemos assim que a dependência no "vetor energia-momentum" k é idêntica à nossa, expressão (5.37). Concluimos então que a questão de métrica e corte

em energia (ou frequência) tomam uma importância secundária quando da comparação da teoria de transições de fase mediada por fonons em que $T_c = 0$ com a teoria de mesons na aproximação $1/n$.

Pelo exposto acima, podemos, desta forma, utilizar a expressão do propagador perturbado da teoria de mesons, que tem como expressão-fórmula (5.5) do trabalho de Wilson:

$$D^W(K) \sim \frac{k^\eta \Lambda^{-\eta}}{k^2} \quad (5.38)$$

onde $\tilde{\eta}$ é o coeficiente crítico procurado. Da expressão acima verificamos que o "scaling" dinâmico não é satisfeito pela presença do fator $\Lambda^{-\eta}$ e que o coeficiente crítico dinâmico \tilde{z} é dado por

$$\tilde{z} = 1, \quad 2 < d < 4; \quad (5.39)$$

ou seja, \tilde{z} não se modifica pela presença da interação. Por questão de coerência podemos também escrever

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda} &= 2 - \tilde{\eta} \quad , \quad 2 < d < 3 \\ \tilde{\lambda} &= 2 \quad , \quad 3 < d < 4 \end{aligned} \quad (5.40)$$

em que $\tilde{\eta}$ é dado pela expressão (4.12). É claro que $\tilde{\lambda}$ é contínuo em $d = 3$.

CONCLUSÕES

A presente Tese⁶ tratou de propriedades críticas estáticas e dinâmicas de uma rede cristalina anarmônica com interação de quarta ordem simulando uma transição de fase estrutural. O conceito de fonon macio^{1,2,3,11} unifica o tratamento destas transições e, desta forma, o modelo microscópico utilizado foi o hamiltoniano (2.1), com interação entre os campos de fonons macios com n componentes.

As transições de fase apresentam em geral o fenômeno de universalidade^{7,8,9}, ou seja, os coeficientes críticos independem da interação. Existem assim relações matemáticas entre os coeficientes críticos, as relações de "scaling".

Duas técnicas teóricas recentes são extremamente eficientes para caracterizar a região crítica e calcular coeficientes críticos, a saber: a expansão ϵ^{30} e aproximação $1/n^{32}$. Quando efeitos quânticos (dinâmicos) não são levados em conta, utilizando portanto métodos clássicos (estáticos), as técnicas complementam-se satisfatoriamente. Se, no nosso hamiltoniano (2.1) for desprezada a energia cinética recai-se no hamiltoniano estático utilizado acima, e que é equivalente ao hamiltoniano de um sistema magnético-com campos de spin com n componentes.

É interessante salientar neste ponto que propriedades críticas, mesmo para modelos em que a dinâmica do problema não é levada em conta, mostram pequenas di-

vergências quando calculadas na aproximação "parquet"³⁷, bem como calculados auto-consistentemente³⁸, das aproximações usuais $1/n$ ³² e ϵ ³⁰. No entanto, o "scaling" estático está verificado.

A técnica de cálculo utilizada foi a aproximação $1/n$ em primeira ordem. É conveniente enfatizar que tal aproximação é válida para n grande. Utilizamos somente dos gráficos dominantes para o cálculo da auto-energia. Dois limites foram tratados: temperaturas de transição alta (limite clássico) e nula (limite quântico) obtendo resultados bastante distintos nas duas situações. Tal fato pode ser relacionado com flutuações críticas estáticas, que no limite clássico tais flutuações tem a forma aproximada

$$\int_0^{\Lambda} dq q^{d-1} \frac{1}{m^2 + q^2}$$

como se pode ver a partir de (4.1). Já no limite quântico sua expressão é inteiramente diferente, pois a partir de (4.10) toma aproximadamente a forma

$$\int_0^{\Lambda} dq q^{d-1} \frac{1}{(m^2 + q^2)^{1/2}}$$

Existe assim um "crossover" de $T_c \neq 0$ para $T_c = 0$.

