

Modelo esférico quântico elementar

(Elementary quantum spherical model)

P.F. Bienzobaz¹, S.R. Salinas

Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, Brasil
Recebido em 31/10/2012; Aceito em 2/3/2013; Publicado em 19/9/2013

As propriedades termodinâmicas do modelo esférico médio do ferromagnetismo, na versão de Curie-Weiss, que inclui interações entre todos os pares de variáveis de spin, podem ser obtidas de maneira exata e analisadas de forma particularmente simples e pedagógica. Torna-se então interessante considerar uma versão quântica desse modelo, que vamos denominar “modelo esférico quântico elementar”, e que também pode ser analisada detalhadamente, em termos da temperatura T e de um parâmetro g associado às flutuações quânticas. Esse sistema proporciona um dos exemplos mais simples de uma transição de fase quântica. Mantendo o estilo pedagógico, fazemos contato com diversos resultados da literatura e apresentamos comentários sobre certas questões, como a correção de anomalias do comportamento clássico e o papel do limite termodinâmico no estabelecimento de uma singularidade do “tipo Bose-Einstein”.

Palavras-chave: modelo esférico, modelo esférico quântico, transições de fase.

The thermodynamic properties of the mean spherical model of ferromagnetism, in the Curie-Weiss version, with interactions between all pairs of spin variables, can be exactly calculated and analyzed in a particularly simple and pedagogical fashion. It is then interesting to consider a quantum version of this model, which we call “elementary quantum spherical model”, and which can also be analyzed in detail, in terms of the temperature T and of a parameter g associated with the quantum fluctuations. This system provides one the simplest examples of a quantum phase transition. In a pedagogical fashion, we make contact with several results from the literature, and present a number of comments on some questions, as the correction of anomalies in the classical behavior and the role of the thermodynamic limit in the onset of a “Bose-Einstein singularity”.

Keywords: spherical model, quantum spherical model, phase transitions.

1. Introdução

Há cerca de sessenta anos era publicado o artigo clássico de Berlin e Kac [1] sobre o “modelo esférico do ferromagnetismo”, que logo se incorporou ao grupo seletivo de modelos exatamente solúveis da mecânica estatística. Marc Kac, um dos probabilistas mais eminentes do século XX, escrevendo em homenagem a Theodore Berlin [2], conta que se interessou pelo modelo de Ising logo após a publicação do trabalho famoso de Lars Onsager com a solução exata - e complicadíssima - na rede quadrada, que apontava a divergência do calor específico a uma dada temperatura crítica.

Na sua primeira proposta, tentando simplificar um problema notoriamente difícil, Kac substituiu as “variáveis binárias de spin” do modelo de Ising, de caráter discreto, por variáveis de spin contínuas, assumindo todos os valores reais, mas incluindo um “peso gaussiano” para assegurar a convergência da função de partição. Em termos bem gerais, a energia do “modelo

gaussiano” de Kac é dada pela expressão

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} - H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}, \quad (1)$$

em que as somas são realizadas sobre os N sítios de uma rede cristalina d -dimensional, os parâmetros de interação $J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \equiv J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ dependem apenas das distâncias relativas entre os sítios \mathbf{r} e \mathbf{r}' e H é o campo magnético aplicado (em unidades convenientes). A função canônica de partição associada a essa energia é dada por

$$Z_G = \left(\prod_{\mathbf{r}} \int_{-\infty}^{+\infty} dS_{\mathbf{r}} \right) \times \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} + \beta H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} - \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} b S_{\mathbf{r}}^2 \right], \quad (2)$$

em que $\beta = 1/k_B T$, T é a temperatura absoluta e k_B é a constante de Boltzmann, e as integrais (múltiplas)

¹E-mail: paulabienzobaz@gmail.com.

são realizadas sobre todo o eixo real, incluindo um termo de peso gaussiano, com o parâmetro $b > 0$ a fim de garantir a integração. A forma quadrática desse expoente é facilmente diagonalizável (veja o trabalho de Belin e Kac [1]), mas a integral diverge (torna-se complexa) abaixo de determinada temperatura crítica, mesmo na presença do peso gaussiano. Na situação ferromagnética mais simples, com interações de primeiros vizinhos ($J_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} = J > 0$, quando \mathbf{r} e \mathbf{r}' são sítios vizinhos mais próximos de uma rede hipercúbica e $J_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} = 0$ caso contrário), a “catástrofe de baixas temperaturas” ocorre para $T < T_c$, com $k_B T_c = dJ/b$.

A procura de um modelo com variáveis contínuas, mas fisicamente aceitável para qualquer temperatura, levou Kac [2] à proposta do “modelo esférico”, em que o peso gaussiano é substituído por um “vínculo esférico”,

$$\exp \left[- \sum_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} b S_{\mathbf{r}}^2 \right] \Rightarrow \delta \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 - N \right), \quad (3)$$

em que $\delta(x)$ é a “função delta” de Dirac. As variáveis (binárias) de Ising, $S_{\mathbf{r}} = \pm 1$, em que \mathbf{r} percorre os N sítios da rede, também satisfazem esse vínculo, mas no modelo esférico as configurações microscópicas $\{S_{\mathbf{r}}\}$ assumem um enorme contínuo de valores. Pode-se imaginar uma estrutura hipercúbica, num espaço N -dimensional, cujos vértices representariam as configurações das variáveis de spin do modelo de Ising. Nesse espaço as configurações das variáveis de spin do modelo esférico pertencem à hipersfera

$$\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 = N, \quad (4)$$

que circunscreve o hipercubo das configurações de Ising.

A função canônica de partição do modelo esférico é dada pela expressão

$$Z_E = \left(\prod_{\mathbf{r}} \int_{-\infty}^{\infty} dS_{\mathbf{r}} \right) \times \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} J_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} + \beta H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right] \delta \left(N - \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 \right). \quad (5)$$

Berlin e Kac [1] utilizaram uma representação integral da função delta,

$$\delta \left(N - \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 \right) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} ds \exp \left[s \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 \right) \right], \quad (6)$$

para escrever Z_E na forma de uma integral de ponto de sela e obtiveram um resultado assintótico no limite termodinâmico. Segundo Kac, essa foi uma das primeiras aplicações controladas do “método do ponto de sela”, que na época ainda era visto com certa desconfiança nos círculos matemáticos. O modelo é definido para qualquer temperatura, podendo existir uma fase

ordenada (ferromagnética), com campo nulo, abaixo de determinada temperatura crítica. A solução exata do modelo esférico pode ser obtida em qualquer dimensão, inclusive na presença de campo magnético externo [3]. O comportamento crítico, que é distinto do padrão clássico de Landau, e o mecanismo da transição podem ser analisados em detalhe, transformando o modelo esférico num excelente laboratório de estudos sobre transições de fases e fenômenos críticos.