No limite clássico o coeficiente crítico η do comprimento de correlação não apresenta contribuição dinâmica, resultado também surge para a condensação de bósons²⁷. Entretanto, quando $T_c \rightarrow 0$ o domínio no domínio de momenta que apresenta contribuições críticas estáticas ($|k| < k_B T$) reduz-se a zero e $\tilde{\eta}$ assume discontinuamente no

vos valores, em função de d , produzido por flutuações críticas quânticas. O resultado (4.12) é fácil de ser entendido. As flutuações críticas quânticas (dinâmicas) correspondem sempre a um problema em $d+1$ dimensões. Desta forma para $d > 3$, é de se esperar o comportamento do campo molecular médio, $\bar{\eta} = 0$. Já para $d < 3$ a teoria tem singularidades infravermelhas e dimensões anômalas devem ser esperadas. É importante salientar que para $T_c \neq 0$, mesmo que seja pequeno o comportamento singular da função distribuição de Bose-Einstein para argumentos pequenos, produzirá flutuações críticas clássicas. Devemos salientar que, para $d = 3$, $\bar{\eta}$ não foi calculado separadamente, mas que se anula quando extrapolado de (4.12). Assim, para $d = 3$ e $T_c = 0$ o sistema mostra comportamento do campo molecular médio.

Uma transição de fase de segunda ordem com $T_c = 0$ foi estudada para $d = 3^{23}$ e é formalmente equivalente ao tratamento de transições de fase ferroelétricas uniaxiais em suas propriedades estáticas calculado na aproximação "parquet"³⁹. O propagador em T_c não foi, no entanto, calculado pelos seus autores. Recentemente a aproximação "parquet" foi utilizada na expansão ϵ para calcular coeficientes críticos estáticos⁴⁰; os resultados encontrados são os usuais.

No que diz respeito ao comportamento crítico dinâmico, verificamos que a hipótese do "scaling" dinâmico^{7,9}, não foi verificada tanto a $T_c \neq 0$ quanto a $T_c = 0$, pois nos dois casos um comprimento atômico surge no propagador-expressões (5.34) e (5.38). Tal resultado, acreditamos, é a conclusão mais importante do presente trabalho.

É conveniente mencionarmos aqui o trabalho de Sasvári e Szépfalusy⁴¹ que trataram de uma transição de fase estrutural semelhante à nossa, mas com uma variação σ no alcance da interação. O coeficiente crítico dinâmico é calculado somente no limite $n \rightarrow \infty$ em que o "scaling" dinâmico é observado. Em particular, estes autores obtêm $z = 1$ para $\sigma = 2$ (nosso modelo), o que concorda com nossos resultados tanto no limite clássico - expressão (5.32), como no limite quântico - expressão (5.39).

Nossos resultados também podem ser relacionados com as dificuldades do grupo de renormalização dinâmico mencionados na literatura²⁸. Como consequência da conservação de energia, o vértice renormalizado de quatro fônons não é regular na frequência para pequenas transferências de momentum. Assim para $q = 0$, obtemos para o elemento que também determina o vértice renormalizado, para $T_c \neq 0$

$$I(0, \omega + i0^+, 0) \sim (2\Lambda^2/\omega^2)^{2-d/2} \exp\{i \operatorname{sign} \omega \pi d/2\}.$$

No caso de bosons, onde o "scaling" dinâmico é satisfeito, a quantidade acima anula-se. Uma eventual renormalização do vértice poderia ser executada, como a renormalização de massa efetuada em (2.12); mas dificilmente o vértice anular-se-ia para pequenas transferências de momentum, como se pode ver pela expressão (3.34) do elemento elementar.