Uma formulação alternativa, conhecida como “modelo esférico médio”, que de certa forma consiste numa mudança de ensembles, foi proposta logo depois por Lewis e Wannier [4, 5], conduzindo essencialmente aos mesmos resultados termodinâmicos do modelo esférico usual no ensemble canônico. Esse “modelo esférico médio” é definido pela função de partição

$$Z_{EM} = \left(\prod_{\mathbf{r}} \int_{-\infty}^{+\infty} dS_{\mathbf{r}} \right) \times \exp \left[\frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} J_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} + \beta H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 \right], \quad (7)$$

em que foi introduzido um “potencial químico” μ , com a finalidade de assegurar o “vínculo esférico médio”,

$$\left\langle \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 \right\rangle = - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z_{EM} = N. \quad (8)$$

É importante enfatizar a diferença em relação ao modelo original: no modelo esférico médio as variáveis de spin ocupam apenas em média a superfície de uma esfera em N dimensões. Embora existam algumas discrepâncias entre os resultados obtidos a partir do modelo esférico e do modelo esférico médio, essas discrepâncias não se relacionam com as grandezas termodinâmicas usuais, como a magnetização e a suscetibilidade [5, 6]. Um apanhado bastante completo de estudos sobre os modelos esférico e esférico médio pode ser encontrado no artigo de revisão de G.S. Joyce [3].

Há muito tempo se notou que o modelo esférico - na realidade, qualquer modelo paramagnético de “spins” contínuos - apresenta anomalias a baixas temperaturas, inclusive valores negativos da entropia, que poderiam ser corrigidas pela introdução de vínculos quânticos entre as variáveis de spin [7]. Nos últimos anos, o interesse pelas transições de fase e fenômenos críticos de natureza quântica provocou novas propostas e análises de várias versões do modelo esférico quântico [8–10]. Foram então estudadas diversas situações: modelos com frustração [11, 12] ou com interações de caráter competitivo [13]; mudanças na topologia do diagrama de fases devido à presença de campos aleatórios [14] ou de certas escolhas de interações desordenadas [15, 16]; cadeias ferrimagnéticas na presença de interações competitivas [17]. Em particular, vamos nos referir a dois trabalhos que analisam o comportamento crítico de uma versão

quântica do modelo esférico médio [10, 18]. Nós retomamos esses trabalhos, investigando um modelo ainda mais simples, uma forma quantizada do modelo esférico médio com interações de campo médio, do tipo Curie-Weiss. Esse “modelo esférico quântico elementar” pode ser tratado analiticamente com facilidade e muito detalhe, constituindo um exemplo pedagógico dos mecanismos de transição de fase associados ao modelo esférico.

Na seção 2, apresentamos a solução do modelo esférico médio com interações do tipo Curie-Weiss, que pode ser obtida, através de integrais gaussianas, para qualquer valor de N . Apresentamos também a solução mais comum do modelo esférico médio, através de uma representação de Fourier das variáveis de spin, recuperando os resultados anteriores no “limite de Curie-Weiss”. Além disso, fazemos alguns comentários sobre resultados no ensemble canônico, com referência a trabalho recente de Kastner e Schnetz [19]. Obtemos em seguida as principais funções termodinâmicas em termos da temperatura e mostramos, por exemplo, a violação da terceira lei da termodinâmica. Em toda essa análise apontamos o papel do limite termodinâmico no mecanismo de transição de fase. Qualquer aluno no final da graduação, que tenha sido exposto ao “método de Fourier” e cursado uma disciplina introdutória de física térmica, deve ser capaz de acompanhar os nossos raciocínios.

O “modelo esférico quântico elementar” é introduzido na seção 3. O trabalho de Vojta [10] proporcionou a nossa motivação para partir da representação de Fourier e utilizar um método de quantização canônica, reduzindo o problema a um sistema de osciladores harmônicos independentes. Apontamos que a mesma função de partição também pode ser obtida através de um esquema de integração funcional [20, 21], que tem sido muito utilizado como ponto de partida para cálculos perturbativos em modelos da mecânica estatística quântica. No modelo esférico quântico elementar, as funções termodinâmicas são analisadas em termos da temperatura T e de um parâmetro g associado às flutuações de natureza quântica. Obtemos diversos resultados analíticos e recuperamos os resultados clássicos, devidamente corrigidos a baixas temperaturas.

2. Modelo esférico médio na versão de Curie-Weiss

Na versão de Curie-Weiss, todos os pares de sítios interagem igualmente, com uma energia de interação inversamente proporcional a N (para que não haja problemas no limite termodinâmico). Em outras palavras, introduzimos uma “deformação” no termo de interação entre pares,

$$J_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \implies \frac{1}{N}J, \quad (9)$$

que reduz a hamiltoniana clássica do problema à expressão

$$\mathcal{H}(\{S_{\mathbf{r}}\}) = -\frac{J}{2N} \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right)^2 - H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}, \quad (10)$$

com $J > 0$ no caso ferromagnético.

A função de partição associada à versão de Curie-Weiss do modelo esférico médio é dada por

$$Z_N(\beta, H, \mu) = \left(\prod_{\mathbf{r}} \int_{-\infty}^{\infty} dS_{\mathbf{r}} \right) \times \exp \left[\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right)^2 + \beta H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 \right]. \quad (11)$$

Apelamos agora para a identidade gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2 + 2ax) dx = \sqrt{\pi} \exp(a^2), \quad (12)$$

que pode ser demonstrada completando o quadrado, fazendo uma transformação de variável, e utilizando a integral de Gauss, também conhecida como teste de Liouville, que faz parte da cultura geral de todo físico teórico,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2 + 2ax) dx = \\ & \exp(a^2) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2 + 2ax - a^2) dx = \\ & = \exp(a^2) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y^2) dy. \end{aligned} \quad (13)$$

Torna-se então trivial fazer todas as integrações (do tipo gaussiano), e obter a forma analítica

$$Z_N(\beta, H, \mu) = \left(\frac{\pi}{\beta} \right)^{N/2} \times \exp \left[\frac{N\beta H^2}{4(\mu - \frac{J}{2})} \right] \left(\frac{1}{\mu} \right)^{\frac{N-1}{2}} \left(\mu - \frac{J}{2} \right)^{-1/2}, \quad (14)$$

que é válida para $\mu > J/2$ e para qualquer N . O valor $\mu = J/2$ deve ser reconhecido como um potencial químico crítico.

A partir do vínculo esférico, Eq. (8), obtemos

$$\beta = \frac{\beta H^2}{4(\mu - \frac{1}{2}J)^2} + \frac{N-1}{N} \frac{1}{2\mu} + \frac{1}{2N} \frac{1}{(\mu - \frac{1}{2}J)}, \quad (15)$$

que permite escrever uma expressão de μ em função de β e H para qualquer valor de N . O limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, para $\mu > J/2$, deve ser tomado com cautela, principalmente quando $H \rightarrow 0$ e $\mu \rightarrow J/2$.

Essas questões de limite, que também aparecem no contexto da transição de Bose-Einstein, sempre se colocam na análise do comportamento crítico do modelo esférico. No nosso caso a situação é particularmente

simples. Por exemplo, com $H = 0$, mantendo o número N fixo, temos a condição de vínculo

$$\beta = \frac{1}{2\mu} + \frac{1}{N} \frac{J}{4\mu(\mu - \frac{1}{2}J)}, \quad (16)$$

que é válida apenas para $\mu > J/2$. Essa equação é tão simples, que nos permite escrever uma expressão analítica para μ em função de β , para qualquer valor de N , e ilustrar graficamente a singularidade (ver a Fig. 1). No limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, temos um comportamento singular,

$$\mu = \begin{cases} J/2, & \beta > 1/J, \\ 1/(2\beta), & \beta < 1/J, \end{cases}, \quad (17)$$

em que $\beta_c = 1/J$ define a temperatura crítica ($k_B T_c = J$). Esse é o mecanismo característico da transição no modelo esférico: a campo nulo, no limite termodinâmico, o potencial químico μ “gruda” no valor constante $J/2$; na presença de um campo externo, $H \neq 0$, é fácil perceber que $\mu = \mu(\beta, H) > J/2$ é uma função lisa da temperatura.

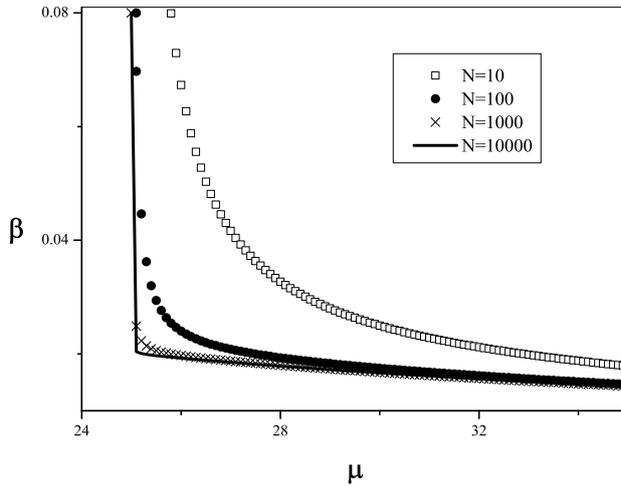


Figura 1 - Gráfico ilustrativo (β contra μ para valores crescentes de N) do mecanismo de formação da singularidade no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$).

Em resumo, o modelo esférico na versão de Curie-Weiss é um exemplo particularmente simples que ilustra o mecanismo de formação de uma singularidade no limite termodinâmico. O mesmo mecanismo define a transição do modelo esférico ferromagnético na presença de interações de curto alcance [18]. Esse também é o mecanismo da transição de Bose-Einstein num gás ideal de bóson livres (ver, por exemplo, o trabalho clássico de Fritz London [22] ou a discussão sobre a condensação de Bose-Einstein no capítulo 12 do texto de mecânica estatística de Kerson Huang [23]).

A seguir, mantendo o estilo pedagógico, introduzimos uma representação de Fourier para obter a função de partição do modelo esférico médio com uma forma bem geral de interações dependendo da distância entre

pares (ou seja, incluímos nessa análise o modelo esférico “realista”, com interações de curto alcance, na linha da solução original de Berlin e Kac). No caso particular das interações de campo médio, recuperamos os resultados anteriores. Mencionamos também a equivalência entre ensembles e analisamos o comportamento de algumas grandezas termodinâmicas na região crítica.

2.1. Representação de Fourier para o modelo esférico médio

Na literatura mais recente [3], a solução do modelo esférico tem sido obtida através da introdução de uma representação de Fourier para as variáveis de spin. Vamos então adotar condições periódicas de contorno e escrever

$$S_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \hat{S}_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad (18)$$

em que o vetor \mathbf{q} está restrito à primeira zona de Brillouin de uma rede hipercúbica em d dimensões. Em termos gerais, temos que diagonalizar a forma quadrática

$$Q = \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} + \beta H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2, \quad (19)$$

em que $J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} = J(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ depende apenas da distância entre os sítios. Lançando mão da representação de Fourier, não deve ser difícil verificar que

$$Q = \frac{\beta}{2} \sum_{\mathbf{q}} \hat{J}(\mathbf{q}) \hat{S}_{\mathbf{q}} \hat{S}_{-\mathbf{q}} + \beta H N^{-1/2} \hat{S}_{\mathbf{0}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{q}} \hat{S}_{\mathbf{q}} \hat{S}_{-\mathbf{q}}, \quad (20)$$

com

$$\hat{J}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{h}} J(\mathbf{h}) \exp(i\mathbf{r} \cdot \mathbf{h}), \quad (21)$$

em que $\mathbf{h} = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Para obter a função de partição, ainda é conveniente escrever a Eq. (20) na forma

$$Q = 2 \sum_{\mathbf{q} > 0} \left[\frac{1}{2} \beta \hat{J}(\mathbf{q}) - \beta \mu \right] |\hat{S}_{\mathbf{q}}|^2 + \left[\frac{1}{2} \beta \hat{J}(\mathbf{0}) - \beta \mu \right] \hat{S}_{\mathbf{0}}^2 + \beta H N^{-1/2} \hat{S}_{\mathbf{0}}, \quad (22)$$

em que a somatória se refere apenas a metade da zona de Brillouin, excluindo $\mathbf{q} = 0$.

Vamos agora introduzir a transformação de variáveis

$$\hat{S}_{\mathbf{q}} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x_{\mathbf{q}} + iy_{\mathbf{q}}); \quad \mathbf{q} \neq 0, \quad (23)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{0}} \equiv x_0.$$

É fácil mostrar que $\{x_{\mathbf{q}}, y_{\mathbf{q}}\}$ é um conjunto de variáveis reais e que a transformação $\{S_{\mathbf{q}}\} \rightarrow \{x_{\mathbf{q}}, y_{\mathbf{q}}\}$ é de fato ortogonal, pois

$$\sum_{\mathbf{q}} S_{\mathbf{q}}^2 = x_0^2 + \sum_{\mathbf{q} > 0} (x_{\mathbf{q}}^2 + y_{\mathbf{q}}^2). \quad (24)$$

Em termos das variáveis reais $\{x_{\mathbf{q}}, y_{\mathbf{q}}\}$, escrevemos a função de partição do modelo esférico médio,

$$Z_N = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_0 \prod_{\mathbf{q}>0} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} dx_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_{\mathbf{q}} \right] \exp[Q], \quad (25)$$

que se reduz a um conjunto trivial de integrais gaussianas independentes,

$$Z_N = \left[\frac{\pi}{\beta\mu - \frac{\beta}{2}\hat{J}(0)} \right]^{1/2} \times \exp \left\{ \frac{\beta^2 H^2 N}{4 \left[\beta\mu - \frac{\beta}{2}\hat{J}(0) \right]} \right\} \prod_{\mathbf{q}>0} \ln \left[\frac{\pi}{\beta\mu - \frac{\beta}{2}\hat{J}(\mathbf{q})} \right]. \quad (26)$$

Portanto,

$$\frac{1}{N} \ln Z_N = \frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[\beta\mu - \frac{1}{2}\beta\hat{J}(\mathbf{q}) \right] + \frac{\beta^2 H^2}{4 \left[\beta\mu - \frac{1}{2}\beta\hat{J}(0) \right]}, \quad (27)$$

que concorda com as expressões correspondentes da literatura [3]. Nessa formulação, é fácil verificar que o vínculo esférico é dado por

$$\beta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\mu - \frac{1}{2}\hat{J}(\mathbf{q})} + \frac{\beta H^2}{4 \left[\mu - \frac{1}{2}\hat{J}(0) \right]^2}. \quad (28)$$

Quando particularizamos para o caso de interações de campo médio, do tipo Curie-Weiss, $J_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} = J/N$ para quaisquer r e r' , é imediato mostrar que $\hat{J}(\mathbf{q}) = J\delta_{\mathbf{q},0}$, e que a condição do vínculo esférico se reduz a

$$\beta = \frac{1}{2N} \frac{1}{\left(\mu - \frac{J}{2}\right)} + \frac{N-1}{2N} \frac{1}{\mu} + \frac{\beta H^2}{4 \left(\mu - \frac{J}{2}\right)^2}, \quad (29)$$

que é a mesma expressão (15) obtida anteriormente para a versão de Curie-Weiss do modelo esférico médio.