Métodos usuais do grupo de renormalização dinâmico podem ser aplicados a um sistema de bosons de admitirmos que os modos com comprimento de onda longo sejam

amortecidos, possuindo o propagador a forma

$$D^{-1}(q, \omega + i0^+, 0) \sim q^2 - i\omega/\Gamma, \quad (6.1)$$

que é o propagador do modelo semi-clássico de Halperin-Hohenberg-Ma²⁸. Recentemente de Dominicis⁴² mostrou que é possível efetuar uma formulação lagrangeana de um sistema com propagadores como (6.1). A partir de (5.24) o espectro de excitação de fonons pode ser aproximadamente representado como

$$\Gamma \sim q^{2-d/2} \Lambda^{-1+d/2}$$

e assim (6.1) é, talvez, uma boa aproximação quando decaimento é levado em conta. Entretanto, de um ponto de vista microscópico, o problema não fica resolvido.

Como foi mencionado, talvez a maior idealização do presente trabalho esteja na ausência de acoplamento com fonons acústicos. Não podemos, portanto, verificar a presença do pico central dado pela instabilidade do fator de estrutura dinâmico ligado à resposta linear pelo teorema flutuação-dissipação, em que Γ deve possuir a forma²

$$\Gamma = \Gamma_0 + \frac{\delta^2}{\gamma - i\omega}$$

para concordar com resultados experimentais. Nosso modelo está longe de prever tal forma para Γ , pois nosso sistema não apresenta hidrodinâmica¹⁰. Além do que, deveríamos estar em presença de um grupo de renormalização dinâmico em que pudéssemos levar em conta também corpos de fonons acús-

ticos.

Na atual situação teórica, comparação com a experiência não é possível. De um lado não temos valores experimentais para z em função das dificuldades experimentais e por outro lado não existem também medidas para $\tilde{\eta}$ para transições de fase a baixas temperaturas.

Para finalizar, citaremos algumas possibilidades futuras que se abrem com este trabalho: Extensão até $1/n^2$, acoplamento com fonons acústicos, expansão ϵ , tratamento pelas equações Callan-Symansik⁴³ e finalmente cálculo de coeficientes críticos para $T > T_c$ e verificar se são satisfeitas as relações de "scaling" estático como a relação (1.4).

APÊNDICE

Neste apêndice mostraremos que os polos P, figura 8, decorrentes da auto-energia clássica, não contribuem em ordem dominante para a auto-energia. Abreviando (3.24) como segue

$$I(q, \omega_n, 0) \sim C_A \frac{\Lambda^{d-2}}{q^2 - \omega_n^2} F\left(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; -\frac{2\Lambda^2}{q^2 - \omega_n^2}\right)$$

a equação que determina os polos é

$$q'^2 - z^2 = -C_A \frac{n+8}{6} g'_0 \Lambda^{d-2} F\left(1, \frac{d}{2} - 1, \frac{d}{2}; -\frac{2\Lambda^2}{q'^2 - z^2}\right) \quad (\text{A.1})$$

As raízes de (A.1) satisfazem

$$z^2 > 2\Lambda^2 + q'^2, \quad (\text{A.2})$$

pois para z^2 real a função hipergeométrica é real e positiva, como segue de (3.23). Uma solução aproximada de (A.1) pode ser obtida fazendo a função hipergeométrica igual à unidade. Os dois polos simples serão dados por

$$z_{\pm} \sim \pm (q'^2 + C_A \frac{n+8}{6} g'_0 \Lambda^{d-2}) \quad (\text{A.3})$$

Vê-se que não haverá polos se (A.3) não satisfaz (A.2). A equação (A.1) tem somente duas raízes, pois com auxílio da expressão (3.23) vê-se que $F(1, d/2-1, d/2; -x)$ é uma

função crescente e uniforme de x no intervalo $(0,1)$.

Calculando os resíduos de z_+ a contribuição de um dos polos para (5.1) é

$$\Delta\Sigma^{\text{polo}}(q, \omega_n, 0) \sim \frac{1}{3} \frac{n+2}{n+8} g'_0 C_A \frac{n+8}{6} g'_0 \frac{\Lambda^{d-2}}{2}$$