2.2. Modelo esférico no ensemble canônico

Para ilustrar a equivalência entre os ensembles usamos a forma quadrática (20) e a representação integral da função delta, substituindo o fator $\beta\mu$ pela variável de integração s , e escrevemos a função de partição do modelo esférico no ensemble canônico,

$$Z_E = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} ds \exp \left\{ sN + \frac{1}{2}N \ln \pi - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[s - \frac{1}{2}\beta\hat{J}(\mathbf{q}) \right] + \frac{\beta^2 H^2 N}{4 \left[s - \frac{1}{2}\beta\hat{J}(0) \right]} \right\}, \quad (30)$$

que é uma expressão válida para qualquer valor de N . No limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, o ponto de sela, que fornece o resultado assintótico, é dado pela relação

$$\beta = \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\frac{1}{\beta}s - \frac{1}{2}\hat{J}(\mathbf{q})} + \frac{\beta H^2}{4 \left[\frac{1}{\beta}s - \frac{1}{2}\hat{J}(0) \right]}, \quad (31)$$

que representa o vínculo esférico obtido anteriormente, Eq. (28), com $s = \beta\mu$. De acordo com Yan e Wanier [6], a equivalência dos resultados termodinâmicos é garantida se o limite termodinâmico for sempre tomado antes do limite de campo nulo ($H \rightarrow 0$).

Na versão de Curie-Weiss, $\hat{J}(\mathbf{q}) = J\delta_{\mathbf{q},0}$, a função de partição canônica (30) assume a forma

$$Z_{ECW} = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{+i\infty} ds \exp \left[sN + \frac{1}{2}N \ln \pi - \frac{1}{2} \ln \left(s - \frac{\beta J}{2} \right) - \frac{1}{2} (N-1) \ln s + \frac{\beta^2 H^2 N}{4 \left(s - \frac{\beta J}{2} \right)} \right], \quad (32)$$

com a equação de ponto de sela

$$\beta = \frac{1}{2N} \frac{1}{\frac{1}{\beta}s - \frac{1}{2}J} + \frac{N-1}{2N} \frac{1}{\frac{1}{\beta}s} + \frac{\beta H^2}{4 \left[\frac{1}{\beta}s - \frac{1}{2}J \right]}, \quad (33)$$

que corresponde à condição esférica obtida anteriormente, Eq. (15), com $s = \beta\mu$. Kastner e Schnetz [19] escreveram Z_{ECW} numa forma integral mais simples,

$$Z_{ECW} = \frac{\Gamma\left(\frac{N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right) \sqrt{\pi}} \int_{-1}^{+1} dz (1-z^2)^{\frac{N-3}{2}} \times \exp \left[\beta N z \left(\frac{1}{2}z + H \right) \right]. \quad (34)$$

Embora essa expressão seja válida para qualquer N , incluindo N finito, a solução final é complicada, pois acaba sendo expressa em termos de uma soma infinita de funções hipergeométricas confluentes.

2.3. Comportamento termodinâmico

Obtemos agora algumas propriedades termodinâmicas e analisamos o comportamento crítico do modelo esférico médio de Curie-Weiss.

2.3.1. Magnetização e suscetibilidade

Para N fixo, a magnetização (adimensional, por sítio) é dada por

$$m_N \equiv \left\langle \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right\rangle = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln Z_N = \frac{H}{2 \left(\mu - \frac{1}{2}J \right)}. \quad (35)$$

Para $H = 0$, m_N é zero acima da temperatura crítica, $T > T_c$, pois $\mu > J/2$. A campo nulo, abaixo da temperatura crítica, essa expressão de m_N pode conduzir a uma indeterminação, pois $\mu \rightarrow J/2$. Portanto,

para $T < T_c$ devemos recorrer à expressão do vínculo, Eq. (15), que pode ser escrita na forma

$$\beta = \beta m_N^2 + \frac{N-1}{N} \frac{1}{2\mu} + \frac{1}{2N} \frac{1}{\mu - \frac{J}{2}}. \quad (36)$$

No limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$), mesmo com $H \neq 0$, temos $m_N \rightarrow m$, em que m é a magnetização termodinâmica. Então

$$m^2 = 1 - \frac{1}{2\beta\mu}. \quad (37)$$

A partir da Eq. (37), obtemos a magnetização espontânea na região $T < T_c$, com $H = 0$ e $\mu = J/2$,

$$m_0 = \pm \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{1/2}, \quad (38)$$

em que $k_B T_c = J$ e o expoente crítico, $\beta = 1/2$, é o valor característico do comportamento de campo médio.

A partir da magnetização, obtemos a suscetibilidade para N fixo,

$$\chi_N = \left(\frac{\partial m_N}{\partial H}\right)_{T,\mu} = \frac{1}{2(\mu - \frac{J}{2})}. \quad (39)$$

Para $H = 0$, acima da temperatura crítica, a suscetibilidade termodinâmica, $\chi_N \rightarrow \chi$, é dada por

$$\chi_0 = \frac{\beta}{1 - \beta J} = \frac{1}{k_B T_c} \left(\frac{T}{T_c} - 1\right)^{-1}, \quad (40)$$

com $2\beta\mu = 1$. Temos então o expoente crítico associado à suscetibilidade acima da temperatura crítica, $\gamma = 1$, de acordo com a previsão de campo médio. Abaixo da temperatura crítica, levando em conta que $\mu = J/2$, a suscetibilidade a campo nulo se torna infinita, que é um resultado característico do modelo esférico do ferromagnetismo.

Em resumo, os resultados obtidos para a magnetização e para a suscetibilidade, acima e abaixo da temperatura crítica, com exceção dos valores dos expoentes críticos de campo médio, são também formas típicas para o modelo esférico ferromagnético com interações de curto alcance (em redes de dimensão $d \geq 3$).

2.3.2. Entropia e calor específico

Para N fixo, a entropia é dada por

$$\begin{aligned} s_N &= - \left(\frac{\partial \phi_N}{\partial T}\right)_{H,\mu} \\ &= -\frac{1}{2\beta} \ln \frac{\pi}{\beta} - \frac{H^2}{4(\mu - \frac{J}{2})} + \\ &\quad \frac{1}{\beta} \frac{N-1}{2N} \ln \mu + \frac{1}{2\beta N} \ln \left(\mu - \frac{J}{2}\right). \end{aligned} \quad (41)$$

Para $H = 0$, temos

$$s_N = k_B \left[\frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2} \ln \beta + \frac{1}{2} - \frac{N-1}{2N} \ln \mu - \frac{1}{2N} \ln \left(\mu - \frac{J}{2}\right) \right]. \quad (42)$$

Vamos agora analisar o comportamento crítico acima e abaixo da temperatura crítica:

(i) para $T > T_c$, temos $\mu = 1/(2\beta)$. Então

$$\begin{aligned} s(T, H = 0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} s_N(T, H = 0) = \\ &= k_B \left(\frac{1}{2} \ln \pi - \frac{1}{2} \ln \beta + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \ln \mu \right) = \\ &\quad \frac{1}{2} k_B [\ln(2\pi) + 1]. \end{aligned} \quad (43)$$

Nesse caso a entropia é uma constante, independente da temperatura;

(ii) Para $T < T_c$, temos $\mu = J/2 = k_B T_c/2$. Obtemos então a entropia

$$s(T, H = 0) = \frac{1}{2} k_B \left[\ln \left(\frac{2\pi T}{T_c} \right) + 1 \right], \quad (44)$$

que se torna negativa e diverge no limite $T \rightarrow 0$.

Esses resultados são bem conhecidos [10] [18]. Acima da temperatura crítica, com $H = 0$, a entropia é uma constante e o calor específico se anula. Abaixo da temperatura crítica, a entropia depende da temperatura logaritmicamente e o calor específico é constante, com uma descontinuidade na temperatura crítica. A Fig. 2 ilustra o comportamento do calor específico em função da temperatura para $H = 0$. No modelo esférico ferromagnético com interações de curto alcance, o calor específico ainda é constante abaixo da temperatura crítica, mas não há descontinuidade, apenas um decaimento suave para $T > T_c$.

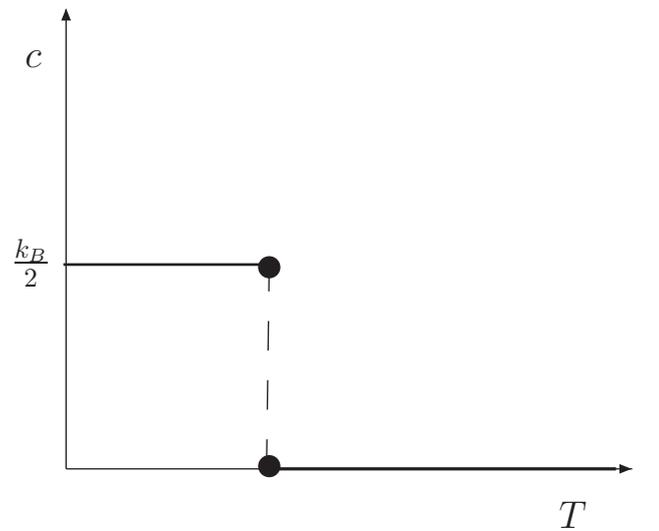


Figura 2 - Dependência com a temperatura do calor específico a campo nulo.

3. Modelo esférico quântico elementar

As transições de fase quânticas ocorrem a temperatura nula, em função de algum parâmetro não térmico, como a pressão, composição química ou campo magnético. Em contraste com as transições clássicas, associadas às flutuações térmicas, as transições quânticas estão associadas a flutuações de natureza quântica, que são uma consequência do princípio de incerteza de Heisenberg. As transições de fase de caráter térmico, que ocorrem a temperatura finita, têm sido estudadas desde o final do século XIX, dando origem a fenômenos críticos razoavelmente bem compreendidos. As transições de fase quânticas são menos conhecidas, mas têm despertado bastante interesse. Vamos então analisar uma transição de fase de caráter quântico, considerando um modelo muito simples, uma versão quântica do modelo esférico médio com interações do tipo Curie-Weiss, que nós denominamos “modelo esférico quântico elementar”. Como a literatura registra abordagens diferentes para a quantização do modelo esférico, vamos inicialmente utilizar o método mais convencional de quantização canônica no espaço de Fourier. Também conseguimos mostrar que os mesmos resultados podem ser obtidos através da técnica de integrais de trajetória, embora nesse caso os detalhes de cálculo estejam além dos objetivos desse trabalho.

3.1. Quantização canônica

A versão quântica do modelo esférico pode ser obtida a partir da hamiltoniana efetiva clássica adicionando um termo de energia cinética, que contém “variáveis de momento” e que é governado por um parâmetro (quântico) g . Em termos gerais, escrevemos a hamiltoniana quântica

$$\mathcal{H}_{EQ} = \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} - H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}, \quad (45)$$

em que tanto $\{S_{\mathbf{r}}\}$ quanto as novas variáveis $\{p_{\mathbf{r}}\}$ são interpretadas como operadores quânticos canonicamente conjugados, obedecendo as regras de comutação

$$[S_{\mathbf{r}}, S_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [p_{\mathbf{r}}, p_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [S_{\mathbf{r}}, p_{\mathbf{r}'}] = i\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}, \quad (46)$$

e a hamiltoniana clássica é recuperada no limite $g \rightarrow 0$ (para simplificar a notação, somente quando houver margem de engano é que vamos usar símbolos especiais para os operadores quânticos). É importante enfatizar que as “variáveis de spin” do modelo esférico são números reais, positivos ou negativos, que não devem ser confundidos com as componentes de um hipotético momento angular. Em outras palavras, o termo “variáveis de spin” é uma linguagem metafórica comum na área de mecânica estatística, mas as variáveis de spin não precisam satisfazer uma álgebra de momentos angulares.

Na versão ferromagnética de Curie-Weiss, com $J > 0$, a hamiltoniana quântica assume a forma

$$\mathcal{H}_{EQCW} = \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 - \frac{J}{2N} \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right)^2 - H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}. \quad (47)$$

Para obter a função de partição associada ao “modelo esférico quântico elementar”, temos então que diagonalizar a forma quadrática

$$Q_{CW} = -\frac{\beta g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 + \frac{\beta J}{2N} \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right)^2 + \beta H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} - \beta \mu \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2, \quad (48)$$

em que \mathbf{r} designa um vetor da rede hipercúbica em d dimensões. No esquema canônico, as variáveis de spin e de momento devem ser escritas em termos de operadores de criação, $a_{\mathbf{r}}^{\dagger}$, e aniquilação, $a_{\mathbf{r}}$,

$$S_{\mathbf{r}} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} (a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger}) \quad (49)$$

e

$$p_{\mathbf{r}} \equiv \frac{-i}{\sqrt{2}} \left(\frac{2\mu}{g} \right)^{1/4} (a_{\mathbf{r}} - a_{\mathbf{r}}^{\dagger}), \quad (50)$$

com as relações de comutação

$$[a_{\mathbf{r}}, a_{\mathbf{r}'}] = 0, \quad [a_{\mathbf{r}}^{\dagger}, a_{\mathbf{r}'}^{\dagger}] = 0, \quad [a_{\mathbf{r}}, a_{\mathbf{r}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}. \quad (51)$$

Dessa maneira, temos

$$Q_{CW} = -\beta(2g\mu)^{1/2} \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}} + 1/2) + \frac{\beta H}{\sqrt{2}} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \sum_{\mathbf{r}} (a_{\mathbf{r}} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger}) + \frac{\beta J}{4N} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \times \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} (a_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}'} + a_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}'}^{\dagger} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}'} + a_{\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\mathbf{r}'}^{\dagger}). \quad (52)$$

Adotando condições periódicas de contorno e introduzindo a representação de Fourier,

$$a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \exp(i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}) \hat{a}_{\mathbf{q}}, \quad (53)$$

com a soma restrita à primeira zona de Brillouin, temos

$$Q_{CW} = -\beta(2g\mu)^{1/2} \sum_{\mathbf{q}} \hat{a}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{q}} + \beta H \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/4} \left(\frac{N}{2} \right)^{1/2} \times \left(\hat{a}_0 + \hat{a}_0^{\dagger} \right) + \frac{\beta J}{4} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_0^{\dagger} \hat{a}_0^{\dagger} + 2\hat{a}_0^{\dagger} \hat{a}_0 + 1 \right) - \frac{\beta N}{2} (2g\mu)^{1/2}, \quad (54)$$

que ainda não está diagonalizada devido ao termo de momento nulo.