$$\begin{aligned} & * \int_{q'} \left\{ \frac{1}{z_+ (q'^2 - z_+^2)} \left[-N^0(z_+) + N^0(-z_+) \right] \right. \\ & + \frac{N^0(z_+)}{z_+} \frac{1}{(q+q')^2 - (\omega_n - z_+)^2} \\ & \left. - \frac{N^0(-z_+)}{z_+} \frac{1}{(q+q')^2 - (\omega_n + z_+)^2} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde z_+ é uma função de q' como definida em (A.3). A partir de (A.4) a auto-energia retardada é obtida substituindo-se $\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$. Usando

$$\frac{1}{(q+q')^2 - (\omega+z+i0^+)} = P \frac{1}{(q+q')^2 - (\omega+z)^2} + i\pi \text{ sinal } (\omega+z) \delta((q+q')^2 - (\omega+z)^2),$$

e observando (A.2), pode-se ver que a parte imaginária dá somente uma contribuição para q e ω da ordem de Λ , que não tem interesse no nosso caso $\omega, q \ll \Lambda$. Da mesma maneira, a parte real da auto-energia para $\omega, q \ll \Lambda$ pode ser expandida em série de Taylor e, assim, dá unicamente contribuições do tipo q^2 e ω^2 , pois termos proporcionais a q

anulam-se após a integração angular e termos proporcionais a ω cancelam devido a $\text{Re } \Delta\Sigma(q, \omega, 0) = \text{Re } \Delta\Sigma(q, -\omega, 0)$. Pelo exposto vê-se que (A.4) não dá contribuição para os termos dominantes e pode ser ignorado.

R E F E R Ê N C I A S

1. Em "Structural Phase Transitions and Soft Modes" editado por E.J.Samuelsen, E.Andersen e J.Feder (Universitetsforlaget, Oslo, 1971) estão revisados tanto trabalhos teóricos quanto experimentais, até a data de publicação.
2. G.Shirane, Rev.Mod.Phys. 46, 437 (1974) e J.F.Scott, Rev.Mod.Phys. 46, 83 (1974).
3. P.A.Fleury, Comments Solid State Phys. 4, 167 (1972) e E.Pitte, Comments Solid State Phys. 5, 41 e 57 (1973).
4. R.A.Cowley e L.P.Bruce, J.Phys. C 6, L191 (1973).
5. B.Jouvet e A.Holz, J.Phys. C 7, 1449 (1974).
6. Uma publicação prévia do presente trabalho se encontra em Phys.Letters 51A, 93 (1975) pelo autor e seu orientador; outra publicação mais completa foi aceita em J.Phys. A.
7. Veja-se, por exemplo: H.E.Stanley, "Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena" (Clarendon Press Oxford, 1971); "Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", 1971, editado por M.S. Green (Academic Press, New York e London, 1971) e também L.P. Kadanoff et al, Rev.Mod.Phys. 39, 395 (1967).
8. L.P.Kadanoff, Physics 2, 263 (1966).
9. B.I.Halperin e P.C.Hohenberg, Phys.Rev. 177, 952 (1969).
10. H.Beck, P.F.Meier e A.Thellung, Phys.Stat.Sol. (a) 24, 11 (1974).

11. W.Cochran, Adv.Phys. 9, 387 e P.W.Anderson em "Fisika Dielektrikov" editado por G.I.Skanavi (Moskow,URSS,Acad. Sci., 1960).
12. Os primeiros trabalhos por espalhamento de neutrons foram de T.Riste, E.J.Samuelsen, K.Otnes e J.Feder, Solid State Commun. 9, 1455 (1971) e S.M.Shapiro, J. D. Axe e G.Shirane em "Phonons" editado por M.A.Nusimovici (Flamarion, Paris, 1971) e por EPR por K.A.Müller e W.Berlinger, Phys.Rev.Letters 26, 13 (1971). Para maiores detalhes ver ref. 2.
13. R.Silberglitt, Solid State Commun. 11, 247 (1972).
14. C.P.Enz, Phys.Rev. B6, 4695 (1972) e P.F.Meier e H.Beck trabalho a ser publicado em Phys.Rev.
15. C.P.Enz, Solid State Commun. 15, 459 (1974).
16. F.Schwabl, Solid State Commun. 13, 181 (1973).
17. R.Falk e F.Schwabl, Solid State Commun. 15, 937 (1974).
18. T.Schneider e E.Stoll, J.Phys. C 8, 283 (1975).
19. N.S.Gillis, Phys.Rev.Letters 22, 1251 (1969). Cite-se também o trabalho recente de A.I.Sokolov, Sov.Phys.Solid State 16, 478 (1974) nesta aproximação e que mostra suas limitações.
20. Veja-se, por exemplo, Stanley na ref. 7.
21. J.N.Bierly, L.Muldawer e O.Beckman, Acta Met. 11, 447 (1963).
22. G.Shirane, R.Nathans e V.J.Minkievicz, Phys.Rev. 157, 396 (1967).
23. A.B.Recherster, JETP 32, 423 (1971).