Para diagonalizar essa forma quadrática, é conveniente usar uma transformação de Bogoliubov,

$$\begin{aligned}\hat{c}_0 &= u\hat{a}_0 - v\hat{a}_0^\dagger + w, \\ \hat{c}_0^\dagger &= u\hat{a}_0^\dagger - v\hat{a}_0 + w,\end{aligned}\quad (55)$$

em que u , v e w são variáveis reais a serem determinadas (w representa uma translação simples, para dar conta do termo de campo), e as relações (bosônicas) de comutação são garantidas com a escolha $u^2 - v^2 = 1$. Os termos não diagonais podem ser eliminados com a escolha

$$u^2 = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left(\frac{4\mu}{J} - 1 \right) \left[\left(\frac{4\mu}{J} - 1 \right)^2 - 1 \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (56)$$

$$v^2 = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left(\frac{4\mu}{J} - 1 \right) \left[\left(\frac{4\mu}{J} - 1 \right)^2 - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (57)$$

e

$$w^2 = \frac{H^2 N}{2} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \frac{1}{2g\mu} \left(1 - \frac{J}{2\mu} \right)^{-2}, \quad (58)$$

em que $\mu > J/2$, como no caso clássico. A partir desses resultados, podemos escrever a Eq. (54) em uma forma mais compacta, completamente diagonalizada,

$$Q_{CW} = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left(\hat{c}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) - \frac{H^2 N}{4 \left[\mu - \frac{J}{2} \right]}, \quad (59)$$

em que $\omega_{\mathbf{q}}$ é a frequência do modo \mathbf{q} ,

$$\omega_{\mathbf{q}} = \begin{cases} \omega_0 = (2g\mu)^{1/2} \left(1 - \frac{J}{2\mu} \right)^{1/2}; & \mathbf{q} = 0, \\ \omega = (2g\mu)^{1/2}; & \mathbf{q} \neq 0. \end{cases} \quad (60)$$

É fácil notar que a frequência ω_0 é real apenas para $\mu > J/2$, definindo o mesmo valor crítico $\mu_c = J/2$ obtido no caso clássico.

A função de partição (grande canônica) é formalmente escrita como um traço matricial no espaço (de Fock) dos números de ocupação,

$$\begin{aligned}\Xi_{QE} &= \Xi_N(\beta, g, H, \mu) = Tr \times \\ &\exp \left[-\beta \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} \left(\hat{n}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\beta N H^2}{4 \left(\mu - \frac{J}{2} \right)} \right],\end{aligned}\quad (61)$$

em que $\hat{n}_{\mathbf{q}} = \hat{c}_{\mathbf{q}}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{q}}$ é o operador número. Devido à fatorização da forma diagonal, o cálculo desse traço é imediato,

$$\begin{aligned}\Xi_{QE} &= \exp \left[\frac{\beta N H^2}{4 \left(\mu - \frac{J}{2} \right)} \right] \times \\ &\prod_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{n_{\mathbf{q}}=0}^{\infty} \exp \left[-\beta \omega_{\mathbf{q}} \left(n_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right) \right] \right\},\end{aligned}\quad (62)$$

ou seja,

$$\begin{aligned}\Xi_{QE} &= \exp \left[\frac{\beta N H^2}{4 \left(\mu - \frac{J}{2} \right)} \right] 2^{-N} \left(\sinh \frac{\beta \omega_0}{2} \right)^{-1} \times \\ &\left(\sinh \frac{\beta \omega}{2} \right)^{-N+1},\end{aligned}\quad (63)$$

que é válida para $\mu > J/2$ e qualquer valor de N . A “energia livre” por sítio é dada por

$$\begin{aligned}\phi_N &= -\frac{H^2}{4 \left(\mu - \frac{J}{2} \right)} + \frac{1}{\beta} \ln 2 + \frac{1}{N\beta} \ln \sinh \frac{\beta \omega_0}{2} + \\ &\frac{1}{\beta} \frac{N-1}{N} \ln \sinh \frac{\beta \omega}{2}.\end{aligned}$$

Temos ainda a condição esférica

$$\begin{aligned}1 &= \frac{H^2}{4 \left(\mu - \frac{J}{2} \right)^2} + \frac{1}{N} \frac{g}{2\omega_0} \coth \left(\frac{\beta \omega_0}{2} \right) + \\ &\frac{N-1}{2N} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \coth \left(\frac{\beta \omega}{2} \right).\end{aligned}\quad (64)$$

No limite $g \rightarrow 0$, recuperamos o caso clássico, dado pela Eq. (15). Nesse limite clássico, no entanto, a “energia livre” apresenta um termo extra, proporcional a $\ln \beta g$, que não aparece na solução clássica. Esse termo representa uma contribuição adicional devido à quantização, corrigindo o comportamento do modelo clássico a baixas temperaturas. No limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$, a Eq. (64) conduz ao mesmo tipo de singularidade do caso clássico (note que $\omega_0 \rightarrow 0$ quando $\mu \rightarrow J/2$).

Para $N \rightarrow \infty$, lembrando que $\mu > J/2$, temos

$$1 = \frac{H^2}{4 \left(\mu - \frac{J}{2} \right)^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{g}{2\mu} \right)^{1/2} \coth \left(\frac{\beta \omega}{2} \right). \quad (65)$$

Num diagrama $g - T$, a transição de fase ocorre com $H = 0$ ao longo de uma curva crítica, dada por

$$1 = \frac{1}{2} \left(\frac{g}{J} \right)^{1/2} \coth \left[\frac{(gJ)^{1/2}}{2k_B T} \right], \quad (66)$$

que está ilustrada na Fig. 3. Note que a temperatura crítica clássica é devidamente recuperada no limite $g \rightarrow 0$ e que $g_c = 4J$ no limite $T \rightarrow 0$.

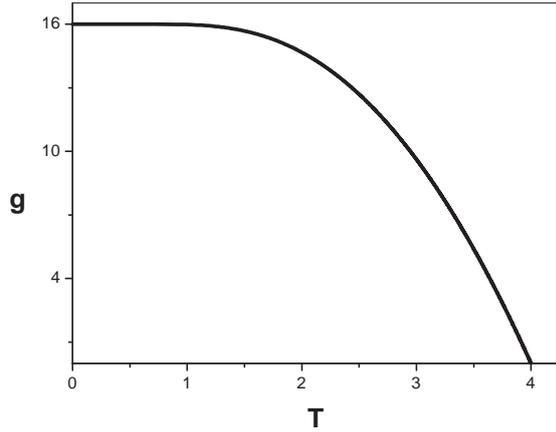


Figura 3 - Diagrama $g-T$ do modelo esférico quântico elementar (gráfico em termos de g/J contra $k_B T/J$, com um valor apropriado de J).

3.2. Formalismo de integração funcional

Também podemos obter a mesma função de partição, dada pela equação (63), através de uma aplicação do formalismo de integração funcional, que tem sido muito utilizado no estudo de problemas de mecânica estatística quântica [21].