24. D.E.Khmelnitskii e V.L.Shneerson, JETP 37, 164 (1973).
25. Veja-se, por exemplo, P.C.K.Kwok, Solid State Phys. 20, 213 (1967).
26. D.J.Wallace, J.Phys. C 6, 1390 (1973).
27. M.Suzuki e F.Tanaka, Prog.Theor.Phys. 52, 344 (1974) ; I.Kondor e P. Szépfaluzi, Phys.Letters 47A, 393 (1974); R.Abe, Prog.Theor.Phys. 52, 1463 (1974) são, na nossa o pinião, os mais importantes e recentes.
28. B.I.Halperin, P.C.Hohemberg e S.Ma, Phys.Rev. B 10, 139 (1974) e M.Suzuki, Prog.Theor.Phys. 53, 971 (1975) são, na nossa opinião, os mais importantes e recentes. Deve ser mencionado o trabalho preliminar na expansão ϵ de M.Suzuki e G.Igarashi, Phys.Letters 47A, 361 (1974).
29. M.Droz, J.Phys. C 7, 2953 (1974) que utiliza o enfoque de Migdal para fenomenos críticos. Ver também L.Sasvári e P.Szépfaluzi, J.Phys. C 7, 1061 (1974).
30. K.G.Wilson, Phys.Rev.Letters 28, 548 (1972). A mais com pleta referência é K.G.Wilson e J.Kogut, Phys.Reports 12, 75 (1974).
31. I.J.Ketley e D.J.Wallace, J.Phys. A 6, 1667 (1973) mos tram que em certas situações Δ pode ser relevante. Mas não é este o caso se a anisotropia for pequena.
32. A idéia original da expansão $1/n$ deve-se a Wilson, con forme cita S.Ma, Phys.Rev. A 6, 2172 (1972). A mais com pleta referência sobre a aproximação $1/n$ encontra-se nos artigos de Ma, em especial Rev.Mod.Phys. 45, 589 (1973). Ver, também, referências 27.
33. I.S.Gradshteyn e I.M.Ryzhik, "Tables of Integrals, Se-

- ries and Products" (Academic Press, New York, London, 1965).
34. A.Erdély, "High Transcendental Functions" (McGraw-Hill Books, New York, London, Toronto, 1953), pg. 110, expressão (12).
 35. R.Abe na referência 26.
 36. K.G.Wilson, Phys.Rev. D 7, 2911 (1973).
 37. T.Tsuneto e E.Abrahams, Phys.Rev.Letters 30, 217 (1973).
Ver também Y.Yamashita e T.Tsuneto, Prog.Theor.Phys. 51, 939 (1974).
 38. A.J.Bray, Phys.Rev.Letters 32, 1413 (1974).
 39. A.I.Larkin e D.E.Khmelnitskii, JETP 29, 1123. É digno de nota que neste trabalho introduziram, independentemente de Wilson, as idéias do grupo de renormalização em transições de fase.
 40. S.L.Ginzburg, JETP 39, 312 (1974).
 41. L.Sasvári e P.Szépfoluzy na referência 29.
 42. C. de Dominicis, Lettere al Nuovo Cimento 12, 567(1975).
 43. E.Brézin, J.C.de Guillou e J.Zinn-Justin, Phys.Rev. D8, 2419 (1973).