Escrevendo a hamiltoniana efetiva associada ao sistema,

$$\mathcal{H} = \frac{g}{2} \sum_{\mathbf{r}} p_{\mathbf{r}}^2 - \frac{J}{2N} \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right)^2 - H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} + \mu \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2,$$

e utilizando uma transformação de Legendre,

$$\mathcal{L} = -\mathcal{H} + \sum_{\mathbf{r}} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_{\mathbf{r}}} p_{\mathbf{r}},$$

obtemos a Lagrangiana

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2g} \sum_{\mathbf{r}} \dot{S}_{\mathbf{r}}^2 + \frac{J}{2N} \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right)^2 + H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} - \mu \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2, \quad (67)$$

que é ponto de partida para a aplicação do formalismo das integrais de trajetória [20].

Embora os detalhes de cálculo estejam além dos objetivos desse artigo, vamos pelo menos registrar os nossos resultados. Introduzindo um tempo imaginário $t \rightarrow -i\tau$, é possível escrever a função de partição

$$Z = \int \left(\prod_{\mathbf{r}} \mathcal{D}S_{\mathbf{r}}(\tau) \right) \exp \left\{ \int_0^\beta d\tau \left[-\frac{1}{2g} \sum_{\mathbf{r}} \left(\frac{\partial S_{\mathbf{r}}(\tau)}{\partial \tau} \right)^2 + \frac{J}{2N} \left(\sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}(\tau) \right)^2 + H \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}(\tau) - \mu \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2(\tau) \right] \right\}, \quad (68)$$

em que adotamos condições periódicas de contorno, $S_{\mathbf{r}}(0) = S_{\mathbf{r}}(\beta)$. Introduzindo agora a representação de Fourier

$$S_{\mathbf{r}}(\tau) = \left(\frac{\beta}{N} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{\mathbf{q}, w} \exp [i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \tau w)] S_{\mathbf{q}}(w), \quad (69)$$

em que \mathbf{q} pertence à primeira zona de Brillouin e $w \equiv w_n = 2n\pi/\beta$, com n inteiro, é a frequência de Matsubara, podemos escrever

$$Z = \int \left(\prod_{n=-\infty}^{\infty} \prod_{\mathbf{q}} dS_{\mathbf{q}}(w_n) \right) \exp \left[- \sum_{\mathbf{q}, n} \left(\frac{\beta^2}{2g} w_n^2 + \mu \beta^2 \right) S_{\mathbf{q}}(w_n) S_{-\mathbf{q}}(-w_n) + \left(\frac{\beta}{N} \right)^{\frac{1}{2}} N \beta H S_0(0) + \frac{J \beta^2}{2} \sum_n S_0(w_n) S_0(-w_n) \right]. \quad (70)$$

Calculando as integrais gaussianas, e usando a identidade

$$\prod_{n=1}^{\infty} \left[1 + \left(\frac{w\beta}{n\pi} \right)^2 \right] = \frac{\sinh w\beta}{w\beta}, \quad (71)$$

recuperamos a função de partição da versão quântica do modelo esférico elementar, dada pela Eq. (63).

3.3. Comportamento termodinâmico

A conexão com a termodinâmica é feita a partir do potencial

$$\phi_N = -\frac{1}{\beta N} \ln \Xi_N, \quad (72)$$

em que a função Ξ_N é dada pela Eq. (63), suplementada pela condição de vínculo esférico (64), com o devido cuidado na operação de limite termodinâmico.

3.3.1. Magnetização e suscetibilidade

Para obter a magnetização no limite termodinâmico, escrevemos

$$m_N = -\frac{\partial \phi_N}{\partial H} = \frac{H}{2(\mu - \frac{1}{2}J)}, \quad (73)$$

que é a mesma expressão do caso clássico. Para $H = 0$ e temperatura acima da temperatura crítica (isto é, na fase desordenada), o parâmetro μ é sempre maior que $J/2$, e a magnetização é nula. Abaixo da temperatura crítica (na fase ordenada), devemos tomar cuidado com o limite termodinâmico, pois, quando $\mu \rightarrow J/2$ e $H = 0$, pode ocorrer uma indeterminação. Então, como no caso clássico, para analisar a magnetização na fase ordenada

é conveniente usarmos o vínculo esférico, Eq. (64), para escrever m_N na forma

$$m_N^2 = 1 - \frac{1}{2N} \frac{g}{\omega_0} \coth\left(\frac{\beta\omega_0}{2}\right) - \frac{N-1}{2N} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{1/2} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right). \quad (74)$$

No limite termodinâmico, $m_N \rightarrow m$, temos

$$m^2 = 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{1/2} \coth\left(\frac{\beta\omega}{2}\right). \quad (75)$$

Portanto, na região ordenada, com $\mu = J/2$ e $H = 0$, obtemos a magnetização espontânea

$$m_0 = \pm \left\{ 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{g}{J}\right)^{1/2} \coth\left[\frac{1}{2}\beta(gJ)^{1/2}\right] \right\}^{1/2}, \quad (76)$$

que se anula sobre a curva crítica no plano $g - T$.

Vamos agora analisar o comportamento assintótico da magnetização espontânea:

(i) no limite $g \rightarrow 0$, recuperamos o resultado clássico, com expoente crítico $\beta = 1/2$. Isso se justifica porque a magnetização é determinada a partir da derivada primeira da energia livre com respeito ao campo. Como o termo adicional da energia livre, proporcional a $\ln \beta g$, não depende do campo, a magnetização se reduz ao resultado clássico;

(ii) no limite $T \rightarrow 0$, temos

$$m^2 \rightarrow 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{g}{J}\right)^{1/2}. \quad (77)$$

Nas vizinhanças do ponto crítico quântico, $T = 0$ com $g = g_c = 4J$, podemos escrever

$$m^2 \rightarrow -\frac{1}{2g_c} (g - g_c). \quad (78)$$

Portanto, o expoente crítico da versão quântica assume o mesmo valor característico das aproximações de campo médio, $\beta_g = 1/2$.

Para N fixo, podemos escrever

$$\chi_N = \frac{\partial m_N}{\partial H} = \frac{1}{2(\mu - \frac{1}{2}J)}. \quad (79)$$

Portanto, como no caso clássico, a suscetibilidade a campo nulo ($H = 0$) diverge na região ordenada ($T < T_c$), em que $\mu = J/2$. Na região desordenada, usando a Eq. (65), com $H = 0$, temos a condição de vínculo

$$1 = \frac{1}{2} \left(\frac{g}{2\mu}\right)^{1/2} \coth\left[\frac{1}{2}\beta(2g\mu)^{1/2}\right]. \quad (80)$$

Mesmo que se torne difícil obter uma forma explícita para μ em função da temperatura T e do parâmetro quântico g , a equação de vínculo define μ em função

dessas variáveis. Portanto, na região desordenada devemos analisar o comportamento assintótico nos limites $T \rightarrow 0$ e $g \rightarrow 0$:

(i) no limite $T \rightarrow 0$ e $g \rightarrow g_c^+$, a condição do vínculo, Eq. (80), conduz a $\mu = g/8$. Então,

$$\chi(g, T = 0) \propto (g - g_c)^{-1}, \quad (81)$$

resultando em $\gamma_g = 1$, que é um expoente de campo médio;

(ii) no limite $g \rightarrow 0$ e $T \rightarrow T_c^+$, a condição do vínculo, Eq. (80), fica reduzida a $\mu = 1/(2\beta)$. Nesse caso,

$$\chi(g = 0, T) \propto (T - T_c)^{-1}, \quad (82)$$

com $\beta_c = 1/J$ e $\gamma = 1$. Novamente, recuperamos o comportamento clássico usual da suscetibilidade quando $g \rightarrow 0$, pois não há dependência do termo adicional da “energia livre” do modelo quântico.

3.3.2. Entropia

Para N fixo temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_B} s_N &= \beta^2 \frac{\partial \phi_N}{\partial \beta} = -\ln 2 - \frac{1}{N} \ln \left(\sinh \frac{\beta\omega_0}{2} \right) - \\ &\frac{N-1}{N} \ln \left(\sinh \frac{\beta\omega}{2} \right) + \frac{1}{N} \frac{\beta\omega_0}{2} \coth \frac{\beta\omega_0}{2} + \\ &\frac{N-1}{N} \frac{\beta\omega}{2} \coth \frac{\beta\omega}{2}, \end{aligned} \quad (83)$$

que nos permite calcular a entropia por sítio da rede no limite termodinâmico ($s_N \rightarrow s$ quando $N \rightarrow \infty$). Assim temos

$$\frac{1}{k_B} s = -\ln 2 - \ln \left(\sinh \frac{\beta\omega}{2} \right) + \frac{\beta\omega}{2} \coth \frac{\beta\omega}{2}, \quad (84)$$

em que ω é a frequência dada pela Eq. (60).

Para $H = 0$, na região ordenada ($T < T_c$), temos $\mu = J/2$. Então, a entropia é dada por

$$\begin{aligned} \frac{1}{k_B} s(T, H = 0, g) &= -\ln 2 - \ln \sinh \left[\frac{\beta}{2} (gJ)^{1/2} \right] + \\ &\frac{\beta}{2} (gJ)^{1/2} \coth \left[\frac{\beta}{2} (gJ)^{1/2} \right]. \end{aligned} \quad (85)$$

Não é difícil notar que essa entropia é nula no limite $T \rightarrow 0$, corrigindo o comportamento divergente da versão clássica. Por outro lado, no limite $g \rightarrow 0$, não é possível recuperar o caso clássico, pois a entropia é definida como a derivada da “energia livre” com respeito à temperatura. Como o termo adicional depende explicitamente de β , a entropia contém um termo adicional proporcional a $\ln \beta g$. Já na região desordenada, $T > T_c$, como não é possível obter uma forma analítica para μ em função de T e g , calculamos apenas o comportamento assintótico: (i) no limite $T \rightarrow 0$ e $g \rightarrow g_c^+$, temos $\mu = g/8$. Portanto, a entropia se anula, corrigindo o caso clássico; (ii) No limite $g \rightarrow 0$ e $T \rightarrow T_c^+$, não recuperamos o caso clássico, devido à presença do termo proporcional a $\ln \beta g$.

4. Conclusões

A solução exata do “modelo esférico do ferromagnetismo” foi publicada há cerca de sessenta anos, em artigo clássico de Berlin e Kac [1], e continua representando um excelente laboratório de conceitos e técnicas associados às transições de fase e fenômenos críticos. A quantização do modelo esférico pode ser implementada através do formalismo canônico usual ou da técnica de representação em termos de integrais de trajetória. O “modelo esférico médio elementar”, incluindo interações de longo alcance entre todos os pares de sítios, é bem mais rudimentar do que o modelo original, mas conserva ainda as características essenciais do mecanismo de transição de fase do modelo esférico “mais realista”, na presença de interações de curto alcance. Analisamos o comportamento crítico do modelo esférico elementar, nos casos clássico e quântico, em particular obtendo as correções introduzidas pelas flutuações quânticas no limite de temperatura nula.

Sugerimos que a versão quântica do modelo elementar, que fornece um exemplo particularmente simples de uma transição de fase quântica, seja utilizada para analisar vários sistemas que têm sido abordados no contexto do modelo esférico. Por exemplo, embora o tratamento do modelo esférico para um vidro de spins de natureza quântica seja um problema difícil [16], torna-se muito simples analisar o modelo esférico na presença de campos aleatórios [14], que também constitui um dos sistemas paradigmáticos na investigação dos efeitos de desordem congelada. Considerando o modelo esférico quântico elementar na presença de uma configuração $\{H_{\mathbf{r}}\}$ de campos aleatórios independentes e identicamente distribuídos, com média nula, $\langle H_{\mathbf{r}} \rangle = 0$, e variância $\langle H_{\mathbf{r}} H_{\mathbf{r}'} \rangle = \Delta^2 \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}$, é fácil obter uma expressão para a fronteira crítica, em termos dos parâmetros T , Δ e g , verificar que não há um ponto tricrítico, e mostrar que as flutuações associadas à desordem são sempre mais relevantes do que as flutuações quânticas.

Referências

- [1] T.H. Berlin and M. Kac, Phys. Rev. **86**, 821 (1952).
 [2] Marc Kac, Physics Today **17**, 40 (1964).

- [3] G.S. Joyce, in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and M.S. Green (Academic Press, New York, 1972), v. 2.
 [4] H.W. Lewis and G.H. Wannier, Phys. Rev. **88**, 682 (1952).
 [5] H.W. Lewis and G.H. Wannier, Phys. Rev. **90**, 1131 (1953).
 [6] C.C. Yan and G.H. Wannier, J. Math. Phys. **6**, 1833 (1965).
 [7] G. Obermair, in: *Dynamical Aspects of Critical Phenomena*, edited by J.I. Budnick and M.P. Kawatra (Gordon and Breach, New York, 1972), p. 137.
 [8] Th. M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. Lett. **74**, 4293 (1995).
 [9] R. Serral Gracià and Th. M. Nieuwenhuizen, Phys. Rev. E **69**, 056119 (2004).
 [10] T. Vojta, Phys. Rev. B **53**, 710 (1996).
 [11] L. Chayes, V.J. Emery, S.A. Kivelson, Z. Nussinov and G. Tarjus, Physica A **225**, 129 (1996).
 [12] Z. Nussinov, Phys. Rev. B **69**, 014208 (2004).
 [13] P.F. Biezobaz and S.R. Salinas, Physica A **391**, 6399 (2012).
 [14] T. Vojta and M. Schreiber, Phys. Rev. B **53**, 8211 (1996).
 [15] D. Bolle, Th. M. Nieuwenhuizen, I. Pérez-Castillo and T. Verbeiren, J. Phys. A: Math. Gen. **36** 10269 (2003).
 [16] Pedro C. Menezes and Alba Theumann, Phys. Rev B **75**, 024433 (2007); Phys. Rev. B **78**, 054444 (2008); Phys Rev. B **79**, 094412 (2009).
 [17] M.H. Oliveira, M.D. Coutinho-Filho and E.P. Raposo, Phys. Rev. B **72**, 214420 (2005).
 [18] M.H. Oliveira, E.P. Raposo and M.D. Coutinho-Filho, Phys. Rev. B **74**, 184101 (2006).
 [19] M. Kastner and O. Schnetz, J. Stat. Phys. **122**, 1195 (2006).
 [20] Ashok Das, *Field Theory: A Path Integral Approach* (World Scientific, Singapore, 2006).
 [21] J.W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Westview Press, New York, 1998).
 [22] F. London, Phys. Rev. **54**, 947 (1938).
 [23] Kerson Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley, New York, 1963).